研究生教材

刚性微分方程的数值方法

徐绪海　朱方生　编著

GANGXINGWEIFENFANGCHENG DESHUZHIFANGFA

武汉大学出版社

责任编辑　顾素萍
封面设计　汪　卉

ISBN 7-307-02458-6

9 787307 024588 >

ISBN 7-307-02458-6/O · 182
定价:8.50元

刚性微分方程的数值方法

徐绪海　朱方生　编著

武汉大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

刚性微分方程的数值方法/徐绪海，朱方生编著. —武汉：武汉大学出版社，1997. 8

ISBN 7-307-02458-6

Ⅰ 刚…

Ⅱ ①徐… ②朱…

Ⅲ ①刚性常微分方程—数值计算

②数值计算—刚性常微分方程

Ⅳ O175.1

武汉大学出版社出版发行

(43[illegible]

武汉市[illegible]

(430014 武汉市汉口铭新街

1997年8月第1版 1997年8月第1次印刷

开本:850×1168 1/32 印张:7.25

字数:185千字 印数:1—1000

ISBN 7-307-02458-6/O·182 定价:8.50元

内 容 简 介

本书较系统地介绍了有效求解刚性(Stiff)常微分方程初值问题的隐式多步方法和(单步)Runge-Kutta 方法，较深入地论述了刚性问题求解方法的基本理论，包括方法的 A 稳定、刚性稳定、B 稳定、代数稳定、B 收敛等重要性质。对多步方法的具体实现及变阶、变步长策略也作了较详细的讨论。

本书可作为高等院校相关专业的研究生教材，亦可作为大学高年级学生以及从事计算数学与科学工程计算的研究人员、工程技术人员的参考书。

前　　言

刚性(Stiff)方程是一类重要的常微分方程，粗略地说，这类方程的特点是，其右端函数的 Jacobi 矩阵具有广泛散布的特征值，且没有一个特征值的实部是一个很大的正数，即方程没有一个解分量是不稳定的；但至少有一个特征值是一个绝对值很大的负数，即至少有一个解分量是非常稳定的，以致衰减得非常快。这类方程源于许多实际应用领域，例如动力学系统、电子电路设计、工程控制、化学反应动力学、核反应动力学等。偏微分方程经线法半离散化也导致典型的高维刚性常微分方程系统。刚性的实质在于，需要计算求得的解是缓慢变化的，但又存在迅速衰减的扰动。这种扰动的出现，给慢变解的数值计算带来很大困难，从而引起了许多数值分析专家、学者的重视。从本世纪 50 年代提出刚性问题开始，60 年代初在理论上取得了重要进展[12]。随后 30 多年来，不论是从理论上认识、探讨刚性问题的实质方面，还是从多方寻求有效的数值解法方面，研究工作一直十分活跃，国内外学者发表了大量论著，取得了许多研究成果。

为了适应科学研究和教学工作的需要，我们为计算数学专业研究生开设了刚性方程课程，编写了《Stiff 方程数值方法》讲义。本书是在这本讲义的基础上，参阅国内外近期有关文献，经增加、删减、整理而成。原讲义曾为本专业研究生讲授过多次，他们提出了许多有益的意见，借此机会向他们表示谢意。

全书共分 8 章。第 1 章提供阅读本书的预备知识，概述常微分方程数值方法的几个基本概念。第 2 章介绍刚性概念、刚性问题产生的部分领域及求解刚性问题可能出现的困难。第 3 章讨论求解刚性方程的基本问题——数值稳定性。第 4、5 两章介绍适合

求解刚性问题的隐式多步方法及算法实现的基本思想和技巧。第6至第8章介绍隐式Runge-Kutta方法，其中包括方法的构造、B稳定性、B收敛性等。此外，各章配有一定数量的习题。我们希望提供的内容和表达形式能有助于加深读者对数值求解刚性方程的理解和扩大应用。

本书中的部分内容曾在张正言教授主持的刚性方程讨论班中讨论过，得到了她和其他同事们的有益帮助，他们提出了不少宝贵意见；书中有些内容是我们课题组承担国家自然科学基金资助项目的研究成果；雷晋干教授、费浦生教授对本书的出版十分关心，并给予了热情支持和鼓励；本书的出版得到了武汉大学研究生院和武汉大学出版社的大力支持和资助，在此一并表示诚挚的谢意！

