

关于Stiff问题的几种数值方法

王 健

摘 要

本文针对 Stiff 方程线性问题, 综合地给出了几种最有效的数值方法, 其中对 Gear 方法及 Enright 含二阶导数方法进行了详细的叙述, 并对所给方法予分析和比较, 指出该方面研究的某些发展趋势。

一、引 言

Stiff (病态) 方程是在许多应用领域中经常遇到的一类特殊而重要的常微分方程。由于这类方程具有相差很大的时间常数, 往往给通常的数值解法带来了不可克服的困难。

设方程组:

$$\vec{y}' - \vec{f}(t, \vec{y}) = 0 \quad t \in [a, b] \quad (1)$$

(其中 $\vec{y} = [y^1, y^2, \dots, y^s]^T$, $\vec{f} = [f^1, f^2, \dots, f^s]^T$), 有一个特解 $\vec{y} = \vec{y}(t)$ 。我们将 (1) 在 $\vec{y}(t)$ 的领域中线性化, 取 $\vec{f}(t, \vec{y}) = \vec{f}(t, \vec{y}(t)) + J(t)(\vec{y} - \vec{y}(t))$, 其中

$$J(t) = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}} \bigg|_{\vec{y} = \vec{y}(t)},$$

即得线性方程组:

$$\vec{y}' - J(t) \vec{y} = \vec{F}(t) \quad (2)$$

其中 $\vec{F}(t) = \vec{f}(t, \vec{y}(t)) - J(t) \vec{y}(t)$ 是已知函数。假设矩阵 $J(t)$ 具有互异特征值 $\lambda_i (i = 1, 2, \dots, s)$, 且在 t 的某一区间内 $J(t)$ 变化充分小, 则 (2) 的通解可表示成:

$$\vec{y} = \vec{y}(t) + \sum_{i=1}^s C_i e^{\lambda_i t} \xi_i \quad (3)$$

其中 C_i 为常数, ξ_i 为相应于 λ_i 的特征向量。我们欲通过对解 (3) 的分析来确定方程 (1) 是否为 Stiff 方程。

本文收到日期 1982 年 8 月 30 日。

首先要求方程(2)是局部稳定的, 须有 $\operatorname{Re} \lambda_i < 0 (i = 1, 2, \dots, s)$; 如再令 $\max |\operatorname{Re} \lambda_i| = |\operatorname{Re} \lambda_u|$, $\min |\operatorname{Re} \lambda_i| = |\operatorname{Re} \lambda_u|$, 称 $\frac{1}{|\operatorname{Re} \lambda_u|}$ 为(2)的局部“时间常数”。则关于方程(1)有定义:

定义 1 (Lambert, 1973) 初值问题:

$$\vec{y}' = \vec{f}(t, \vec{y}), \quad \vec{y}(a) = \vec{\eta}, \quad t \in [a, b]$$

称为在区间 $I \subset [a, b]$ 内是 Stiff 的, 如果

$$\textcircled{1} \operatorname{Re}(\lambda_i) < 0, \quad (i = 1, 2, \dots, s)$$

$$\textcircled{2} |\operatorname{Re} \lambda_u| \gg |\operatorname{Re} \lambda_u|$$

其中 λ_i 是矩阵 $J(t) = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}}$ 的特征值。

并称 $S(t) = |\operatorname{Re} \lambda_u| / |\operatorname{Re} \lambda_u|$ 为 Stiff 比。由此可见, 所谓 Stiff 问题是指方程(1)本身的数学问题, 而并不涉及数值方法。通常当 $S(t)$ 达到 $O(10^1)$ 数量级时便认为方程(1)是 Stiff 的, 而在实际问题中 $S(t)$ 常可达 $O(10^6)$ 量级。

我们要数值地求解 $\vec{y}(t)$, 往往需要追踪到分量 $e^{\lambda_u t}$ 至可忽略为止, 即 $|\operatorname{Re} \lambda_u|$ 的大小决定了所需的积分区间的长度, 另外为满足数值解的绝对稳定性, 则要求所取积分步长 h 能使复数值 $h\lambda$ 在绝对稳定域内; 而其积分步数约为 $S(t)$ 。所以, 如用具有有限绝对稳定域的数值方法来求解 Stiff 问题, 势必就要在很长的积分区间中使用很小的步长来进行计算, 而导致计算工作量巨大及带来舍入误差的巨增; 这在实际计算中往往是不可行的。

本文针对 Stiff 方程的特殊性提出相应稳定性的概念, 并给出几种适合解 Stiff 问题的数值方法, 最后对有关解 Stiff 问题的数值方法进行比较与讨论, 并指出当前这方面的某些发展趋势。

二、有关稳定性的定义

对于通常的线性 K 步方法

$$\sum_{i=0}^K \alpha_i y_{n-i} + h \sum_{i=0}^K \beta_i f_{n-i} = 0 \quad (4)$$

将其应用于模型方程 $y' = \lambda y$, 得到差分方程:

$$\sum_{i=0}^K (\alpha_i + h\lambda\beta_i) y_{n-i} = 0 \quad (5)$$

则其相应的稳定多项式为

$$\pi(\xi_i; h\lambda) = \sum_{i=0}^K (\alpha_i + h\lambda\beta_i) \xi_i^{K-i} \quad (6)$$

