

一类stiff稳定的非线性多步法

杨世孝
(计算机科学系)

摘要

本文导出了一类非线性多步法,它们是 k 步 $k+2$ 阶stiff稳定的,而且比同步的赵双钟方法^[2]高一阶.同时,指出了[2]中的公式 A_4, N_4 几乎不是(零)稳定的.最后,给出数值试验结果.

§1. 公式的建立

对于stiff常微分方程初值问题

$$(1.1) \quad y' = f(t, y), \quad y(a) = y_0, \quad t \in [a, b]$$

考虑形如

$$(1.2) \quad y_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y_{n+j} + h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j} + h \beta_{k+1} f(t_{n+k+1}, y_{n+k+1}^*)$$

的方法,其中

$$(1.3) \quad y_{n+k+1}^* = \sum_{j=0}^k \alpha_j^* y_{n+j} + h \beta_k^* f_{n+k}.$$

使得: (i) 公式(1.3)是 $y(t_{n+k+1})$ 的 $k+1$ 阶逼近;

(ii) 公式(1.2)是 $k+2$ 阶的;

(iii) 公式(1.2)是强(零)稳定的.

由(i), (ii), 系数必须满足方程

$$(1.4) \quad \begin{cases} 1 - \alpha_{k-1} - \dots - \alpha_0 = 0 \\ k - (k-1)\alpha_{k-1} - \dots - \alpha_1 - (\beta_{k+1} + \beta_k + \dots + \beta_0) = 0, \\ \frac{1}{l!} [k^l - (k-1)^l \alpha_{k-1} - \dots - \alpha_1] - \frac{1}{(l-1)!} [(k+1)^{l-1} \beta_{k+1} + k^{l-1} \beta_k + \dots + \beta_1] = 0, \\ l = 2, 3, \dots, k+2 \end{cases}$$

而系数 α_j^* 和 β_k^* 的值由表1给出.

本文1984年11月收到

表1 α_j^* 和 β_k^* 的值

k	α_0^*	α_1^*	α_2^*	α_3^*	α_4^*	β_k^*
1	1	0				2
2	$-\frac{1}{2}$	3	$-\frac{3}{2}$			3
3	$\frac{1}{3}$	-2	6	$-\frac{10}{3}$		4
4	$-\frac{1}{4}$	$\frac{5}{3}$	-5	10	$-\frac{65}{12}$	5

1. 令 $\alpha_{k-1} = 1; \alpha_j = 0, j < k-1$, 则得到公式

$$(I)_k: y_{n+k} = y_{n+k-1} + h \sum_{i=0}^k \beta_i f_{n+i} + h \beta_{k+1} f(t_{n+k+1}, \sum_{i=0}^k \alpha_i^* y_{n+i} + h \beta_k^* f_{n+k}).$$

公式 $(I)_k$ 的系数及稳定性参数由表 2 给出, 图 1 画出了它们的绝对稳定区域的边界, 沿着边界曲线按顺时针走向, 曲线左边的区域就是该方法的绝对稳定区域. 公式 $(I)_k$ 与 Adams-Moulton 公式一样, 具有最好的(零)稳定性; 又象 Gear 后向微分公式一样, 当 $|h| \rightarrow \infty$ 时, 其绝对稳定性的特征方程的根都趋于零, 所以特别适用于强stiff问题. 对于线性自治系统 $y' = Ay$, $(I)_k$ 与含二阶导数的 Enright 方法是一致的, 但公式 $(I)_k$ 不用算二阶导数.

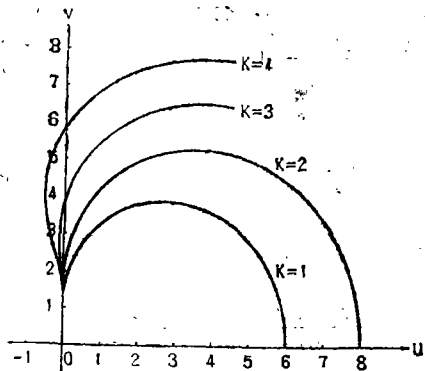


图1 方法 $(I)_k$ 的绝对稳定区域(关于 u 轴对称)

表2 方法 $(I)_k$ 的系数及稳定性参数

k	阶	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	D_{min}	α_{max}
1	3	$\frac{5}{12}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{12}$				A-稳定	
2	4	$-\frac{1}{24}$	$\frac{13}{24}$	$\frac{13}{24}$	$-\frac{1}{24}$			A-稳定	
3	5	$\frac{11}{720}$	$-\frac{74}{720}$	$\frac{456}{720}$	$\frac{346}{720}$	$-\frac{19}{720}$		0.1	87°
4	6	$-\frac{11}{1440}$	$\frac{77}{1440}$	$-\frac{258}{1440}$	$\frac{1022}{1440}$	$\frac{637}{1440}$	$-\frac{3}{160}$	0.53	81.9°

注: 当 $Re(h\lambda) < -D_{min}$ 时, 方法是绝对稳定的, α_{max} 是 $A(\alpha)$ -稳定中 α 的最大值

2. 若要求方法的绝对稳定区域尽可能大, 则可得另一类方法, 我们把它记为 $(\text{I})_k$, 但它必须以减弱方法的(零)稳定性作为代价, 见表 3. 它们的绝对稳定区域如图 2 所示.