由于笔者水平所限，书中若有不妥之处，恳请专家、读者批评指正。

作　者

1996年5月

目　　录

第 1 章　预备知识——几个基本概念 …… **1**

§ 1　解的存在性与唯一性 …… 1

§ 2　收敛性和稳定性 …… 2

§ 3　绝对稳定性 …… 6

练习 1 …… 14

第 2 章　Stiff 问题 …… **16**

§ 1　试验方程 …… 16

§ 2　问题的分类 …… 20

§ 3　Stiff 性概念 …… 22

§ 4　Stiff 问题的来源 …… 24

§ 5　求解 Stiff 问题的困难 …… 31

练习 2 …… 34

第 3 章　Stiff 问题数值方法的稳定性 …… **36**

§ 1　A 稳定性及 A 稳定方法的性质 …… 36

1.1　A 稳定性 …… 37

1.2　A 稳定方法的例 …… 40

1.3　A 稳定方法的性质 …… 42

1.4　A 稳定性的充分条件 …… 49

§ 2　绝对稳定性要求的减弱 …… 51

2.1　A(α)稳定性与 A(0)稳定性 …… 51

2.2　A_0 稳定性 …… 61

2.3　Stiff 稳定性 …… 64

§3　A_0、A(0)和Stiff稳定性间的关系 …… 67
练习3 …… 74

第4章　Stiff稳定的数值方法 …… 76
§1　Gear方法及其推广 …… 76
1.1　Gear方法 …… 76
1.2　Jain方法 …… 86
1.3　Cryer方法 …… 87
§2　二阶导数多步法 …… 91
2.1　Enright二阶导数法 …… 93
2.2　改进的二阶导数多步法 …… 96
§3　几种方法的拓展 …… 98
3.1　拓展的BDF法 …… 98
3.2　拓展的Adams-Moulton方法 …… 101
§4　混杂方法 …… 106
练习4 …… 115

第5章　算法上的一些考虑 …… 116
§1　伴随代数方程的解法 …… 116
1.1　迭代法 …… 116
1.2　预估-校正法的紧凑形式 …… 124
§2　预估-校正法的标准形式 …… 127
2.1　矩阵表示 …… 127
2.2　等价表示 …… 129
2.3　Nordsieck向量表示与Pascal三角矩阵 …… 136
§3　选取最优阶和步长的策略 …… 142
3.1　变阶和变步长 …… 144
3.2　局部截断误差的估计 …… 149
3.3　自动控制阶和步长 …… 150
练习5 …… 156

第 6 章　隐式 Runge-Kutta 方法 ······ **158**
§1　Runge-Kutta 公式的一般结构 ······ 158
§2　隐式 Runge-Kutta 法的构造 ······ 159
2.1　简化假设 ······ 159
2.2　Gauss 型方法 ······ 161
2.3　Radau Ⅰ A 和 Radau Ⅱ A 法 ······ 162
2.4　Lobatto Ⅲ A，Ⅲ B，Ⅲ C 法 ······ 164
§3　稳定函数与 Padé 逼近 ······ 167
3.1　稳定函数 ······ 167
3.2　Padé 逼近 ······ 168
§4　A 稳定性与 L 稳定性 ······ 174
§5　W-变换 ······ 176
5.1　W-矩阵及其作用 ······ 176
5.2　变换矩阵表示的稳定函数 ······ 182
5.3　用 W-变换构造隐式 RK 法 ······ 185
练习 6 ······ 188

第 7 章　隐式 Runge-Kutta 方法的 B 稳定性 ······ **190**
§1　B 稳定性 ······ 190
§2　代数稳定性 ······ 194
§3　几种稳定性之间的关系 ······ 196
练习 7 ······ 201

第 8 章　B 收敛性 ······ **202**
§1　阶降现象 ······ 202
1.1　阶降低的例子 ······ 203
1.2　级阶的概念 ······ 204
§2　(k,l)-代数稳定性 ······ 206
2.1　(k,l)-代数稳定的定义 ······ 206
2.2　最优 k 的计算 ······ 208