我们称集合:

$S = \{h\lambda \mid \pi(\xi_i; h\lambda) \text{ 的一切根位于单位圆内} \}$ 为方法(4)的绝对稳定域。

G. Dahlquist 针对 Stiff 方程在稳定性上出现的问题提出 A 稳定的概念:

定义 2 一个数值方法称为是 A 稳定的, 如果它的绝对稳定域 S 包含了 $h\lambda$ 复平面的整个左半平面 ($R_e(h\lambda) > 0$)。

可见其 A 稳定的方法在稳定性方面对步长 h 是无需加任何限制的, 但是 Dahlquist 同时给出了: “A 稳定的隐式多步法其最高阶不超过 2, 显式多步法不可能是 A 稳定的” 这一限制性结论。由于该结论对方法阶数的限制, 我们则考虑或者放弃线性多步法而使用诸如隐式 Runge-Kutta 方法等其它方法, 或者在稳定性方面做适当放宽而来寻找满足一定稳定性要求的线性多步法, 对此我们给出以下概念:

定义 3 (Widlund, 1967) 一个数值方法称为是 $A(\alpha)$ 稳定的, 如果它的绝对稳定域包含一个无限楔形区域: $W_\alpha = \{h\lambda \mid \pi - \alpha < \arg(h\lambda) < \pi + \alpha, \alpha \in (0, \pi/2)\}$, 见图 1。一个方法称为是 $A(0)$ 稳定的, 如果对于充分小的 $\alpha \in (0, \pi/2)$ 它是 $A(\alpha)$ 稳定的。一个方法称为是 A。稳定的, 如果它的绝对稳定域包含 $h\lambda$ 平面的负实轴。

Gear 进一步放宽了稳定性的条件, 并又同时考虑了方法的精确度, 给出了 Stiff 稳定的概念:

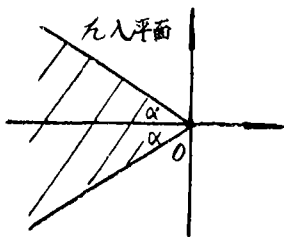


图 1 $A(\alpha)$ 稳定

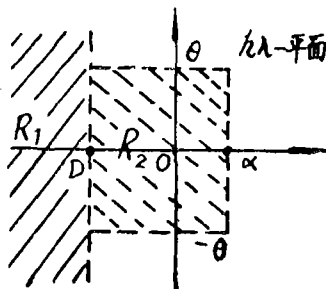


图 2 Stiff 稳定

定义 4 (Gear, 1971) 一个数值方法称为是 Stiff 稳定的, 如果:

- (1) 在区域 $R_1 = \{h\lambda \mid R_e(h\lambda) \leq D, D < 0\}$ 中是绝对稳定的;
- (2) 在区域 $R_2 = \{h\lambda \mid D < R_e(h\lambda) < \alpha, |I_m(h\lambda)| < \theta\}$ 中是绝对稳定的, 而且是精确的。见图 2 所示。

Gear 给出该定义的理由是: 对于解(3)中的每个分量 $\bar{y} = e^{\lambda t}$ 来说, 每积分一步其振幅的改变为原来的 $e^{\lambda h}$ 倍, 如令 $\lambda h = u + iv$, 则对适当大的 $|D|$, 在 R_1 中 $\bar{y}$ 很快地就趋向零了, 所以在 R_1 中只要满足稳定性要求即可。在 R_2 中, 因为通常 α 取得较小 ($\alpha \approx 0$), 这时考虑到 $\bar{y}$ 在虚轴附近几乎是等幅振荡的, 所以在 R_2 中除要满足稳定性要求外, 还须保证解的精确度 (即要求在每个振荡周期内有 10~12 个节点) 而一般取 $\theta \leq \pi/5$; 而对于 $u > \alpha > 0$ 及 $|I_m(h\lambda)| > \theta$ 部分来说, 由于这时对 h 有过多的限制, 故而不予采用。

以上给出了几种稳定性的定义, 它们之间有如下关系:

$$A \text{ 稳定} \implies A(\alpha) \text{ 稳定} \implies A. \text{ 稳定}$$

$$\uparrow \text{找某 } \alpha \text{ 值}$$

$$Stiff \text{ 稳定}$$

可见, 这些定义至少要求方法是 A。稳定的。关于 A。稳定我们有结论: “凡 A。稳定的线性多步法必须是隐式的”。(证明见[3])

最后我们还注意到, 由于 Jacobi 迭代的收敛条件是: $\|h\beta \cdot \frac{\partial f}{\partial y}\| < 1$, 如取 L_2 范数则有 $h < \frac{1}{|\beta \cdot \lambda_{\max}|}$, 其中 $\lambda_{\max}$ 是 $\frac{\partial f}{\partial y}$ 的特征值, 显然这对 Stiff 问题是不适用的。所以我们一般使用 Newton-Raphson 迭代来求 Stiff 问题的数值解。

