

刚性常微分方程初值问题的一种数值解法

韩 天 敏

(中国科学院计算技术研究所)

摘 要

本文对刚性 (Stiff) 常微分方程给出一种数值解法。方法的思想是构造一个和刚性系统等价的常系数线性系统, 在积分的格子点上, 联合这两个系统, 设法求出线性系统右端函数的值, 然后再构造数值积分格式。格式具有隐式恒稳和接近于显式恒稳的特性, 作为隐式格式给出了恒收敛的迭代形式。除了刚性系统外, 若右端函数的分母部分有零点, 在这些零点上格式也可应用。方法已推广到其他领域:

(1) 对 m 维热传导问题, 可以构造显式恒稳的差分格式。

(2) 对线性代数方程 $Ay = b$, 当 A 对称正定时, 可以给出两类迭代格式, 数值实验表明, 当 A 有较大病态时, 格式具有明显的优越性。

一、前 言

很多的自然现象都可以用常微分方程组的初值问题进行描述, 对复杂的问题解析地求解几乎是不可能的, 故必须进行数值求解。数值求解对一类所谓刚性(或病态)系统有相当的困难。一般的常微分方程组

$$\frac{dy_k}{dt} = f_k(t, y_1, \dots, y_n) \quad (K = 1, 2, \dots, n)$$

的物理特征, 通常通过 Jacobi 矩阵 $(a_{ij}) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial y_j}\right)$ 的特征值 $\lambda_k = \alpha_k + i\beta_k$ 来表达。特征值的实部 $\text{Re } \lambda_k = \alpha_k$ 表示增长 ($\alpha_k > 0$) 或衰减 ($\alpha_k < 0$) 因子, 虚部 $\text{Im } \lambda_k = \beta_k$ 表示周期性振动的频率, 而 $|\text{Re } \lambda_k|$ 就表示物理系统的时间常数。通常以刚性比

$$\rho = \max_{1 \leq K \leq n} |\text{Re } \lambda_K| / \min_{1 \leq K \leq n} |\text{Re } \lambda_K|$$

作为刚性程度的度量, 当 $\rho \gg 1$ 时, 系统就称为刚性的或病态的。例如在控制系统、化学反应、电子网络等系统中, 刚性比可以高达 10^6 以上, 在热传导和扩散等过程中, 把空间变量离散化后所得到的常微分方程组也是刚性的。数值处理这类问题的困难就在于, 最大时间常数 T 决定解题总的时限 $0 \leq t \leq T$, 而最小的时间常数 τ 决定积分步长。以 Runge-Kutta 法为例, 积分步长 h 要满足 $h < 2.7\tau$, 如果 $T = 1$ 而 $\tau = 10^{-6}$, 那么积分的步数 $M > \frac{1}{2.7} 10^6$, 这样大的计算量是非常困难的。强加给 h 的限制并不是物理本质上的原因, 而仅仅是为了保证数值

格式稳定性而采取的措施,很多的研究工作都是为了放宽稳定性的限制这一目的而进行的。

早在五十年代初期,人们通过化学反应问题开始认识到刚性系统的特点,近十年来才认识它在实践上的普遍性和重要性,特别是 1968 年在爱丁堡举行的 IFIP 会议以后,这一问题的重要性和困难性更进一步得到确认。

本文是作者 1966 年工作的继续^[1],对资料[1]中所提出的格式重新进行推导,并对格式的稳定性进行了论证。

二、方法的推导

对初值问题:

$$\begin{cases} E(t, y)\dot{y} = f(t, y), \\ y(0) = y_0, \end{cases} \quad (2.1)$$

其中 $E(t, y)$ 是 $m \times m$ 阶矩阵, y, y_0, f 是 m 维向量, t 是时间. 引入线性系统

$$B\dot{y} + y = a(t), \quad (2.2)$$

其中 B 是 $m \times m$ 阶对角型矩阵, 对角线上为任意指定的正常数, 使(2.2)和(2.1)式有相同的物理效果. 如果经过离散化的处理, 在 $t = h, 2h, \dots, nh, \dots$ 的格点上能求出 $a(h), a(2h), \dots, a(nh), \dots$ 的值, 我们便可从(2.2)式出发去构造积分格式, 从而克服刚性方程(2.1)在数值求解时的困难。

将(2.1)和(2.2)式相减得

$$(E - B)\dot{y} = g - a, \quad (2.3)$$

其中 $g = f(t, y) + y, E = E(t, y), a = a(t)$, 使(2.1)和(2.2)式联系起来. 为了推演方便, 引入

$$z = (E - B)^{-1}a$$

后, (2.2)和(2.3)式分别变为:

$$\dot{y} = -B^{-1}y + (B^{-1}E - I)z, \quad (2.4)$$

$$\dot{y} = (E - B)^{-1}g - z, \quad (2.5)$$

其中 I 为单位矩阵. 方程(2.4), (2.5)包含了两个未知数 y 和 z , 使我们可能在离散格点上用近似办法把 $z(h), z(2h), \dots, z(nh), \dots$ 求出来. 注意到 $z(t) = (E - B)^{-1}a(t)$, 亦即把 $a(h), a(2h), \dots, a(nh), \dots$ 求出来. 为此, 消去(2.4)和(2.5)式中的 $\dot{y}$, 并用 $t = t_{n+1}$ 代入, $t = t_{n+1}$ 的函数值以下标表示, 得恒等式:

$$y_{n+1} + B(E_{n+1} - B)^{-1}g_{n+1} = E_{n+1}z_{n+1}.$$

对(2.5)式右端第一项用矩形公式, 第二项用梯形公式近似积分得:

$$y_{n+1} = y_n + h[E_n - B]^{-1}g_n - \frac{h}{2}z_n - \frac{h}{2}z_{n+1} + O(h^2).$$

或者令 $x_n = \frac{h}{2}z_n$, 并略去 $O(h^2)$ 项, 以上两式变成:

$$\begin{cases} y_{n+1} + B(E_{n+1} - B)^{-1}g_{n+1} = \frac{2}{h}E_{n+1}x_{n+1}, \\ y_{n+1} = y_n + h[E_n - B]^{-1}g_n - x_n - x_{n+1}, \end{cases}$$

由此得

$$x_{n+1} = \left(I + \frac{2}{h} E_{n+1} \right)^{-1} \{ B(E_{n+1} - B)^{-1} g_{n+1} + y_n + h[E_n - B]^{-1} g_n - x_n \}. \quad (2.6)$$

这样我们的目的已经基本上达到, 因为有了 x_{n+1} 之后, 我们便可以用(2.2)式或等价地用(2.4)式去构造新的积分格式.