2.3 几个例子 …… 209
§3 B收敛性 …… 210
3.1 $\alpha_0(A^{-1})$的定义 …… 211
3.2 局部误差估计 …… 212
3.3 隐式Runge-Kutta方法的B收敛 …… 213
练习8 …… 216

参考文献 …… 218

第 1 章　预备知识——几个基本概念

§1　解的存在性与唯一性

我们考虑常微分方程系统的初值问题：

$$\begin{cases} y' = f(t,y), \\ y(a) = y_0, \end{cases} \tag{1.1}$$

其中，$t \in [a,b]$，$y, f \in \mathbf{R}^m$. 我们关心的是(1.1)的数值解. 但在着手求其数值解之前，必须考虑其理论解的存在性和唯一性，因为如果问题没有解，那么由数值方法提供的数据也就毫无意义了. 现在我们寻求(1.1) 在区域 D 上的解，D 定义为

$$D = \{(t,y) \mid a \leqslant t \leqslant b,\ -\infty < a < b < \infty;\ -\infty < y_i < \infty,\ i = 1,2,\cdots,m\},$$

其中，y_i 为 y 的分量. 要保证(1.1) 的解存在且唯一，对右端函数 $f(t,y)$ 要强加某些条件. 下列定理叙述了这个事实，其证明可见 Henrici [19].

定理 1.1(存在性与唯一性)　*假设*

(i) 对于所有$(t,y) \in D$，函数 $f(t,y)$ 是连续的；

(ii) 对于任何两对(t,y)，$(t,y^*) \in D$，存在常数 L，函数 $f(t,y)$ (关于某种范数) 满足条件：

$$\| f(t,y) - f(t,y^*) \| \leqslant L \| y - y^* \|, \tag{1.2}$$

则初值问题(1.1) 存在唯一解 $y(t) \in C^1[a,b]$.

强加在函数 $f(t,y)$ 上的条件(1.2) 就是著名的 Lipschitz 条件. 数 L 称为 Lipschitz 常数.

§ 2　收敛性和稳定性

对于初值问题(1.1)的求解，不少数值方法可以概括为一类 k 步方法：

$$
\begin{aligned}
&y_r = S_r(h), \quad 0 \leqslant r < k, \\
&\sum_{i=0}^{k} \alpha_i y_{n+i} = h\Phi_f(t_n; y_{n+k}, y_{n+k-1}, \cdots, y_n; h), \\
&\qquad\qquad\qquad 0 \leqslant n \leqslant N - k,
\end{aligned} \tag{1.3}
$$

其中，α_i $(i = 0,1,\cdots,k)$ 均为常数，且 $\alpha_k \neq 0$，y_n 是对(1.1)的理论解 $y(t_n)$ 的一种近似，$t_n = a + nh$，$Nh = b - a$，Φ_f 是依赖于 f 的向量函数. 若 Φ_f 不依赖于 y_{n+k}，则方法为显式的，否则就是隐式的. 这类方法虽然不包括求解(1.1)的所有离散方法，但一些经典方法都可包括在内. 例如：

(1) 线性多步法(LMM)：

$$\Phi_f = \sum_{i=0}^{k} \beta_i f(t_{n+i}, y_{n+i});$$

(2) 预估 - 校正法(PECE)：

$$
\begin{aligned}
\Phi_f = &\sum_{i=0}^{k-1} \beta_i f(t_{n+i}, y_{n+i}) + \\
&\beta_k f\left(t_{n+k}, \frac{1}{\alpha_k^*} \sum_{i=0}^{k-1} [-\alpha_i^* y_{n+i} + h\beta_i^* f(t_{n+i}, y_{n+i})]\right),
\end{aligned}
$$

其中，α_i^* 和 β_i^* 是预估式的系数；

(3) Runge-Kutta 法(RK)：

$$
\begin{aligned}
&k = 1, \\
&\Phi_f = \sum_{r=1}^{s} b_r k_r, \\
&k_r = f(t_n + hc_r, y_n + h\sum_{j=1}^{s} a_{rj} k_j), \quad 1 \leqslant r \leqslant s.
\end{aligned}
$$

为了以后的讨论方便，引进两个多项式：

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

其中，α_i 和 β_i 为实数. 我们分别称 $\rho(\xi)$ 和 $\sigma(\xi)$ 为线性多步法的第一和第二特征多项式.