三、解 Stiff 问题的几种数值方法

我们如记 $\vec{y}_{n-1}$ 为列向量: $\vec{y}_{n-1} = [y_{n-1}, y_{n-2}, \dots, y_{n-k}, hy'_{n-1}, \dots, hy'_{n-k}]^T$, 记 $2K$ 阶常数方阵

$$B = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \dots & \alpha_k & \beta_1 & \dots & \beta_k \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \gamma_1 & \dots & \gamma_k & \delta_1 & \dots & \delta_k \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (a)$$

且将微分方程写成 $G(\vec{y}_n) = -(\vec{y}_n)_K + hf(\vec{y}_n)_0 = -hy'_n + hf(y_n) = 0$, 这里将 $\vec{y}_n$ 的分量从 0 开始标号, 用 $(\vec{y}_n)_i$ 表示 $\vec{y}_n$ 的第 i 个分量, 则公式:

$$\vec{y}_n^{(0)} = B \vec{y}_{n-1} \quad (1)$$

及
$$\vec{y}_n^{(s+1)} = \vec{y}_n^{(s)} + \vec{C} G(\vec{y}_n^{(s)}) \quad (2)$$

(其中 $s = 1, 2, \dots, N$, N 为迭代次数) 就给出了线性 K 步方法预测——校正公式 (P—C 公式) 的一般形式, 其 $\vec{C}$ 为常向量, 适当地选取 B , $\vec{C}$ 则可得所需的各种 P—C 公式。

因为只要能得到足够的初始信息而可改变存贮的形式, 所以如设 T 是与 $\vec{y}_n$ 维数相同的非奇异矩阵, 而令 $\vec{a}_n = T \vec{y}_n$, 并将它代入 (1) 与 (2) 式中, 则可得等价的方法^[1]

$$\vec{a}_n^{(0)} = A \vec{a}_{n-1} \quad (3)$$

$$\vec{a}_n^{(s+1)} = \vec{a}_n^{(s)} + \vec{L} F(\vec{a}_n^{(s)}) \quad (4)$$

其中 $A = TBT^{-1}$, $\vec{L} = T\vec{C}$, $F(\vec{x}) = G(T^{-1}\vec{x})$, 且可证明对于等价方法来说其稳定性及截断误差均相同。所以对于 K 步方法 (1)(2), 我们如取 $\vec{y}_n = [y_n, hy'_n, \dots, hy'_{n-k+1}]^T$, 取新向量为 $\vec{a}_n = [y_n, hy'_n, \frac{h^2}{2!} y''_n, \dots, \frac{h^k}{k!} y_n^{(k)}]^T$, 则由变换 $\vec{a}_n = T \vec{y}_n$ 可得到等价方法 $\vec{a}_n = A \vec{a}_{n-1}$,

其中 A 为 Pascal 矩阵, 其元素 (i, j) 的值为 $\binom{j}{i}$ ($k > j \geq i \geq 0$), 而称这种等价方法是 Nordsieck 形式的。可以证明, 如果有 $\vec{a}_n = A \vec{a}_{n-1}$ 成立, 则其矩阵 A 必为 Pascal 矩阵。

(一) Gear 方法及其标准型

由于 Dahlquist 提出了线性多步法为 A 稳定的限制性结论, Gear 在给出了 Stiff 稳定的

定义后, 对一些 D, α, θ 找到了 $K \leq 6$ 的 K 步 K 阶为 Stiff 稳定的方法。

对于线性 K 步法的稳定特征方程: $\rho(\xi) + h\lambda\sigma(\xi) = 0$, 其中

$$\rho(\xi) = \sum_{i=0}^K \alpha_i \xi^{k-i}, \quad \sigma(\xi) = \sum_{i=0}^K \beta_i \xi^{k-i},$$

考虑到适合 Stiff 问题的多步法至少应该是 A. 稳定的, 而当 $\lambda h \rightarrow -\infty$ 时其方程退化为 $\sigma(\xi) = 0$, 于是便要求选取根均在单位圆内的 $\sigma(\xi)$, 由此 Gear 首先取了 $\sigma(\xi) = \beta_0 \xi^k$ 这样的形式, 从而得到一类 K 步 K 阶的 Gear 方法, 其 P—C 式形式为:

$$y_n^{(0)} = \sum_{i=1}^K \alpha_i y_{n-i} + \beta_1 h y'_{n-1} \quad (5)$$

$$y_n^{(s+1)} = \sum_{i=1}^K \alpha_i^* y_{n-i} + \beta_0^* h y_n^{(s)} \quad (6)$$

将它们写成向量形式:

$$\vec{y}_n^{(0)} = B \vec{y}_{n-1} \quad (7)$$

$$\vec{y}_n^{(s+1)} = \vec{y}_n^{(s)} + \vec{C} G(\vec{y}_n^{(s)}) \quad (8)$$

其中 $\vec{y} = [y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-k+1}, h y'_n]^T$, $\vec{C} = [\beta_0^*, 0, \dots, 0, 1]^T$ 均为 $k+1$ 维列向量, 其中

$$B = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_k & \beta_1 \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ & 1 & \dots & 0 & 0 \\ & & \ddots & 1 & 0 \\ & & & & 1 \\ y_1 & y_2 & \dots & y_k & \delta_1 \end{bmatrix} \quad (b)$$

为 $k+1$ 阶常矩阵, $\alpha_i^* = \alpha_i - \beta_0^* \gamma_i$, $\beta_1 = \beta_0^* \delta_1$ ($i=1, 2, \dots, k$).