(2.4)式真解的解析形式为:

$$y(t) = e^{-B^{-1}(t-t_n)} y_n + \int_{t_n}^t e^{-B^{-1}(t-u)} (B^{-1}E(u, y(u)) - I) z(u) du. \quad (2.7)$$

对(2.7)式使用梯形公式, 则

$$y_{n+1} = e^{-B^{-1}h} y_n + e^{-B^{-1}h} (B^{-1}E_n - I) x_n + (B^{-1}E_{n+1} - I) x_{n+1}. \quad (2.8)$$

把(2.6)和(2.8)式联立可得关于 x_{n+1} 和 y_{n+1} 的联立方程. 在用迭代法求解这个联立方程时, 为了获得较好的初值, 可用(对(2.7)积分部分用矩形公式)

$$y_{n+1}^{(0)} = e^{-B^{-1}h} y_n + 2e^{-B^{-1}h} (B^{-1}E_n - I) x_n \quad (2.9)$$

对 y_{n+1} 进行“预估”. 这样我们就建立了如下的迭代格式:

$$(I) \begin{cases} (i) & y_{n+1}^{(0)} = e^{-B^{-1}h} y_n + 2e^{-B^{-1}h} (B^{-1}E_n - I) x_n, \\ (ii) & x_{n+1}^{(l+1)} = \left(I + \frac{2}{h} E_{n+1}^{(l)} \right)^{-1} \{ B(E_{n+1}^{(l)} - B)^{-1} g_{n+1}^{(l)} + y_n + h(E_n - B)^{-1} g_n - x_n \}, \\ (iii) & y_{n+1}^{(l+1)} = e^{-B^{-1}h} y_n + e^{-B^{-1}h} (B^{-1}E_n - I) x_n + (B^{-1}E_{n+1}^{(l)} - I) x_{n+1}^{(l+1)}. \end{cases}$$

三、方法的收敛性与稳定性

1. 考虑一阶方程 $\dot{y} = Ky$, $\operatorname{Re} K < 0$. 选取 $\varepsilon > 0$ 为任意常数, 乘上式两端得:

$$\varepsilon \dot{y} = \varepsilon Ky, \quad (3.1)$$

对方程(3.1)应用格式(I), 取常数 β 为(I)中的 B , 将(ii)代入(iii)得

$$y_{n+1}^{(l+1)} = \eta y_{n+1}^{(l)} + \zeta x_n + \xi y_n, \quad (3.2)$$

其中

$$\begin{cases} \eta = \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h} \right)^{-1} (\varepsilon K + 1), \\ \zeta = e^{-\beta^{-1}h} \beta^{-1} (\varepsilon - \beta) - \beta^{-1} (\varepsilon - \beta) \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h} \right)^{-1}, \\ \xi = e^{-\beta^{-1}h} + \beta^{-1} (\varepsilon - \beta) \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h} \right)^{-1} [1 + h(\varepsilon - \beta)^{-1} (\varepsilon K + 1)]. \end{cases} \quad (3.3)$$

由(3.2)式得

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(l+1)} &= \eta y_{n+1}^{(l)} + \zeta x_n + \xi y_n \\ &= \eta^2 y_{n+1}^{(l-1)} + (\eta + 1)(\zeta x_n + \xi y_n) \\ &= \eta^3 y_{n+1}^{(l-2)} + (\eta^2 + \eta + 1)(\zeta x_n + \xi y_n) \\ &\dots\dots\dots \\ &= \eta^{l+1} y_{n+1}^{(0)} + (\eta^l + \eta^{l-1} + \dots + 1)(\zeta x_n + \xi y_n). \end{aligned} \quad (3.4)$$

从(3.3)和(3.4)式看出, 迭代格式(I)的收敛性条件是

$$|\eta| = \left| \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h} \right)^{-1} (\varepsilon K + 1) \right| < 1,$$

即当 εK 在复平面上属于以 $(-1, 0)$ 为圆心、 $\left(1 + \frac{2\varepsilon}{h}\right)$ 为半径的圆时迭代总是收敛的。

对任何稳定系统 $\dot{y} = Ky$ ($\operatorname{Re} K < 0$), 我们总可以选取 $\varepsilon > 0$ 适当小, 使得 εK 落在上面所说的那个圆内, 从而得出了如下的结论:

对任何稳定系统 $\dot{y} = Ky$ ($\operatorname{Re} K < 0$), 总可选取适当的 $\varepsilon > 0$, 使得迭代格式(I)收敛。

即使对于不稳定系统 $\operatorname{Re} K > 0$, 只要步长 h 充分小, 迭代格式仍然是收敛的。

另外, 格式 (I) 中的 (ii) 和 (iii) 迭代到收敛相当于如下的格式:

$$\begin{cases} x_{n+1} = \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h}\right)^{-1} \{ \beta(\varepsilon - \beta)^{-1}(\varepsilon K + 1)(1 - \eta)^{-1}(\zeta x_n + \xi y_n) \\ \quad + y_n + h(\varepsilon - \beta)^{-1}(\varepsilon K + 1)y_n - x_n \}, \\ y_{n+1} = (1 - \eta)^{-1}[\zeta x_n + \xi y_n]. \end{cases} \quad (3.5)$$

对常系数的方程组来说, 如果相应于 $(1 - \eta)$ 项的矩阵的求逆是易求的话, 我们可直接把 (3.5) 式作为积分格式, 而不必借助于迭代过程。

2. 在稳定性的讨论中, 假定

$$h \ll \beta, \quad 0 < \varepsilon \ll \beta,$$

则

$$\eta = (1 + \varepsilon K) / \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h}\right),$$

$$(1 - \eta)^{-1} = \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h}\right) / \left(\frac{2\varepsilon}{h} - \varepsilon K\right),$$

$$\zeta \simeq -\frac{2\varepsilon}{h} / \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h}\right), \quad \xi \simeq \frac{2\varepsilon}{h} / \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h}\right).$$