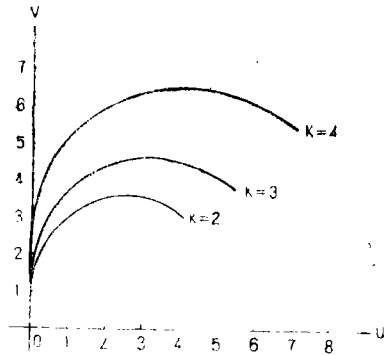


图 2 方法 $(\text{I})_k$ 的绝对稳定区域

§2. 关于迭代过程的说明

公式(1.2)–(1.3)是关于 y_{n+k} 的非线性方程(组), 它可以写为

$$(2.1) \quad Q(y_{n+k}) = y_{n+k} - \sum_{j=0}^{k-1} (\alpha_j y_{n+j} + h\beta_j f_{n+j}) - h\beta_k f(t_{n+k}, y_{n+k}) - h\beta_{k+1} f(t_{n+k+1}, \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i^* y_{n+i} + \alpha_k^* y_{n+k} + h\beta_k^* f(t_{n+k}, y_{n+k})) = 0$$

用Newton迭代法求解, 有

$$(2.2) \quad \left[\frac{\partial Q}{\partial y_{n+k}} \right]^{(m)} \left(y_{n+k}^{(m+1)} - y_{n+k}^{(m)} \right) = -Q(y_{n+k}^{(m)})$$

$m = 0, 1, \dots$

其中

$$\left[\frac{\partial Q}{\partial y_{n+k}} \right]^{(m)} = 1 - h(\beta_k + \beta_{k+1} \alpha_k^*) \frac{\partial f}{\partial y} - h^2 \beta_{k+1} \beta_k^* \left[\frac{\partial f}{\partial y} \right]^2,$$

这里 $\frac{\partial f}{\partial y}$ 在 (t_{n+k}, y_{n+k}) 附近取值, 而且它的元素采用如下近似方法计算:

$$\frac{\partial f_i(t, y)}{\partial y_i} = \frac{1}{\varepsilon} [f_i(t, y_1, \dots, y_{i-1}, y_i + \varepsilon, y_{i+1}, \dots, y_N) - f_i(t, y_1, \dots, y_N)]$$

表 3 方法 $(\text{I})_k$ 的系数及稳定性参数

k	阶	α_0	α_1	α_2	α_3	D_{\min}	α_{\max}
2	4	$\frac{4}{5}$	$\frac{9}{5}$			A-稳定	
3	5	$\frac{1}{5}$	$\frac{172}{125}$	$\frac{272}{125}$		2.17×10^{-6}	89.999°
1	6	0	$\frac{7434}{12645}$	$\frac{2707}{1405}$	$\frac{3286}{1405}$	0.036	89°
k		β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5
		$\frac{41}{120}$	$\frac{11}{120}$	$\frac{85}{120}$	$\frac{3}{40}$		
		$\frac{3481}{30000}$	$\frac{14654}{30000}$	$\frac{1848}{10000}$	$\frac{18926}{30000}$	$\frac{1489}{30000}$	
4		$\frac{13}{450}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{6418}{12645}$	$\frac{1786}{12645}$	$\frac{4723}{8430}$	$\frac{2116}{63225}$

其中, $f = (f_1, \dots, f_N)^T$ 是微分方程(1.1)右端的函数向量, 而 $y = (y_1, \dots, y_N)^T$ 是未知函数向量. 在下面的数值试验中, 取 $\epsilon = 10^{-5}$. Jacobi 矩阵 $\frac{\partial f}{\partial y}$ 不必每步计算, 例如, 在下面的数值试验中, 我们规定: 若在某一步中, 每迭代 3 次仍不收敛, 则重新计算 $\frac{\partial f}{\partial y}$, 否则保持不变.

§3. 数值试验

在这一节中, 我们通过数值例子来比较方法 (I)_k、(II)_k 和 A_k 的稳定性和精确度, 以及它们的适用性.