以下给出 Gear 方法校正公式的具体构造法。在特征多项式中, 令 $\sigma(\xi) = \beta_0^* \xi^k$, 令 $\xi = 1+z$, 则由公式^[2]:

$$\rho(1+Z) + \ln(1+Z) \cdot \sigma(1+Z) = C_{p+1} Z^{p+1} + O(Z^{p+2}) \quad (9)$$

可定得 $\rho(\xi)$, 从而可得到线性算子 $L[y(x), h] = \rho(E) \cdot y_{n-k} + h\lambda\sigma(E)y'_{n-k}$, 其中 $E y_n = y_{n+1}$ 为位移算子。例如 当 $k=1$ 时, 取 $\sigma(\xi) = \beta_0^* \xi$, 则由(9)式得到 $\rho(1+Z) = -\ln(1+Z) \beta_0^* (1+Z) + O(Z^2) = -\beta_0^* Z + O(Z^2)$, 通常我们取 $\alpha_0 = -1$, 所以可取 $\beta_0^* = 1$ 而得到 $\rho(\xi) = -\xi + 1$, 即可得公式 $y_n = y_{n-1} + h f_n$, 这就是后退 Euler 公式。当 $k=2$ 时, 取 $\sigma(\xi) = \beta_0^* \xi^2$, 则由(9)式可得 $\rho(1+Z) = -\beta_0^* (1+Z)^2 \cdot \ln(1+Z) + O(Z^3)$, 取 $\beta_0^* = 2/3$, 得到 $\rho(\xi) = -\xi^2 + \frac{4}{3}\xi - \frac{1}{3}$, 即有公式 $y_n = \frac{4}{3}y_{n-1} - \frac{1}{3}y_{n-2} + \frac{2}{3}h f_n$ 。对于 $k=3 \sim 6$ 同理可

得到相应的 Gear 校正公式; 其 $\sigma(\xi)$ 与 $\rho(\xi)$ 的系数已有表可查。

另外我们可在“基于微分上的多步公式”中取 $r=0$ (隐式), 也同样可推得 Gear 公式^[5]。

下面我们将给出 Gear 方法的 Nordsieck 形式以及 Gear 标准型, 我们令

$$\vec{a}_n = \left[y_n, hy'_n, \dots, \frac{h^k}{k!} y_n^{(k)} \right]^T,$$

并作非奇异变换: $\vec{a}_n = T \vec{y}_n$, 则得 Nordsieck 形式的 Gear 方法:

$$\vec{a}_n^{(a)} = A \vec{a}_{n-1} \quad (10)$$

$$\vec{a}_n^{(s+1)} = \vec{a}_n^{(s)} + \vec{L} F(\vec{a}_n^{(s)}) \quad (11)$$

其中 $\vec{L} = T \vec{C}$, $F(\vec{a}_n^{(s)}) = G(T^{-1} \vec{a}_n^{(s)})$, A 为 Pascal 矩阵。对于该 Nordsieck 形式如果迭代收敛的话, 则我们不难推得所谓 Gear 标准型^[2]:

$$\begin{aligned} \vec{a}_n^{(o)} &= A \vec{a}_{n-1} \\ \vec{a}_n^{(s+1)} &= \vec{a}_n^{(s)} - \vec{L} \left[-1 + \beta_0^* h \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}} \right]^{-1} \cdot F(\vec{a}_n^{(s)}) \end{aligned} \quad (12)$$

由于 Gear 方法的一些显著优点(见 §4)而被誉为计算机中首先可存的方法, 得到广泛的应用。

下面给出 Gear 方法的绝对稳定域。将 Gear 方法的校正公式应用于模型方程 $y' = \lambda y$ ($\text{Re} \lambda < 0$), 得到稳定特征方程

$$(1 - \beta_0 h \lambda) \xi^K - \left(\sum_{i=1}^K \alpha_i \xi^{k-i} \right) = 0,$$

解得

$$h\lambda = \frac{1}{\beta_0 \xi^K} \left[\xi^K - \sum_{i=1}^K \alpha_i \xi^{k-i} \right],$$