此时

$$\begin{cases} x_{n+1} \simeq \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h}\right)^{-1} \left\{ -(\varepsilon K + 1) \frac{\frac{2\varepsilon}{h}}{\frac{2\varepsilon}{h} - \varepsilon K} (-x_n + y_n) + y_n - x_n \right\} \\ \quad = \frac{-\varepsilon K}{\frac{2\varepsilon}{h} - \varepsilon K} (-x_n + y_n), \\ y_{n+1} \simeq \frac{\frac{2\varepsilon}{h}}{\frac{2\varepsilon}{h} - \varepsilon K} (-x_n + y_n). \end{cases} \quad (3.6)$$

(3.6) 式中二阶矩阵的特征根是零和 $\frac{\frac{2\varepsilon}{h} + \varepsilon K}{\frac{2\varepsilon}{h} - \varepsilon K}$, 当 $\operatorname{Re} K < 0$ 时, 显然 $\left| \frac{\frac{2\varepsilon}{h} + \varepsilon K}{\frac{2\varepsilon}{h} - \varepsilon K} \right| < 1$, 因而得

出结论:

对稳定系统 ($\operatorname{Re} K < 0$), 在 $h \ll \beta$ 和 $0 < \varepsilon \ll \beta$ 的假设下, 积分格式是绝对稳定的。

由于 β 是任意选取的参数, 上述稳定性的结论实际上是与 h 无关的, 如果划出在 hK 平面上的稳定性区域, 则该区域就是整个左半平面。

3. 现考虑只进行一次迭代时格式的稳定性. 仍假设 $h \ll \beta$, $0 < \varepsilon \ll \beta$. 对方程

$$\varepsilon \dot{y} = \varepsilon K y$$

的计算格式是:

$$\begin{cases} x_{n+1}^{(1)} = \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h}\right)^{-1} [(1 + 2\varepsilon K)x_n - \varepsilon K y_n], \\ y_{n+1}^{(1)} = -\left(1 + \frac{2\varepsilon}{h}\right)^{-1} \left[\left(2 + \frac{2\varepsilon}{h} + 2\varepsilon K\right)x_n - \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h} + \varepsilon K\right)y_n\right]. \end{cases} \quad (3.7)$$

其特征方程是:

$$\left(\frac{h}{2} + \varepsilon\right)\mu^2 - \left[h + \varepsilon\left(1 + \frac{3Kh}{2}\right)\right]\mu + \frac{h}{2}(\varepsilon K + 1) = 0. \quad (3.8)$$

该方程的判别式 $\Delta = 2\varepsilon K h^2 + \varepsilon^2 \left[\frac{(2 + 3Kh)^2}{4} - 2Kh\right]$, 以下分 K 为实数和复数两种情况进行讨论.

(1) 当 K 为实数时, 我们可以选 $\varepsilon > 0$ 充分小, 使 $\Delta < 0$, 从而(3.8)式有一对共轭复根, 它们的乘积等于 $\frac{1 + \varepsilon K}{1 + \frac{2\varepsilon}{h}}$. 当 ε 充分小时, 由条件 $K < 0$, 知

$$\left| \frac{1 + \varepsilon K}{1 + \frac{2\varepsilon}{h}} \right| < 1.$$

故格式在与步长 h 选取无关的条件下是稳定的.

(2) 当 K 为复数时要复杂一些. 由(3.8)式

$$\mu_{1,2} = \frac{h + \varepsilon h \left(\frac{3}{2}K + \frac{1}{h}\right) \pm \sqrt{\Delta}}{h + 2\varepsilon}, \quad (3.9)$$

因为 $\Delta = 2Kh^2\varepsilon + [\cdots]\varepsilon^2$, 故当 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时, $\sqrt{\Delta} = \sqrt{2K}h\varepsilon^{1/2} + O(\varepsilon^{3/2})$, 而 $\varepsilon = 0$ 时, $\mu_1 = \mu_2 = 1$, 从而 μ_1 和 μ_2 在 1 近旁可展成 $\varepsilon^{1/2}$ 的幂级数:

$$\mu_1 = 1 + a_1\varepsilon^{1/2} + a_2\varepsilon + a_3\varepsilon^{3/2} + O(\varepsilon^2),$$

$$\mu_2 = 1 + b_1\varepsilon^{1/2} + b_2\varepsilon + b_3\varepsilon^{3/2} + O(\varepsilon^2).$$

又由关系式

$$\mu_1 + \mu_2 = \frac{h + \varepsilon \left(1 + \frac{3Kh}{2}\right)}{\frac{h}{2} + \varepsilon} = 2 \left[1 + \varepsilon \left(\frac{1}{h} + \frac{3K}{2}\right) \left(1 + \frac{2\varepsilon}{h}\right)^{-1}\right],$$

$$\mu_1 \cdot \mu_2 = \frac{h}{2}(\varepsilon K + 1) / \left(\frac{h}{2} + \varepsilon\right),$$

可以定出系数

$$a_1 + b_1 = 0, \quad a_2 + b_2 = 2 \left(\frac{3K}{2} - \frac{1}{h}\right), \quad a_3 + b_3 = 0,$$

$$a_2 + a_1 b_1 + b_2 = K - \frac{2}{h}, \quad a_3 + a_2 b_1 + a_1 b_2 + b_3 = 0, \quad \cdots \cdots$$

从而推出

$$a_1 = -b_1 = \sqrt{2K}, \quad a_2 = b_2 = \frac{3K}{2} - \frac{1}{h},$$

故得

$$\mu_1 = 1 + \sqrt{2K} \varepsilon^{1/2} + \left(\frac{3K}{2} - \frac{1}{h} \right) \varepsilon + O(\varepsilon^{3/2}),$$

$$\mu_2 = 1 - \sqrt{2K} \varepsilon^{1/2} + \left(\frac{3K}{2} - \frac{1}{h} \right) \varepsilon + O(\varepsilon^{3/2}).$$

由此我们看出, 当 K 为复数时, 虽然 $\operatorname{Re} K < 0$, 对任意的 h 并不能保证 $|\mu_{1,2}| < 1$, 但是, 如果 ε 和 h 的比值保持不变, 即 $\frac{\varepsilon}{h} = \alpha = \text{常数}$, 那么当 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时, 格式的稳定性就可得以保证。

