线性半负定系统的 Padé 逼近型 Runge-Kuta 方法的能量恒等式探究

焦淼森
导师：吴开亮副教授

南方科技大学

2023 年 5 月 18 日

Outline

1. 背景介绍
2. Padé 逼近及例子
3. 一般次对角 Padé 逼近型 RK 方法的离散能量定律
4. 总结
5. 参考文献

Runge-Kuta 方法（RK 方法）

- Runge-Kutta 方法（RK 方法）是数值求解微分方程（组）的一类重要算法。
- 能量方法是一类重要的用于分析 RK 方法稳定性的工具。
- 论文 [Sun, Wei & Wu, SIAM Journal on Numerical Analysis, 2022, 60(5): 2448-2481] 中，作者提出了一套新框架。

线性半负定系统的 RK 方法

本文涉及到的线性半负定系统有如下的一般形式

$$\frac{d}{dt}u = Lu, \quad u = u(t) \in L^2([0,T];V), \tag{2.1}$$

其中 V 是一个有限或无限的实 Helbert 空间，这个空间中的内积为 $< \cdot, \cdot >$，相应的诱导范数记作 $||\cdot||$。L 为一个有界线性半负定算子，它满足对任意 v ，都有 $< Lv, v > \leq 0$ 成立。由半负定算子 L 诱导的半内积 $[\omega, v] := - < L\omega, v > - < \omega, Lv >$
一般而言，系统 (2.1) 的 RK 方法可以写为

$$u^{n+1} = \mathcal{R}(\tau L)u^n \tag{2.2}$$

$\mathcal{R}(Z)$ 是与 e^Z 的有理逼近有关的稳定函数，它满足关系

$$\mathcal{R}(Z) = (\mathcal{Q}(Z))^{-1}\mathcal{P}(Z) \tag{2.3}$$

线性半负定系统的 RK 方法

$\mathcal{P}(Z)$ 和 $\mathcal{Q}(Z)$ 分别是 Z 的 s_p 阶和 s_q 阶多项式，也就是说：

$$\mathcal{P}(Z) = \sum_{i=0}^{s} \theta_i Z^i, \qquad with\ \theta_i = 0\ for\ i > s_p \tag{2.4a}$$

$$\mathcal{Q}(Z) = \sum_{i=0}^{s} \vartheta_i Z^i, \qquad with\ \vartheta_i = 0\ for\ i > s_q \tag{2.4b}$$

为了方便，我们令 $s := max\{s_p, s_q\}$，$P := \mathcal{P}(\tau L)$ 以及 $Q := \mathcal{Q}(\tau L)$。

定理及引理介绍

引理 2.2[1]

RK 方法 (2.2) 的解满足下列等式:

$$||u^{n+1}||^2 - ||u^n||^2 = \sum_{k=0}^{s} \beta_k \tau^{2k} ||L^k \omega^n||^2 + \sum_{i=0}^{s-1} \sum_{j=0}^{s-1} \gamma_{i,j} \tau^{i+j+1} [L^i \omega^n, L^j \omega^n] \tag{2.8}$$

其中 β_k 和 $\gamma_{i,j}$ 由 $\alpha_{i,j} := \theta_i \theta_j - \vartheta_i \vartheta_j$ 计算得到:

$$\beta_k = \sum_{l=max\{0,2k-s\}}^{min\{2k,s\}} \alpha_{l,2k-l} (-1)^{k-l} \tag{2.9}$$

$$\gamma_{i,j} = \sum_{l=max\{0,i+j+1-s\}}^{min\{i,j\}} (-1)^{min\{i,j\}+1-l} \alpha_{l,i+j+1-l} \tag{2.10}$$

定理及引理介绍

定义如下矩阵 $B := diag(\{\beta_k\}_{k=0}^{s})$　　$\Upsilon := (\gamma_{i,j})_{i,j=0}^{s-1}$

定理 2.4[1]