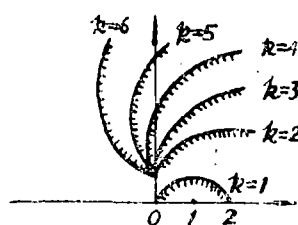


图 3 Gear 方法稳定域

令 $\xi = e^{i\theta}$, 则由给定的一组 θ 值(如取 $\theta = 0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, \dots$), 可画出 Gear 方法绝对稳定域的边界线, 如图 3 所示。对于 $k=1, 2$ 方法是 A 稳定的, 当 $k=3 \sim 6$ 时方法是 Stiff 稳定的。

(二) 含有二阶导数的 Enright 方法

考虑自治型方程初值问题

$$\vec{y}' = \vec{f}(\vec{y}), \quad \vec{y}(a) = \vec{\eta} \quad (1)$$

其二阶导数为 $\vec{y}'' = (\partial \vec{f} / \partial \vec{y}) \cdot \vec{f}(\vec{y})$, $\partial \vec{f} / \partial \vec{y}$ 为 Jacobi 矩阵。由于解 Stiff 问题必须用到 Newton 迭代, 从而要计算 Jacobi 矩阵 $\partial \vec{f} / \partial \vec{y}$, 所以如考虑直接采用含有 $\partial \vec{f} / \partial \vec{y}$ 的方法也并不增加太多的计算量。于是, Enright 就考虑了在线性多步法基础上再加用有二阶导数 $\vec{y}''$ 的方法:

$$y_n = \sum_{i=1}^K \alpha_i y_{n-i} + h \sum_{i=0}^K \beta_i y'_{n-i} + h^2 \sum_{i=0}^K \gamma_i y''_{n-i} \quad (2)$$

只要 β_0 或 γ_0 有一不为零, 则(2)式就提供了一个隐式的方法。记

$$\alpha(\xi) = \xi^K - \sum_{i=1}^K \alpha_i \xi^{K-i}, \quad \beta(\xi) = \sum_{i=0}^K \beta_i \xi^{K-i}, \quad \gamma(\xi) = \sum_{i=0}^K \gamma_i \xi^{K-i},$$

则(2)的绝对稳定域为: $R = \{h\lambda \mid \alpha(\xi) - h\lambda\beta(\xi) - (h\lambda)^2\gamma(\xi) = 0 \text{ 的一切根均在单位圆内}\}$ 。我们由稳定性的要求来确定 $\alpha(\xi)$, $\beta(\xi)$, $\gamma(\xi)$ 。首先考虑 A_0 稳定性, 我们取一切根均在单位圆内的 $\gamma(\xi)$, Enright 将其取作 $\gamma(\xi) = \gamma_0 \xi^K$; 接着考虑到要在原点邻域中有个较理想的稳定性态, 故取 $\alpha(\xi) = \xi^{K-1}(\xi - 1)$ 。于是便得到了适合解 Stiff 方程的 $k \leq 7$ 的 k 步 $k+2$ 阶方法:

$$y_n = y_{n-1} + h \sum_{i=0}^K \beta_i y'_{n-i} + h^2 \gamma_0 y_n'' \quad (3)$$

我们可用待定系数法来确定(3)式中的 β_i 及 γ_0 , $k \leq 7$ 的 β_i 及 γ_0 已有表可查。

Enright 采用了以下改进的 Newton 迭代法^[2]:

$$W_n^{(s)} \left(\vec{y}_n^{(s+1)} - \vec{y}_n^{(s)} \right) = -\vec{y}_n^{(s)} + \vec{y}_{n-1} + \beta_0 h \vec{f} \left(\vec{y}_n^{(s)} \right) + h \sum_{i=1}^K \beta_i \vec{y}'_{n-i} + h^2 \gamma_0 \left(\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}} \right) \Big|_{\vec{y} = \vec{y}_n^{(s)}} \cdot \vec{f} \left(\vec{y}_n^{(s)} \right),$$

($s = 0, 1, 2, \dots$), 来解方程(3)。其中

$$W_n^{(s)} = \left[I - h\beta_0 \frac{\partial \vec{f}(\vec{y}_n^{(s)})}{\partial \vec{y}} - h^2 \gamma_0 \left(\frac{\partial \vec{f}(\vec{y}_n^{(s)})}{\partial \vec{y}} \right)^2 \right],$$

当迭代不收敛或步长改变时才需重新计算 $W_n^{(s)}$ 。

下面给出方法(3)的绝对稳定域。由(3)的稳定多项式方程 $\pi(\xi; h\lambda) = (h\lambda)^2 \gamma(\xi) + h\lambda \beta(\xi) - \alpha(\xi) = 0$, 可解出

$$h\lambda = \frac{-\beta(\xi) \pm \sqrt{\beta^2(\xi) + 4 \cdot \alpha(\xi) \cdot \gamma(\xi)}}{2 \cdot \gamma(\xi)}$$

令 $\xi = e^{i\theta}$, 给出一组 θ 值则可画出其绝对稳定域的边界线, 如图4所示。可见 $K \leq 7$ 时方法都是 Stiff 稳定的。

(三)含二阶导数的变步长 P—C 公式

我们考虑对自治型方程初值问题

$$\vec{y}' = \vec{f}(\vec{y}), \quad \vec{y}(a) = \vec{\eta}, \quad t \in [a, b] \quad (1)$$