事实上, 当 α 固定时, (3.9) 式可以改写成:

$$\mu_{1,2} = \frac{2 + 2\alpha + 3\varepsilon K \pm \sqrt{(2\alpha + 3\varepsilon K)^2 + 8\varepsilon K(1 - \alpha)}}{2 + 4\alpha}, \quad (3.10)$$

当 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时,

$$\mu_{1,2} = \frac{1}{2 + 4\alpha} \left[2 + 2\alpha + 3\varepsilon K \pm \left(2\alpha + \frac{12\alpha K + 8K(1 - \alpha)}{4\alpha} \varepsilon + O(\varepsilon^2) \right) \right].$$

在 $\operatorname{Re} K < 0$ 的条件下, 只要 ε 充分小, 从而 h 也充分小, 就能保证格式的稳定性条件:

$$|\mu_{1,2}| < 1.$$

如果选取 $\alpha = 1$, 即 $\varepsilon = h$, 则

$$\mu_{1,2} = \frac{4 + 3\varepsilon K \pm (2 + 3\varepsilon K)}{6} = \begin{cases} \frac{1}{3} \\ 1 + \varepsilon K. \end{cases}$$

可知当 εK 位于以 (-1) 为圆心, 以 1 为半径的圆内时, 格式是稳定的。

四、格式的几种变形

1. 假设在 (2.1) 式中 $E(t, y) = E$ 为对角形常数矩阵, 矩阵 B 如前所述亦为对角形常数矩阵, 令向量 $\tilde{z}(t) = B^{-1}a(t)$, $\tilde{x}_n = \frac{h}{2} \tilde{z}_n$, 则易知

$$\begin{aligned} B^{-1}(E - B)x_n &= B^{-1}(E - B)\frac{h}{2}z_n = B^{-1}(E - B)\frac{h}{2}(E - B)^{-1}a_n \\ &= B^{-1}\frac{h}{2}a_n = \frac{h}{2}\tilde{z}_n = \tilde{x}_n. \end{aligned}$$

由此, 格式 (I) 可以改写如下:

$$\begin{cases} \text{(i)} & y_{n+1}^{(0)} = e^{-B^{-1}h}y_n + 2e^{-B^{-1}h}\tilde{x}_n, \\ \text{(ii)} & \tilde{x}_{n+1}^{(l+1)} = \left(I + \frac{2}{h}E\right)^{-1}\{g_{n+1}^{(l)} + B^{-1}(E - B)y_n + hB^{-1}g_n - \tilde{x}_n\}, \\ \text{(iii)} & y_{n+1}^{(l+1)} = e^{-B^{-1}h}(y_n + \tilde{x}_n) + \tilde{x}_{n+1}^{(l+1)}. \end{cases}$$

去掉“ $\sim$ ”这一特殊记号, 重新定义 $z(t) = B^{-1}a(t)$, $x_n = \frac{h}{2}z_n$, 即可得如下的格式 (II):

$$(II) \begin{cases} (i) & y_{n+1}^{(0)} = e^{-B^{-1}h} y_n + 2e^{-B^{-1}h} x_n, \\ (ii) & x_{n+1}^{(l+1)} = \left(I + \frac{2}{h} E\right)^{-1} \{g_{n+1}^{(l)} + B^{-1}(E - B)y_n + hB^{-1}g_n - x_n\}, \\ (iii) & y_{n+1}^{(l+1)} = e^{-B^{-1}h} (y_n + x_n) + x_{n+1}^{(l+1)}. \end{cases}$$

2. 如果令矩阵 $B \rightarrow \infty$ (即 B 对角线上所有元素 $b_i \rightarrow \infty$), 则根据 (I) 中的定义有:

$$x_n = \frac{h}{2} \dot{z}_n = \frac{h}{2} (E_n - B)^{-1} a_n = \frac{h}{2} (E_n - B)^{-1} (B \dot{y}_n + y_n),$$

当 $B \rightarrow \infty$ 时, $x_n = -\frac{h}{2} \dot{y}_n$, 同时, $e^{-B^{-1}h} = I$. 由此 (I) 可改写为:

$$\begin{cases} (i) & y_{n+1}^{(0)} = y_n - 2x_n, \\ (ii) & x_{n+1}^{(l+1)} = \left(I + \frac{2}{h} E_{n+1}^{(l)}\right)^{-1} \{-g_{n+1}^{(l)} + y_n - x_n\}, \\ (iii) & y_{n+1}^{(l+1)} = y_n - x_n - x_{n+1}. \end{cases}$$

若重新定义 $x_n = \frac{h}{2} \dot{y}_n$, 则 (I) 可简化为:

$$(III) \begin{cases} (i) & y_{n+1}^{(0)} = y_n + 2x_n, \\ (ii) & x_{n+1}^{(l+1)} = \left(I + \frac{2}{h} E_{n+1}^{(l)}\right)^{-1} \{g_{n+1}^{(l)} - y_n - x_n\}, \\ (iii) & y_{n+1}^{(l+1)} = y_n + x_n + x_{n+1}. \end{cases}$$

顺便指出, 上面这个格式可以直接推出.

3. 如果在 (III) 中只进行一次迭代, 格式可更进一步简化为:

$$(IV) \begin{cases} (i) & y_{n+1}^{(0)} = y_n + 2x_n, \\ (ii) & x_{n+1} = \left(I + \frac{2}{h} E_{n+1}^{(0)}\right)^{-1} \{f_{n+1}^{(0)} + x_n\}, \\ (iii) & y_{n+1} = y_n + x_n + x_{n+1}. \end{cases}$$

数值实验表明, 上述简化格式用于解具有振荡形态的方程时, 精度比格式 (I) 差, 但由于格式的简单性, 当它用于其他类型的方程, 特别是抛物型方程和线性代数方程时, 格式 (IV) 具有相当的优越性. (详见第七节应用部分)

五、方法的截断误差

我们以最简单的格式 (IV) 说明一下格式的截断误差, 并假定我们所讨论的是单个方程, 且 $E(t, y) = E$ 是一常数. 为此, 我们重新对格式 (IV) 加以推导, 在推导的过程中即可看出它的误差估计. 由梯形公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} \dot{y}_n + \frac{h}{2} \dot{y}_{n+1} - \frac{h^3}{12} \ddot{y}_{n+\theta_1},$$