例 1 考虑初值问题

$$(3.1) \quad \begin{cases} y_1' = -\alpha y_1 - \beta y_2 + (\alpha + \beta - 1)e^{-t} \\ y_2' = \beta y_1 - \alpha y_2 + (\alpha - \beta - 1)e^{-t} \\ y_1(0) = y_2(0) = 1 \end{cases} \quad 0 < t \leq 20$$

其中, α, β 为参数, 对于任意的参数 α, β , (3.1) 的精确解都是 $y_1(t) = y_2(t) = e^{-t}$. Jacobi 矩阵 $\frac{\partial f}{\partial y}$ 的特征值是 $-\alpha \pm i\beta$. 现用 k 步 $k+2$ 阶的方法 (I)_k、(II)_k 及 k 步 $k+1$ 阶的赵双锁的 A_k 方法分别对 $h=0.1$, 而 $\alpha=1, \beta=15; \alpha=1, \beta=30; \alpha=1, \beta=200; \alpha=0, \beta=300$ 四种情况在 121 机上进行了计算, 求出当 $t=20$ 时的数值解, 起始值由精确解给出. 在计算中, 每一步的最后结果 y_{n+k} 作为下一步的迭代初值. 由于 $y_1(20)$ 和 $y_2(20)$ 的数值解很类似, 所以表 4 只对 $y_2(20)$ 的数值解进行比较.

从表 4 可见, 当 h 落在绝对稳定区域之内又不太接近绝对稳定区域边界时, 所有结果都是令人满意的, 结果的精度由方法的阶决定, 而且 k 步的方法 (I)_k、(II)_k 比 $k+1$ 步的方法 A_{k+1} 的结果还精确. 从这里可看到阶和绝对稳定性在数值计算中所起的作用.

例 2 考虑初值问题

$$(3.2) \quad \begin{cases} y_1' = 200y_2, \\ y_2' = -200y_1 \\ y_3' = y_1y_2 - 5y_3 - \cos 200t \\ y_1(0) = y_2(0) = y_3(0) = 1 \end{cases} \quad 0 < t \leq 2$$

其精确解为 $y_1(t) = \cos 100t + \sin 100t, y_2(t) = \cos 100t - \sin 100t, y_3(t) = e^{-5t}$. (3.2)

右端函数的 Jacobi 矩阵 $\frac{\partial f}{\partial y}$ 的特征值为 $\mu_1 = 100i, \mu_2 = -100i, \mu_3 = -5$. 我们以步长 $h=0.001$ 用方法 (I)_k、(II)_k 及 A_k 在 121 机上进行计算, 求出 $t=2$ 时的数值解. 起始值由精确解给出, 控制误差 (绝对) 取为 10^{-8} . 在计算中, 若第 n 步的最后结果为 y_{n+k} , 则可取

$$y_{n+k+1}^* = \sum_{j=0}^k \alpha_j^* y_{n+j} + h\beta_k^* f_{n+k}$$

表4 例1的数值解(精确解为 $y_2(20) = e^{-20} = 0.20611536 \times 10^{-8}$)

α	β	k	(I) _k		(II) _k		A _k	
			迭代次数	$y_2 = (\dots) \times 10^{-8}$	迭代次数	$y_2 = (\dots) \times 10^{-8}$	迭代次数	$y_2 = (\dots) \times 10^{-8}$
1	15	1	2	0.20612150			2	0.20536952
		2	2	0.20786424	2	0.20611473	2	0.20618039
		3	2	0.36484112	2	0.21090934	2	0.20610867
		4	2	0.17275229	2	1.6758255	3	211.24177
		5					2	-1591.0917
	86.1°							
1	30	1	2	0.20612178			2	0.20570925
		2	5	0.20611513	5	0.20611466	5	0.20614689
		3	5	0.20160844	6	0.20611540	6	0.20611188
		4		溢出	6	160.64904	6	0.20611614
		5					6	0.26175498
	88.09°							
1	200	1	2	0.20611743			2	0.20606262
		2	6	0.20611526	7	0.20611527	6	0.20611997
		3	7	0.20611537	8	0.20611537	8	0.20611492
		4	2	0.20611537	8	0.20611537	2	0.20611541
		5					3	0.20611536
	89.71°							
0	300	1	2	0.20611670			2	0.20608092
		2	5	0.20611529	5	0.20611530	5	0.20611842
		3	5	0.20611537	5	0.20611537	6	0.20611507
		4	6	0.20611537	6	0.20611537	6	0.20611539
		5					6	0.20611536
	90°							

注: 迭代次数指每步迭代到收敛的最小次数的最大者。

作为下一步的迭代初值; 也可取 y_{n+k} 作为下一步的迭代初值。两种做法所得的结果差不多。计算结果由表5给出。

例2是高频振荡的例子。实际上, 在每位时间内, 解的振荡分量有 $\frac{100}{2\pi} \approx 16$ 个完整的振荡。由表5可见, 方法(I)_k的效果最好, 方法(II)_k次之, 方法A_k最差。这说明本文所建立的方法, 比方法A_k更能适用于高频振荡问题。