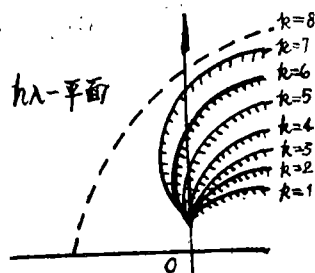


图4 Enright 方法
稳定域

两端积分, 则有

$$y(t_n) = y(t_{n-1}) + \int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t) dt \quad (2)$$

我们可由条件

$$p(t_{n-i}) = f_{n-i} \quad (j = 0, 1, 2, \dots, k-1) \quad (3)$$

$$p'(t_n) = f'(y_n)$$

唯一地确定一个 k 次 Hermite 插值多项式

$$p(t) = L(t) + \frac{f'(y_n) - L'(t_n)}{\omega'(t_n)} \cdot \omega(t) \quad (4)$$

其中

$$L(t) = \sum_{i=0}^{k-1} f_{n-i} \frac{\omega(t)}{(t-t_{n-i})\omega'(t)}, \quad \omega(t) = \prod_{i=0}^{k-1} (t-t_{n-i}).$$

用 $p(t)$ 来代替(2)式中的被积函数 $f(t)$, 则有

$$y_n = y_{n-1} + \int_{t_{n-1}}^{t_n} p(t) dt \quad (5)$$

再由条件

$$p_0(t_{n-i}) = f_{n-i} \quad (j = 1, 2, \dots, k) \quad (6)$$

$$p'_0(t_{n-1}) = f'_{n-1}$$

也可唯一地确定一个 k 次 Hermite 多项式 $p_0(t)$, 同样以 $p_0(t)$ 来代替(2)式中的 $f(t)$, 可得到

$$y_n^{(0)} = y_{n-1} + \int_{t_{n-1}}^{t_n} p_0(t) dt \quad (7)$$

然后由(5)式及(7)式我们可推得 P-C 公式^[3]:

$$y_n = y_n^{(0)} + h_n \beta_{n,0} (f_n - f_{n,0}) + h_n^2 \gamma_{n,0} (f'_n - f'_{n,0}) \quad (8)$$

其中 $h_n = t_n - t_{n-1}$, 为变步长, $f_{n,0} = p_0(t_n)$, $f'_{n,0} = p'_0(t_n)$, 而系数

$$h_n \cdot \beta_{n,0} = \frac{1}{g_{k-1}(t_n)} [g_{k-1}(1) - d \cdot g_{k-1}(2)], \quad h_n^2 \cdot \gamma_{n,0} = \frac{g_{k-1}(2)}{g_{k-1}(t_n)},$$

而 $g_i(j) = \int_{t_{n-1}}^{t_n} (t-t_{n-1})^{j-1} g_i(t) dt$, $g_i(t) = \prod_{i=1}^j (t-t_{n-i})$ ($j \geq 1$), $g_0(t) = 1$, $q_{k-1}(t_n) =$

$$= \prod_{i=1}^{k-1} (t_n - t_{n-i}), \quad d = \frac{q'_{k-1}(t_n)}{q_{k-1}(t_n)}. \text{ 不难算出 } g_0(j) = -\frac{(-h_n)^j}{j} (j = 1, 2, \dots, k+2),$$

及递推公式 $g_i(j) = h_n \cdot g_{i-1}(j) + g_{i-1}(j+1)$, 从而可确定 $h_n \beta_{n,0}$ 及 $h_n^2 \gamma_{n,0}$. 下面为了给出

$y_n^{(0)}$, $f_{n,0}$ 时方便起见, 我们将 $p_0(t)$ 用差商形式表示为 $p_0(t) = f_{n-1} + (t-t_{n-1})f[t_{n-1}, t_{n-1}]$
 $+ \dots + (t-t_{n-1})^2(t-t_{n-2}) \dots (t-t_{n-k+1})f[t_{n-1}, t_{n-1}, t_{n-2}, \dots, t_{n-k}] = f_{n-1} +$

$$+ \sum_{i=0}^{k-1} (t - t_n + h_n) \cdot q_i(t) f[t_{n-1}, t_{n-1}, \dots, t_{n-i-1}],$$

由此可得

$$f_{n,0} = p_0(t_n) = f_{n-1} + h_n \sum_{i=0}^{k-1} q_i(t_n) f[t_{n-1}, t_{n-1}, \dots, t_{n-i-1}],$$

而

$$f'_{n,0} = f[t_{n-1}, t_{n-1}] + \sum_{i=1}^{k-1} (h_n q'_i(t_n) + q_i(t_n)) \cdot f[t_{n-1}, t_{n-1}, \dots, t_{n-i-1}].$$

这样我们便可采用 Newton 迭代法来求解隐式(8)了。

(四) 变矩阵系数的多步方法

由于解 Stiff 问题的多步法不可避免地要计算 Jacobi 矩阵, 所以 Makinson 直接考虑了如下类单步法:

$$\vec{y}_{n+1} - \vec{y}_n = \sum_{i=1}^l h^i [a_i \vec{y}_{n+1}^{(i)} + b_i \vec{y}_n^{(i)}] \quad (1)$$