1. 收敛性

收敛性是对数值方法的一种起码要求，不收敛的数值方法没有任何实际应用价值.

下面给出收敛性的两种定义，实际上它们是等价的[20].

定义 1.1 方法类(1.3) 称为**收敛的**，如果把它应用于问题(1.1)，当 $h\to 0$ 时，有

$$\max_{0\leqslant n\leqslant N}\|y_n-y(t_n)\|\to 0.$$

定义 1.2 方法类(1.3) 称为**收敛的**，如果把它应用于问题(1.1)，对于任何 $t\in[a,b]$，当 $h\to 0$ 时，

$$y_n\to y(t),$$

其中，$n=(t-a)/h$.

一种数值方法是否具有收敛性，这是很重要的，因而自然要关心方法类 (1.3) 的收敛条件. 这里需要引进局部离散误差和相容性两个概念.

定义 1.3(局部离散误差) 方法(1.3) 在 t_n 处的**局部离散误差**定义为

$$d_r=y(t_r)-S_r(h),\quad 0\leqslant r<k,$$

$$d_{n+k}=\frac{1}{\rho'(1)h}\left[\sum_{i=0}^{k}\alpha_i y(t_{n+i})-h\Phi_f(t_n;y(t_{n+k}),\cdots,y(t_n);h)\right],$$

$$0\leqslant n\leqslant N-k,\qquad (1.4)$$

其中，$y(t)$ 是(1.1) 的真解.

定义 1.4(相容性) 方法类(1.3) 称为**相容的**，如果当 $h\to 0$ 时，

$$\max_{0\leqslant n\leqslant N}\|d_n\|\to 0.$$

方法类(1.3) 称为 p **阶相容的**，如果

$$\max_{0\leqslant n\leqslant N}\|d_n\| = O(h^p).$$

现在的问题是，在什么条件下，方法类(1.3)才相容呢？注意到 $y(t)\in C^1[a,b]$，我们有

$$\begin{aligned}d_{n+k}=&\frac{1}{\rho'(1)h}\Big\{\sum_{i=0}^{k}\alpha_i[y(t_n)+ihy'(t_n+\eta_i ih)]\\&-h\Phi_f(t_n;y(t_{n+k}),\cdots,y(t_n);h)\Big\}\\=&\frac{1}{\rho'(1)h}\Big\{y(t_n)\sum_{i=0}^{k}\alpha_i+h\Big[\sum_{i=0}^{k}i\alpha_i f(t_n+\eta_i ih,y(t_n+\eta_i ih))\\&-\Phi_f(t_n;y(t_{n+k}),\cdots,y(t_n);h)\Big]\Big\},\\&\qquad 0\leqslant n\leqslant N-k.\end{aligned}$$

因此，由 d_r 及 d_{n+k} 的这个表达式，立即可知，要方法类(1.3) 是相容的，当且仅当

(1) $y_r\to y_0$，当 $h\to 0$，$0\leqslant r<k$；

(2) $\sum_{i=0}^{k}\alpha_i(\equiv\rho(1))=0$；

(3) $\Phi_f(t_n;y(t_{n+k}),\cdots,y(t_n);h)\ \to\ \rho'(1)f(t_n,y(t_n))$，当 $h\to 0$，$t_n=a+nh$.

容易看出，在前述三种方法中，要条件(3) 成立，当且仅当

1° LMM：$\sigma(1)=\rho'(1)$；

2° PECE：$\sigma(1)=\rho'(1)$，$\rho^*(1)=0$，其中 $\rho^*(\xi)=\sum_{i=0}^{k}\alpha_i^*\xi^i$；

3° RK：$\sum_{r=1}^{s}b_r=\rho'(1)$.

现在就可叙述收敛性和相容性的关系. 我们有

定理 1.2 收敛的方法类(1.3) 必定是相容的.

这个定理告诉我们，相容性是收敛性的必要条件，但不是充分条件(见习题 1.4)，于是需要考虑稳定性.