如果 RK 方法 (2.2) 满足矩阵 B 与 Υ 均为半负定矩阵，则 RK 方法为无条件强稳定的，也就是说：

$$||u^{n+1}||^2 \leq ||u^n||^2 \quad \forall \tau \geq 0 \tag{2.13}$$

Outline

1 背景介绍

2 Padé 逼近及例子

3 一般次对角 Padé 逼近型 RK 方法的离散能量定律

4 总结

5 参考文献

概念介绍

Padé 逼近是一种有理函数的逼近方法。

定理 3.1[2]

e^z 的 (k,j)-Padé 可以表示成如下形式:

$$R_{k,j}(z) = \frac{P_{k,j}(z)}{Q_{k,j}(z)} \tag{3.1}$$

其中:

$$P_{k,j}(z) = 1 + \frac{k}{j+k}z + \frac{k(k-1)}{(j+k)(j+k-1)}\frac{z^2}{2!} + \cdots + \frac{k(k-1)\dots 1}{(j+k)\dots(j+1)}\frac{z^k}{k!} \tag{3.2}$$

$$\begin{aligned} Q_{k,j}(z) &= 1 - \frac{j}{k+j}z + \frac{j(j-1)}{(k+j)(k+j-1)}\frac{z^2}{2!} - \cdots + (-1)^j\frac{j(j-1)\dots 1}{(k+j)\dots(k+1)}\frac{z^j}{j!} \\ &= P_{jk}(-z) \end{aligned} \tag{3.3}$$

(s-1,s)-Padé 逼近被称作是次对角 Padé 逼近

一些例子

例子 3.2 当 $s=1$ 时，该方法就变为了欧拉向后方法，相应的稳定函数为 $\mathcal{R}(Z)=(I-Z)^{-1}$。我们可以计算得到 $B=diag\{0,-1\}$，$\Upsilon=(-1)=-U^TDU$（其中 $D=(1),U=(1)$）。由于 $\omega^n=Q^{-1}u^n=\mathcal{R}(\tau L)u^n=u^{n+1}$，根据定理 2.3，我们有
$||u^{n+1}||^2-||u^n||^2=-\tau^2||Lu^{n+1}||^2-\tau[[u^{n+1}]]^2\leq 0$

一些例子

例子 3.3 当 $s=2$ 时，相应的稳定函数为 $\mathcal{R}(Z)=(I-\frac{2}{3}Z+\frac{1}{6}Z^2)^{-1}(I+\frac{1}{3}Z)$。我们可以计算得到 $B=diag\{0,0,-\frac{1}{36}\}$，

$$\Upsilon=\begin{pmatrix}-1 & \frac{1}{6}\\ \frac{1}{6} & -\frac{1}{9}\end{pmatrix}$$

将其分解得到

$$D=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1/12\end{pmatrix}$$

$$U=\begin{pmatrix}1 & -\frac{1}{6}\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

进一步得到
$||u^{n+1}||^2-||u^n||^2=-\frac{1}{36}\tau^4||L^2\omega^n||^2-\tau[[u^{(0)}]]^2-\frac{1}{12}\tau^3[[Lu^{(1)}]]^2\leq 0$

是否对任意阶的次对角 Pdé 逼近，相应的矩阵 Υ 和 B 都是半负定的？

Outline

1. 背景介绍
2. Padé 逼近及例子
3. 一般次对角 Padé 逼近型 RK 方法的离散能量定律
4. 总结
5. 参考文献

定理介绍

在本节我们将基于矩阵的 Cholesky 分解给出线性半负定系统的一般次对角 Padé 逼近型 RK 方法的离散能量定律，进而得到它是无条件强稳定的。
次对角 Padé 逼近相应的系数为

$$\theta_i = \frac{(s-1)!}{(2s-1)!}\frac{(2s-i-1)!}{i!(s-i-1)!} \quad \vartheta_i = (-1)^i \frac{s!}{(2s-1)!}\frac{(2s-i-1)!}{i!(s-i)!} \quad 0 \le i \le s -$$

$$\theta_s = 0 \quad \vartheta_s = (-1)^s \frac{(s-1)!}{(2s-1)!} \tag{4.1}$$

定理介绍

定理 4.1[P7]