其中 $\vec{y}^{(i)}$ 为 i 阶导数, 这时只要 $l \geq 2$, 则方程(1)中就包含了 Jacobi 矩阵, 将(1)应用于一类特殊的线性 Stiff 方程

$$\vec{y}' = A \vec{y} + \vec{\phi}(x) \quad (2)$$

其中 A 是具有某种特殊结构的常数矩阵, 则可得到如下形式的方程:

$$\left[I - \sum_{i=1}^l h^i a_i A^i \right] \vec{y}_{n+1} = \left[I - \sum_{i=1}^l h^i b_i A^i \right] \vec{y}_n + \vec{\Psi}(x) \quad (3)$$

其中 $\vec{\Psi}(x)$ 是已知函数。只要我们适当地选取系数 a_i 及 b_i 就可使(3)是 A 稳定的, 且 $\vec{y}_{n+1}$ 前为线性因子的方法。例如, 我们取 $l=2$, 令 $\theta = 1 + \sqrt{3}/3$, 而 $a_1 = \theta$, $b_1 = 1 - \theta$, $a_2 = \frac{1}{2}(1/3 - \theta)$, $b_2 = 1/3 - 1/2\theta$, 则得到一个三阶的 A 稳定方法。

我们如将(3)推广, 可得到一类变矩阵系数的多步方法:

$$\sum_{i=0}^K \left[a_i^{(0)} I + \sum_{m=1}^S a_i^{(m)} h^m Q_n^m \right] \vec{y}_{n+i} = h \sum_{j=0}^K \left[b_j^{(0)} I + \sum_{m=1}^S b_j^{(m)} h^m Q_n^m \right] \vec{f}_{n+j} \quad (4)$$

其中 a_j , b_j 均为常系数, Q_n 是使对一切 n , $\|Q_n\|$ 都有界, 且

$$a_K^{(0)} I + \sum_{m=1}^S a_K^{(m)} h^m Q_n^m$$

非奇异的 $m \times m$ 阶常矩阵, 它随 n 而改变。

定义 方法类(4)称为是 A 稳定的, 如果将该方法应用于试验方程 $\vec{y}' = A \vec{y}$, 其中 A 是 $m \times m$ 常矩阵, 且 $\max \operatorname{Re} \lambda_i < 0$; 如取 $Q_n = -A$ 所得到的差分方程的一切解, 当 $n \rightarrow \infty$ 时, 对一切正步

长 h 都趋于零。

由这样定义的 $\overline{A}$ 稳定, 对方法类 (4) 甚至可取到当 $b_k^{(m)} = 0, (m = 0, 1, 2, \dots, S)$ 时都为 $\overline{A}$ 稳定的方法。且对方法类 (4) 有如下结论:

定理 稳定方法类 (4) 的最大阶可达到 $2S$, 且方法类 (4) 中直到 $2S$ 都有 $\overline{A}$ 稳定的方法存在。

(证明略)

Lambert 和 Sigardsson 已构造出几种 $\overline{A}$ 稳定的方法, 可用来有效地解决一些 Stiff 问题^[3]。

(五) 多步多导数方法

R. Jeltech 曾给出了以下一类多步多导数方法

$$\sum_{i=0}^K \alpha_i y_{n+i} + \sum_{i=0}^K \sum_{j=1}^l h^j \alpha_{ji} f^{(j-1)}(t_{n+i}, y_{n+i}) = 0 \quad (1)$$

其中 α_{ji} 为常系数。

我们可以看出方法 (1) 是某些多步法推广而得的一般形式。在 (1) 中如令 $l = 1$, 则就得到一般的线性 k 步方法; 令 $l = 2$, 即为我们前面提到过的含二阶导数方法的一般形式, 等等。对于方法类 (1) 我们可给关于 $A(0)$ 稳定以及 Stiff 稳定充要条件的代数表达式 (此处从略)。

四、有关方法的评述

我们在 § 3 中给出了几种适合解 Stiff 问题的数值方法。其中我们以 P-C 形式给出的 Gear 标准型

$$\begin{cases} \vec{a}_n^{(0)} = A \vec{a}_{n-1} \\ \vec{a}_n^{(s+1)} = \vec{a}_n^{(s)} - L \left[-1 + \beta_0^* h \frac{\partial f}{\partial y} \right]^{-1} \cdot F(\vec{a}_n^{(s)}) \end{cases}$$

形式较为简洁。由于预测公式中 A 是 Pascal 矩阵, 元素 (i, j) 的值为 $\binom{j}{i}$, 所以由关系式 $\binom{j}{i} + \binom{j}{i+1} = \binom{j+1}{i+1}$ 可知, 只要使用加法运算便可计算出 $A \vec{a}_{n-1}$, 其计算量是较小的。又