知

$$\frac{h}{2} \dot{y}_{n+1} = y_{n+1} - y_n - \frac{h}{2} \dot{y}_n + \frac{h^3}{12} \ddot{y}_{n+\theta_1},$$

又由恒等式 $E \dot{y}_{n+1} = f_{n+1}$, 将以上两式左右两端相加, 并定义 $x_{n+1} = \frac{h}{2} \dot{y}_{n+1}$, 得

$$\left(1 + \frac{2E}{h}\right) x_{n+1} = f_{n+1} + y_{n+1} - y_n - x_n + \frac{h^3}{12} \ddot{y}_{n+\theta_1}.$$

另一方面,将

$$y_{n+1} = y_n + 2x_n + \frac{h^2}{2} \ddot{y}_{n+\theta_2} = y_{n+1}^{(0)} + \frac{h^2}{2} \ddot{y}_{n+\theta_2},$$

代入上式得:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= \left(1 + \frac{2E}{h}\right)^{-1} \left\{ f_{n+1}^{(0)} + \left[\frac{\partial f}{\partial y} \right]_{t=t_{n+1}, y=y^*} \frac{h^2}{2} \ddot{y}_{n+\theta_2} + x_n + \frac{h^3}{12} \ddot{y}_{n+\theta_1} + \frac{h^2}{2} \ddot{y}_{n+\theta_2} \right\} \\ &= \left(1 + \frac{2E}{h}\right)^{-1} \{ f_{n+1}^{(0)} + x_n \} + ER, \end{aligned}$$

其中

$$ER = \left(1 + \frac{2E}{h}\right)^{-1} \left\{ \left[\frac{\partial f}{\partial y} \right]_{t=t_{n+1}, y=y^*} \frac{h^2}{2} \ddot{y}_{n+\theta_2} + \frac{h^3}{12} \ddot{y}_{n+\theta_1} + \frac{h^2}{2} \ddot{y}_{n+\theta_2} \right\}.$$

且 $0 < \theta_{1,2} < 1$, y^* 在 $y_{n+1}^{(0)}$ 和 y_{n+1} 之间, $\ddot{y}_{n+\theta_1}$ 和 $\ddot{y}_{n+\theta_2}$ 分别为 $\ddot{y}((n + \theta_2)h)$ 和 $\ddot{y}((n + \theta_1)h)$.

以上的 x_{n+1} 是按定义 $x_{n+1} = \frac{h}{2} \ddot{y}_{n+1}$ 推导得出的, 它和按 (IV) 中 (ii) 算出的 x_{n+1} 之差正是 ER . 不难指出:

$$\begin{aligned} \text{若 } E = O(1), \quad & \text{则 } ER = O(h^3), \\ \text{若 } E = O(h), \quad & \text{则 } ER = O(h^2). \end{aligned}$$

而 (IV) 中的 (iii) 正是梯形公式, 如果 x_n 和 x_{n+1} 都是按定义 $x_n = \frac{h}{2} \ddot{y}_n$, $x_{n+1} = \frac{h}{2} \ddot{y}_{n+1}$ 算出的, 则 (iii) 所引入的误差是 $O(h^3)$.

综上所述, 如果 x_n 精确地由 $x_n = \frac{h}{2} \ddot{y}_n$ 给出, 则格式 (IV) 的误差是:

- (1) 若 $E = O(1)$, 则 $x_{n+1} - \tilde{x}_{n+1} = O(h^3)$, $y_{n+1} - \tilde{y}_{n+1} = O(h^3)$;
- (2) 若 $E = O(h)$, 则 $x_{n+1} - \tilde{x}_{n+1} = O(h^2)$, $y_{n+1} - \tilde{y}_{n+1} = O(h^2)$.

其中 $\tilde{y}_{n+1}$ 和 $\tilde{x}_{n+1}$ 分别由 (IV) 算出 y_{n+1} 和 x_{n+1} 的近似值.

六、讨 论

1. 格式 (I) 虽然以迭代的形式给出的, 但在使用时最多只进行两次迭代, 如果发现精度不够, 则缩小步长要比增加迭代效果要好.

2. 对任何稳定系统 $\dot{y} = S(t, y)$, 总可以选取 $\varepsilon > 0$ 充分小, 使 $\varepsilon \dot{y} = \varepsilon S(t, y) = f(t, y)$ 中之 $f(t, y)$ 的模 $\|f(t, y)\|$ 适当小, 以满足稳定性条件. 但 ε 选的太小, 精度将受到一定的影响, 通常选 ε , 使 $\|f(t, y)\| < \frac{1}{2}$ 即可. 最好是对具体的问题进行专门的研究, 例如对热传导问题和线性代数问题(见 § 7).

3. 矩阵 B 一般都取成 $B = \beta I$ 的形式, 只要 $\beta \gg h$ 即可, 但后一条件亦非十分必要, 故 β 的选取实际上是十分自由的.

4. 开始计算时先根据初始条件算出 x_0 , 它是依赖于 h 的, 故变步长时要重新计算 x_n .

七、格式的应用

1. 对常微分方程的应用

[例1]: 对初值问题

$$\begin{cases} \dot{y} = 10^9 \sin y + 10^4 t, \\ y(0) = 0, \quad 0 \leq t \leq 100. \end{cases}$$

使用格式 (I), 每一积分步只进行一次迭代(显式), 取 $B = 100$, $\varepsilon = 0.5 \times 10^{-9}$, 即将上述问题化成:

$$\begin{cases} 0.5 \times 10^{-9} \dot{y} = 0.5 \sin y + 0.5 \times 10^{-5} t, \\ y(0) = 0, \quad 0 \leq t \leq 100. \end{cases}$$

在区间 $[0, 10^{-7}]$ 内用小步长 $h = 10^{-9}$, 然后放大到 $h = 10^{-2}$ 进行计算, 可以得到十分满意的结果, 见资料[1].