表6列出了例1当 $\alpha = \beta = 0$ 时用方法(I)₄、(II)₄、A₄和Adams-Moulton(A-M) 四步五阶方法进行计算, 求得当 $l = 1 (h = 0.001)$ 时的结果。由于这时 $h = 0$, 而 $h \approx 0$, 所以结果的精确性由方法的阶和(零)稳定性所决定。因此, 我们用它来检验方法的(零)稳定性是合适的。由表6可见, 结果最好的方法是(I)₄和A-M, 特别是前者; (II)₄次之, A₄最差。究竟A₄的(零)稳定性如何? 我们再做进一步的分析。由[2]可知, 方法A₄的根多项式为

$$\rho(\lambda) \equiv \lambda^4 - 2.4162434\lambda^3 + 1.9187813\lambda^2 - 0.5888323\lambda + 0.0862944 \\ = (\lambda - 1)\rho_1(\lambda),$$

其中 $\rho_1(\lambda) = \lambda^3 - 1.4162434\lambda^2 + 0.5025379\lambda - 0.0862944$.

因为 $\rho_1(0.9999998) = -3.396 \times 10^{-8} < 0$, $\rho_1(0.9999999) = 3.307 \times 10^{-8} > 0$, 由介值定理, 在 0.9999998 与 0.9999999 之间, $\rho(\lambda)$ 还有一个根, 即方法 A_k 的根多项式 $\rho(\lambda)$ 几乎有以 $\lambda=1$ 为重根. 文[2]指出, 方法 A_k, N_k (它们的根多项式相同) 是“几乎” A -稳定的. 所以, 这个“几乎” A -稳定的方法又“几乎”不是(零)稳定的. 上面数值试验的结果正好反映这个情况. 在这里, 我们又明显地看到了阶和(零)稳定性在数值计算中所起的作用.

表 5 例 2 数值结果

方法	k	数值解			最大相对误差 $= \max_{1 \leq i \leq 3} \frac{ y_i^* - y_i }{y_i^*}$
		y_1	y_2	y_3	
(I) _k	1	-0.38513830	1.3566872	0.69804027 J-4	0.5375
	2	-0.38623968	1.3604467	0.45898460 J-4	0.1098 J-1
	3	-0.38611219	1.3604909	0.45382772 J-4	0.3795 J-3
	4	-0.38611103	1.3604843	0.45426203 J-4	0.5771 J-3
(II) _k	2	-0.38806477	1.3591895	0.57671204 J-4	0.2703
	3	-0.38656670	1.3605047	0.46077151 J-4	0.1712 J-1
	4	-0.38636593	1.3610023	0.42339105 J-4	0.6742 J-1
A _k	1	0.66850840	1.0915086	0.27304976 J-2	0.5914 J+2
	2	0.36997711 J-1	0.94261849	0.22043600 J-2	0.4755 J+2
	3	-0.39136918	1.3559344	0.85590733 J-4	0.8853
	4	-0.39169854	1.3582480	0.21979800 J-2	0.4741 J+2
	5	-0.38648610	1.3615094	0.39029493 J-4	0.1403

精确解 $y_1^* = -0.386110, y_2^* = 1.3604848, y_3^* = 0.45400 J-4$

表 6 (零)稳定性的比较

方法	y_1	y_2	绝对误差
(I) ₄	0.36787942	0.36787942	0.2 J-7
(II) ₄	0.36865581	0.36865581	0.776358 J-3
A ₄	1.4419659	1.4419659	1.0740865
Adams-Moulton (k=4)	0.36787936	0.36787936	0.813 J-7

综上所述, 我们可以得出如下几点结论:

- (1) 方法 (I)_k、(II)_k 比方法 A_k 高一阶;
- (2) 对于强 stiff 问题, 方法 (I)_k、(II)_k 及 A_k 都可用, 且方法的阶越高, 结果越精确; 同时, 由于当 $|h| \rightarrow \infty$ 时, 前两类方法的绝对稳定性的特征多项式的根趋于零, 所以, 本文所建立的两类方法较方法 A_k 收敛得快;
- (3) 如果对于要求解的微分方程的性态一无所知, 则最好选用 A-稳定的方法或几乎 A-稳定的三步五阶方法 (II)₅.

参 考 文 献

- 1) Cash, J. R., *Numer. Math.*, 34 (1980), 235—246.
- 2) 赵双锁, 高等学校计算数学学报, 1982, 4, 325—33.
- 3) Lambert, J. D., *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*, Wiley, New York, 1973.
- 4) 孙耿, 数值计算与计算机应用, 3 (1982), 2, 94—99.

A Class of Nonlinear Multistep Methods for Stiff Stability

Yang Shixiao

Abstract

A class of nonlinear multistep methods is presented. This is a class of stiff stable k -step, $(k+2)$ -th order ($k \leq 4$) methods. Finally, the results of numerical tests are given.