由于 Gear 标准型中存贮的向量 $\vec{a}$ 是以 Nordsieck 形式存放的, 所以在计算中可任意地变阶与变步长, 这样的数值方法使用起来也是相当方便的。Gear 方法是 k 步 k 阶的方法, 可达六阶是 Stiff 稳定的。Enright 曾对五种典型的数值方法进行了数值试验, 其结果表明 Gear 方法是最佳的^[10]。可是另一方面我们也看到 Gear 方法虽可达六阶是 Stiff 稳定的, 但当 k 较大 ($k = 5, 6$) 时, 该方法在虚轴附近的稳定性却较差, 这给许多问题带来了麻烦。所以曾有人对 Gear 方法的稳定性问题进行研究后, 对方法进行了如下形式的变更: 他们在

$$y_n = \sum_{i=1}^K \alpha_i y_{n-i} + h f_n$$

中将 $f(y_n)$ 改为 $f(y_n + \delta_k)$ 而引入了阶数不低于 $p-1$ 的参数 δ_k , 从而得到一类非线性的多步方法^[9]:

$$y_n = \sum_{i=1}^K \alpha_i y_{n-i} + hf(y_n + \delta_k) \quad (1)$$

经数值试验表明如此变更得到的方法(1)较 Gear 方法在稳定方面有所改善。但是 Gear 曾认为: 对线性多步法进行类似这样想法的改造在稳定性方面不可能有太大的改善, 而相反会引起计算量的巨增。目前关于 Gear 方法在稳定性方面的研究仍在进行之中。

Enright 提出的含二阶导数的多步法(见 § 3), 其迭代形式要较 Gear 方法复杂, 但这种方法可达九阶为 Stiff 稳定的。Enright 曾经指出对某些特殊问题来说这类方法要较 Gear 方法更为可靠, 更为有效。我们设想如能给 Enright 方法配上合适的预测公式, 则可望收到更好的效果。

在 § 3 中我们曾给出了另外三类方法, 它们就形式复杂性以及运算工作量来说, 都要比以上两种方法麻烦。但它们却都具有一般形式, 从某种意义上来说, 都包含了 Gear 与 Enright 方法, 还具有更高的阶数和更好的稳定性。例如, 其中变步长含二阶导数的方法

$$y_n = y_n^{(0)} + h_n \beta_{n,0}(f_n - f_{n,0}) + h_n^2 \gamma_{n,0}(f'_n - f'_{n,0}) \quad (2)$$

当取 $h_n = h$ 为定步长时, 就包含了 Enright 二阶导数的方法, 且此时方法(2)的局部误差常数为 $\delta_k = \gamma_{k+1}^* - \left(\frac{k}{k+1}\right) \gamma_k^*$, 其绝对值要较 Adams-Moulton 公式的局部误差常数 γ_k^* 小。

因此对这三类方法, 我们希望能使它们进一步地得到具体应用而产生出较为实用的具体方法。

由于 Dahlquist 关于线性多步法为 A 稳定的限制性结论, 而目前国内外广泛存在一种不直接使用线性多步法的趋势。继 Dahlquist 将外推技巧应用于梯形法则之后, 人们普遍地重视了使用外推技巧来实现对方法的改进。一般地, 我们可利用带自由参数的一族二阶的 A 稳定的线性多步方法, 对已给问题分别进行积分, 求得一系列数值解的近似值, 然后再将这些值进行某种组合, 以此来达到提高精确度的目的。在这方面 W. Liniger 已得到了直到六阶都为 A 稳定的方法^[10]。

目前关于 Stiff 问题方面的理论工作进展还不快, 有许多工作还未做, 在变系数, 非线性, 含有间断点以及高度振荡方面的研究更是刚刚开始, 有许多方法还有待我们去进一步地改进与完善。许多问题还是开放性的, 有待我们去研究。

参 考 文 献

- [1] J.D. Lambert, Computational Methods in Ordinary Differential Equation.
- [2] 南京大学数学系计算数学专业, 常微分方程数值解法。
- [3] 南京大学, 徐洪义, 包雪松, Stiff 常微分方程数值解的某些多步方法及其稳定性。
- [4] G. Hall and M. Watt, Modern Numerical Methods for Ordinary Differential Equation.
- [5] Peter, Henrici, Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equation.

- [6] SIAM(1974) Vol. 11 No 2, Second Derivative Multistep Methods for Stiff Ordinary Differential Equation.
- [7] C.W.Gear, Numerical initial Value problem in Ordinary Differential Equation.
- [8] 中国科学院数学所孙耿, 中国科学院计算中心毛祖范, 高等学校计算数学学报, 关于变更的 Gear 方法, 1981 第 3 期。
- [9] Lapidus, L and Schiesser.W.E., Numerical Methods for Differential Systems.

Some Numerical Methods on The Stiff Problems

Wang Jian

Abstract

In this paper, several most effective numerical methods for the linear problem of Stiff equations are shown, in which Gear's method and Enright's method with second derivative are studied in details.

After analysis and comparison with the methods above, some trends of the reseach in this respect are given.