[例2]: 对初值问题

$$\begin{cases} \dot{y} = 100y \frac{\sin 300t}{(\ln y)^2}, \\ y(0) = e^{-1}. \end{cases}$$

通过分析已知, 该问题的真解 $y = \exp(-\cos 300t)^{1/3}$, 当 $y = 1$ 时右端函数分母出现零点, 且还具有高频振荡的特性, 大约在 t 轴上 $1/100$ 的间隔内右端函数的分母就出现一次零点, 计算实践和理论分析, 都证明古典格式不能处理这类问题.

用格式 (I) 进行处理, 首先将原问题化成如下形式:

$$\begin{cases} \varepsilon (\ln y)^2 \dot{y} = \varepsilon (100y \sin 300t), \\ y(0) = e^{-1}. \end{cases}$$

取 $\varepsilon = 2^{-11}$, $B = 1$, 又根据右端函数高频振荡的特性, 取 $h = 2^{-17}$; 在积分区间 $0 \leq t \leq \frac{1}{4}$ 上, $\ln y$ 共有 24 次经过零点, 用格式 (I) 在 109-乙机上可以得到三位有效数字的数值结果(该机字长 32 位二进制).

同类问题的另一个例子是:

$$\begin{cases} \dot{y} = (1 - y) / \sqrt[3]{t - \frac{1}{8}}, \\ y(0) = 0, \end{cases}$$

其真解是

$$y = 1 - \exp \left\{ - \left[\frac{3}{2} \left(t - \frac{1}{8} \right)^{2/3} - \frac{3}{8} \right] \right\}.$$

右端函数分母在 $t = \frac{1}{8}$ 处出现零点, 其函数值由 $-\infty$ 变到 $+\infty$. 在 $t = \frac{1}{8}$ 近旁这个问题的困难程度将比上例更为严重. 使用格式 (I) 将问题化成:

$$\begin{cases} \varepsilon \sqrt[3]{t - \frac{1}{8}} \dot{y} = \varepsilon (1 - y), \\ y(0) = 0. \end{cases}$$

选取 $\varepsilon = 2^{-11}$, $B = 8$, $h = 2^{-17}$; 在 $t = \frac{1}{8}$ 处也能给出具有 2 位有效数字的数值结果.

[例 3]: 考虑线性常系数初值问题:

$$\begin{cases} C\dot{y} = Dy + q(t), \\ y(t_0) = y_0. \end{cases}$$

其特点是矩阵 $C = (C_{ij})$ 的元素在数量级上有很大的差异. 按通常的积分方法, 首先必须对矩阵 C 求逆, 因矩阵 C 病态程度比较严重, 故使求逆过程无法进行. 但矩阵 D 有很好的性质, 使得求逆过程很容易实现, 因而可把原问题化成 $-D^{-1}C\dot{y} = -y - D^{-1}q(t)$, 然后用格式 (I), 此时格式 (I) 的 (ii) 中 $\left(I + \frac{2}{h}E_{n+1}^{(n)}\right)^{-1} = \left(I - \frac{2}{h}D^{-1}C\right)^{-1}$. 如果系统是稳定的, 则 $(-D^{-1}C)$ 的全部特征根具有正实部, 从而 $\left(I - \frac{2}{h}D^{-1}C\right)^{-1}$ 的全部特征根的模小于 1 (和 h 无关), 这样就很容易使计算过程稳定, 一个工程上的 30 阶方程就是用这个办法解决的. 该问题用几种古典方法都没有给出结果.

作为一个具体的例子考虑方程:

$$\begin{cases} \dot{y}_1 - 10\dot{y}_2 = -y_1 + 10y_2 - 10t - 10, \\ 0.0001\dot{y}_2 = y_1 - 11y_2 - e^{-t} + 11t + 0.0001. \end{cases}$$

写成 $C\dot{y} = Dy + q(t)$ 的形式:

$$C = \begin{pmatrix} 1 & -10 \\ 0 & 0.0001 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} -1 & 10 \\ 1 & -11 \end{pmatrix}, \quad q = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix},$$

其中 $q_1 = -10t - 10$, $q_2 = -e^{-t} + 11t + 0.0001$; 容易算出该系统一个特征值为 -1 , 另一个为 -1000 .

经过计算

$$C^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 100000 \\ 0 & 10000 \end{pmatrix},$$

如果化成通常首项系数为 1 的方程组, 则

$$\begin{pmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 99999 & -1099990 \\ 10000 & -110000 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 100000 \\ 0 & 10000 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix}.$$

从直观上一看就知道这个系统是不便于数值处理的.

但是如果按照以上的分析, 首先求出

$$D^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 10 \\ 1 & -11 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} -11 & -10 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

然后将方程化成:

$$\begin{pmatrix} 11 & -109.999 \\ 1 & -9.9999 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \tilde{q}_1 \\ \tilde{q}_2 \end{pmatrix},$$

其中 $\tilde{q}_1 = 10e^{-t} + 109.999$, $\tilde{q}_2 = e^{-t} - t + 9.9999$, 再用格式 (I), 即可顺利求解.

2. 对热传导方程的应用

考虑 m 维热传导方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \sum_{i=1}^{m'} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2},$$

在周期性区域上的纯初值问题。按传统的办法将空间方向进行离散化的处理,例如将右端项 $\frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}$ 用相应格子点上的二阶差分代替。我们可以得到一组常微分方程组: $\dot{u} = Au$ 。矩阵 A 由空间维数及离散化的方式决定,例如在 $[0, 1]$ 区间的一维问题,将空间方向 x 分为 N 等分,并考虑到周期性条件,则 $N+1$ 维矩阵 A 有如下形状:

$$A = \frac{\sigma}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} - 2$$

$\Delta x = \frac{1}{N}$, 选取 $\varepsilon \leq \frac{\Delta x^2}{4m\sigma}$, 将方程改写成:

$$\varepsilon \dot{u} = \varepsilon Au,$$

即可严格证明在使用格式 (IV) 时(显式), 格式对 $0 < \Delta t < \infty$ 是恒稳的¹⁾。此时的具体计算格式是

$$\begin{cases} \text{(i)} & u_{n+1}^{(0)} = u_n + 2v_n, \\ \text{(ii)} & v_{n+1} = p[\varepsilon Au_{n+1}^{(0)} + v_n], \\ \text{(iii)} & u_{n+1} = u_n + v_n + v_{n+1}, \end{cases}$$