2. 零稳定性

考虑对方法(1.3) 的一种扰动

$$z_r = S_r(h) + \delta_r, \quad 0 \leqslant r < k,$$

$$\left(\sum_{i=0}^{k} \alpha_i z_{n+i}\right)/h = \Phi_f(t_n; z_{n+k}, \cdots, z_n; h) + \delta_{n+k}, \quad 0 \leqslant n \leqslant N-k,$$

其中，δ_n $(n = 0,1,\cdots,N)$ 是扰动，z_n $(n = 0,1,\cdots,N)$ 是受到扰动的解.

定义 1.5(零稳定)[18]　设δ_n $(n = 0,1,\cdots,N)$ 和δ_n^* $(n = 0,1,\cdots,N)$ 是对方法(1.3) 的任何两种扰动，z_n $(n = 0,1,\cdots,N)$ 和z_n^* $(n = 0,1,\cdots,N)$ 是得到的相应受扰解. 如果存在常数h_0 和S，使得对于所有$h \in (0,h_0]$ 和给定的$\varepsilon > 0$，当

$$\| \delta_n - \delta_n^* \| \leqslant \varepsilon, \ 0 \leqslant n \leqslant N$$

时，有

$$\| z_n - z_n^* \| \leqslant S\varepsilon, \quad 0 \leqslant n \leqslant N,$$

则称方法(1.3) 是**零稳定的**（或**稳定的**，或 **D- 稳定的**）.

现在要问：在什么条件下，方法类(1.3) 是零稳定的呢? 这就需要所谓根条件.

定义 1.6(根条件)　如果第一特征多项式$\rho(\xi)$ 的根$\xi_i (i = 1,2,\cdots,k)$ 全在单位圆内或圆上，且在单位圆上的根是单根，则称方法 (1.3) 满足根条件.

如果一个方法是相容的，由$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i = \rho(1) = 0$，则$\rho(\xi)$ 必有一根$\xi_1 = 1$. 我们称此根为**主根**.

定理 1.3　*方法类(1.3) 是零稳定的，当且仅当它满足根条件.*

现在，我们就可回答最初提出的问题：(1.3) 收敛的条件是什么. 有如下定理：

定理 1.4　*方法类(1.3) 收敛的充分必要条件是：它既是相容的又是零稳定的.*

注意到(1.3) 类的相容单步法必满足根条件，从而必零稳定，

于是有

定理 1.5 (1.3) 类的单步法为收敛的充分必要条件是它为相容的.

上述讨论表明,为要获得方法的收敛性,相容性和零稳定性都是重要的. 相容性决定着局部离散误差的大小,而零稳定性表示当步长 $h\to 0$ 时,这种误差和其他误差(舍入误差)的传播方式. 换句话说,零稳定性只保证对于充分小的步长 h,局部误差和舍入误差为有界. 但当步长很小时,覆盖求解时间区间$[a,b]$的步数 $N(h=(b-a)/N)$就非常大. 这样,不仅意味着要耗费大量的计算机时间,而且由于误差的积累,也会造成精度很差. 此外,在实践中,计算用的步长 h 总是有限的,且希望它尽可能地取得大一些,而零稳定性又未告诉我们 h 到底应当取多小. 这就说明了零稳定性的不足,为了达到给定的精度,找到恰当的计算步长 h,这就涉及到下面要考虑的绝对稳定性概念.

§3 绝对稳定性

在分析和比较(1.3) 类不同方法的绝对稳定性时,通常是把它们应用于一种特殊的方程

$$y' = \lambda y, \tag{1.5}$$

这里 λ 一般为复数. 选取这种方程的原因大致是,它最简单. 如果一种方法求解这种方程都无效,那么它就无任何价值;由于这种方程是线性的,可以导出相当有意义的明显的稳定性准则;即使方程是非线性的,形如(1.1),如果 $f(t,y)$ 关于 y 可微,则问题 (1.1) 的局部特性就可由其线性化方程

$$y' = (\partial f/\partial y)y$$

的解来确定,其中 $\partial f/\partial y$ 是 Jacobi 矩阵. 模拟这个线性化方程,考虑系统