其中 $v_0 = \frac{\Delta t}{2} Au_0$ 由初值决定, $p = \frac{\Delta t}{\Delta t + 2\varepsilon} < 1$ 。在作者另一文中还指出了上述格式相容性要求是 $\Delta t, \Delta x$ 独立地趋于零, 而和 $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ 的比值无关, 同时也分析了加入低阶项后对稳定性的影响。

[例 4]: 除了热传导方程外, 我们考虑如下的非线性抛物型方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2(u^5)}{\partial x^2}.$$

在 $[0, 1]$ 区间上的初-边值问题(见资料[2]), 该问题的通解, 由方程:

$$\begin{aligned} \frac{5}{4}(u - u_0)^4 + \frac{20}{3}u_0(u - u_0)^3 + 15u_0^2(u - u_0)^2 + 20u_0^3(u - u_0) \\ + 5u_0^4 \ln(u - u_0) = v(vt - x + x_0) \end{aligned}$$

以隐函数的形式给出, 其中 u_0, x_0, v 都是常数。不失一般性, 可以取 $u_0 = 1$, 用 $\phi(\xi)$ 表示上式右端的反函数, 于是 $u = \phi[v(vt - x + x_0)]$ 便可用 Newton-Raphson 解法而得, 初始条件和边值条件由以下给出:

$$u(x, 0) = \phi[v(-x + x_0)], \quad (7.1)$$

$$\begin{cases} u(0, t) = \phi[v(vt + x_0)], \\ u(1, t) = \phi[v(vt - 1 + x_0)], \end{cases} \quad (7.2)$$

如果把原微分方程改写成

1) 韩天敏, 热传导方程的一个恒稳显式差分格式, 尚未发表。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} 5u^4 \frac{\partial u}{\partial x},$$

则相当于扩散常数的量是 $5u^4$, 当 u 本身比较大, 例如 $u = 10$, 那么 σ 将等于 5×10^4 , 因而使用显式格式时 Δt 将有很大的限制. 资料[2]中用

$$(u^5)_j^{n+1} = (u^5)_j^n + 5(u^4)_j^n (u_j^{n+1} - u_j^n)$$

进行线性化处理, 然后使用隐式格式求解.

为了用格式 (I), 可直接从原微分方程出发, 将 x 方向分成 20 等分, 进行差分化处理得:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{du_1}{dt} = \frac{u_0^5 - 2u_1^5 + u_2^5}{\left(\frac{1}{20}\right)^2}, \quad \frac{du_2}{dt} = \frac{u_1^5 - 2u_2^5 + u_3^5}{\left(\frac{1}{20}\right)^2}, \\ \dots\dots\dots \\ \frac{du_{19}}{dt} = \frac{u_{18}^5 - 2u_{19}^5 + u_{20}^5}{\left(\frac{1}{20}\right)^2}. \end{array} \right.$$

进一步将上式改写成如下的形式:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{20}\right)^2 \left(\frac{1}{u_0}\right)^5 \frac{du_1}{dt} = \frac{1}{2} \left[1 - 2 \left(\frac{u_1}{u_0}\right)^5 + \left(\frac{u_2}{u_0}\right)^5 \right], \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{20}\right)^2 \left(\frac{1}{u_1}\right)^5 \frac{du_2}{dt} = \frac{1}{2} \left[1 - 2 \left(\frac{u_2}{u_1}\right)^5 + \left(\frac{u_3}{u_1}\right)^5 \right], \\ \dots\dots\dots \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{20}\right)^2 \left(\frac{1}{u_{18}}\right)^5 \frac{du_{19}}{dt} = \frac{1}{2} \left[1 - 2 \left(\frac{u_{19}}{u_{18}}\right)^5 + \left(\frac{u_{20}}{u_{18}}\right)^5 \right]. \end{array} \right.$$

取 $x_0 = 0$, $v = 1500$, $B = 2I$; 初值 $u_1(0)$, $u_2(0)$, $\dots$, $u_{19}(0)$ 和边值 $u_0(t)$, $u_{20}(t)$ 分别由 (7.1) 和 (7.2) 式用 Newton-Raphson 法进行求解给出. 取 t 方向的步长 4 倍于资料[2]上隐式格式的步长, 即 $\Delta t / \Delta x^2 = 0.004$, 迭代次数为 2, 表 1 给出了在 109-丙机上第 2000 步的结果. 如果迭代次数改为 1, 则稳定性同样得到保证, 只是精度略有下降.

3. 关于求解线性代数方程的应用

考虑线性代数方程:

$$Ay = b. \quad (7.3)$$

如果 A 对称正定, 则伴随它同时引入一个常微分方程:

$$C\dot{y} = -Ay + b. \quad (7.4)$$

为简单起见, 假定矩阵 C 为对角线上具有正元素的对角形矩阵, 则 (7.4) 式便有稳态解存在, 而这个稳态解 $y = A^{-1}b$ 就是代数方程 (7.3) 式的解. 事实上, Jacobi 迭代法就是在 (7.4) 式中取 $C = D = \text{diag} \{a_{11}, a_{22}, \dots, a_{mm}\}$, 取 $\Delta t = 1$, 对 (7.4) 式使用 Euler 折线法进行数值积分的格式, 而逐次超松弛 (SOR) 法也是折线法的改进形式, 这种改进使用了“半隐一半显”的技巧, 从而使积分步长, 或者叫松弛因子 ω 可以扩大到 $0 < \omega < 2$ 的范围.

大家知道当矩阵 A 病态程度比较严重时, 上面所提到的这两种格式就会暴露出严重的缺陷, 从常微分方程的观点来看, 就是当解在向稳态解过渡的后期, 为了获得较快的收敛速度应当有更大的积分步长, 但由于稳定性的限制而作不到这一点. 使用本文的格式可以克服稳定

表 1 $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$

真 解	近 似 解	误 差	真 解	近 似 解	误 差
0.134 072 639 ²	0.134 072 719 ²	0.798 807 013 ⁻⁵	0.133 493 014 ²	0.133 493 443 ²	0.428 576 022 ⁻⁴
0.134 015 006 ²	0.134 015 158 ²	0.151 731 655 ⁻⁴	0.133 434 646 ²	0.133 435 063 ²	0.416 337 279 ⁻⁴
0.133 957 300 ²	0.133 957 516 ²	0.216 282 787 ⁻⁴	0.133 376 203 ²	0.133 376 599 ²	0.395 305 396 ⁻⁴
0.133 899 521 ²	0.133 899 793 ²	0.272 493 925 ⁻⁴	0.133 317 685 ²	0.133 318 051 ²	0.365 428 859 ⁻⁴
0.133 841 669 ²	0.133 841 989 ²	0.320 330 145 ⁻⁴	0.133 259 093 ²	0.133 259 419 ²	0.326 653 243 ⁻⁴
0.133 783 744 ²	0.133 784 104 ²	0.359 738 769 ⁻⁴	0.133 200 424 ²	0.133 200 703 ²	0.278 923 544 ⁻⁴
0.133 725 746 ²	0.133 726 136 ²	0.390 667 992 ⁻⁴	0.133 141 681 ²	0.133 141 903 ²	0.222 187 081 ⁻⁴
0.133 667 674 ²	0.133 668 087 ²	0.413 069 792 ⁻⁴	0.133 082 861 ²	0.133 083 018 ²	0.156 374 298 ⁻⁴
0.133 609 528 ²	0.133 609 955 ²	0.426 889 746 ⁻⁴	0.133 023 965 ²	0.133 024 047	0.824 715 243 ⁻⁵
0.133 551 308 ²	0.133 551. 740 ²	0.432 075 466 ⁻⁴			

性的束缚,因而使积分步长大幅度地扩大,这样就获得了很好的收敛速度.

在方程(7.4)两端乘以常数 $\varepsilon > 0$:

$$\varepsilon C \dot{y} = \varepsilon(-Ay + b),$$

并改写上式为:

$$\varepsilon \dot{y} = -\varepsilon C^{-1}Ay + \varepsilon C^{-1}b,$$

对它套用格式 (IV), 即可得到一类求解线代数方程(7.3)式的迭代格式:

$$(B_0) \begin{cases} \text{(i)} & y_{n+1}^{(0)} = y_n + 2x_n, \\ \text{(ii)} & x_{n+1} = p[-\varepsilon C^{-1}Ay_{n+1}^{(0)} + \varepsilon C^{-1}b + x_n], \\ \text{(iii)} & y_{n+1} = y_n + x_n + x_{n+1}, \end{cases}$$

其中

$$p = \frac{h}{h + 2\varepsilon}, \quad x_0 = \frac{h}{2} C^{-1}(-Ay_0 + b),$$

h 为参数(即积分步长), 给出 y_0 和 h 之后即可算出 x_0 , 然后利用 (B_0) 即可逐次进行迭代. 可以证明, 当 $C = I$ 为单位矩阵时, 取 $\varepsilon \leq \frac{1}{\lambda}$, λ 为矩阵 A 的最大特征值, 迭代格式 (B_0) 是收敛的.

如果在 (B_0) 中使用 Seidel 技巧, 则可得另一类求解线性代数方程(7.3)的迭代格式:

$$(B_1) \begin{cases} \text{(i)} & y_{n+1}^{(0)} = y_n + 2x_n, \\ \text{(ii)} & x_{n+1} = p(\varepsilon C^{-1}Fy_{n+1}^{(0)} - \varepsilon C^{-1}Dy_{n+1}^{(0)} + \varepsilon C^{-1}Ey_{n+1} + \varepsilon C^{-1}b + x_n), \\ \text{(iii)} & y_{n+1} = y_n + x_n + x_{n+1}, \end{cases}$$

其中 E 和 F 为 A 的下三角形和上三角形矩阵, 分别取相应位置 A 中元素的负值, D 的意义如前. 可以证明, 取 $C = I$ 为单位矩阵, 当 ε 充分小时格式 (B_1) 是收敛的. 在格式 (B_1) 中取 $C = 2D$, $\varepsilon = 1$, 此时 $p = \frac{h}{h + 2}$, $x_0 = \frac{h}{2} = 0.5D^{-1}(-Ay_0 + b)$, 则可得如下一个具体的格式:

$$(B) \begin{cases} \text{(i)} & y_{n+1}^{(0)} = y_n + 2x_n, \\ \text{(ii)} & x_{n+1} = p[0.5D^{-1}Fy_{n+1}^{(0)} - 0.5y_{n+1}^{(0)} + 0.5D^{-1}Ey_{n+1} + 0.5D^{-1}b + x_n], \\ \text{(iii)} & y_{n+1} = y_n + x_n + x_{n+1}. \end{cases}$$

格式(B)的收敛性有待更进一步的研究,在实用上它的优点是:除了 h 之外没有其他的参数需要确定,存储量方面除了矩阵 A 和向量 B 之外,只需两个向量场(而格式(B_0)则需要三个向量场);在运算量方面,每迭代一步比SOR法只多4个向量加法。 h 的大小(从而 ρ)可以根据余量(或者说导数)的大小进行选择,经验规则是: H 起始时小,例如一开始置 $h_0 = 4$ (相当于SOR法中 $\omega = 2$ 的情形),然后根据余量下降的情况逐步加大 h , h 一直加到余量不再下降时为止,此时再用较小的 h ,例如 $h = h_0 + \Delta h$ 重新重复上一过程。用公式表示:

$$h = h_0 + m\Delta h,$$

$$m = 0, 1, 2, \dots, M, 1, 2, \dots, M, 1, 2, \dots, M, 1, 2, \dots,$$

对具有 10^6 条件数的病态矩阵, $\Delta h \simeq 30$, $M \simeq 20$, 即 h 可以大到600左右。

用格式(B)对Hilbert矩阵(最高到10阶),由杆问题形成的矩阵(最高到88阶)以及重调和方程离散化后所形成的矩阵(961阶)进行了大量的试算,数值结果表明无论在精度方面,还是收敛速度方面,格式(B)都比已有的方法要好¹⁾。

参 考 资 料

- [1] 韩天敏,应用数学与计算数学, 3 (1966), 3, 187.
- [2] Richtmyer, R. D., *Difference Methods for Initial-value Problems*, 1957, Interscience Publishers INC.

1) 韩天敏,病态线性代数方程组的一种迭代解法,尚未发表。