对任意的 $s \in \mathbb{Z}^+$，对称矩阵 Υ 恒为负定矩阵。更近一步，他有如下的 Cholesky 分解：

$$\Upsilon = -U^T DU \tag{4.2}$$

其中 $D = diag(\{d_k\}_{k=0}^{s-1})$，$d_k = \frac{(k!)^2}{(2k)!(2k+1)!}$，$U = (\mu_{i,j})_{i,j=0}^{s-1}$ 为满足如下关系的上三角矩阵

$$\mu_{i,j} = \begin{cases} \frac{s!}{(2s)!}\frac{(2i+1)!}{i!(i+j+1)!}\frac{(2s+i-j)!}{(s-1-j)!}\frac{(s-1-\frac{i+j}{2})!(\frac{i+j}{2})!}{(s-\frac{j-i}{2})!(\frac{j-i}{2})!} & i \le j \ and \ i \equiv j (mod\ 2) \\ \frac{-2s!}{(2s)!}\frac{(2i+1)!}{i!(i+j)!}\frac{(2s+i-j-2)!}{(s-1-j)!}\frac{(s-1-\frac{i+j+1}{2})!(\frac{i+j-3}{2})!}{(s-1-\frac{j-i+1}{2})!(\frac{j-i-1}{2})!} & i \le j \ and \ i \equiv j+1 (mod\ 2) \\ 0 & otherwise \end{cases} \tag{4.3}$$

定理介绍

定理 4.2[P7]

对任意的 $s \in \mathbb{Z}^+$，由 (2.11) 定义的对角矩阵 $B = diag(\{\beta_k\}_{k=0}^s)$ 恒为半负定矩阵。更进一步，它满足关系：

$$\beta_k = 0 \; for \; k \leq s-1 \qquad \beta_s = -(\frac{(s-1)!}{(2s-1)!})^2 \tag{4.4}$$

定理介绍

定理 4.3[P8]

对任意的 $s \in \mathbb{Z}^+$，线性半负定系统 (1.1) 的 (s-1,s)-Padé 逼近型 RK 方法满足下列离散能量恒等式。

$$||u^{n+1}||^2 - ||u^n||^2 = -(\frac{(s-1)!}{(2s-1)!})^2 \tau^{2s} ||L^s \omega^n||^2 - \sum_{k=0}^{s-1} d_k \tau^{2k+1} [[L^k u^{(k)}]]^2 \tag{4.5}$$

$$u^{(k)} := \sum_{j=k}^{s-1} \mu_{k,j} (\tau L)^{j-k} Q^{-1} u^n \tag{4.6}$$

其中 $d_k = \frac{(k!)^2}{(2k)!(2k+1)!}$，$\mu_{k,j}$ 由 (4.3) 决定。

定理 4.1 的证明

定义 $F(s)=\Upsilon+U^TDU$，只需证明 $F(s)=O$ 对任意 $s\in\mathbb{Z}^+$ 均成立即可

将 $F(s)$ 矩阵第 p 行第 q 列的元素记做 $\mathcal{F}_{p,q}(s)$，首先定义：

$$\eta_0^{(s)}:=1\ \eta_i^{(s)}:=\frac{s(s-1)\dots(s-i+1)}{(2s-1)\dots(2s-i+1)(2s-i)}\ \theta_i^{(s)}:=\frac{(s-i)}{s}\eta_i^{(s)},\ \ i\in\mathbb{Z}^+ \tag{4.7}$$

当 $0\le i\le s$ 时，有 $\eta_i^{(s)}=|\vartheta_i|,\theta_i^{(s)}=\theta_i$ 成立，而当 $s<i<2s$ 的时候，$\eta_i^{(s)}=\theta_i^{(s)}=0$ ，进一步定义

$$\gamma_{p,q}^{(s)}=\sum_{l=0}^{min\{p,q\}}(-1)^{min\{p,q\}+1-l}\alpha_{l,p+q+1-l}^{(s)}\qquad p,q\in\mathbb{N} \tag{4.8}$$

对任意 $i,j\in\mathbb{Z}^+$ 都有

$$\gamma_{p,q}^{(s)}=\gamma_{p,q}\qquad 0\le p,q\le s-1 \tag{4.9}$$

定理 4.1 的证明

定义： $\nu_{i,j}^{(s)} = \sqrt{d_{i-1}}\mu_{i-1,j-1}$

因此对于 $1 \leq p, q \leq s$，**我们可以将** $\mathcal{F}_{p,q}(s)$ **重写为**

$$\mathcal{F}_{p,q}(s) = \gamma_{p-1,q-1}^{(s)} + \sum_{i=1}^{min\{p,q\}} \nu_{i,p}^{(s)}\nu_{i,q}^{(s)} = \gamma_{p-1,q-1}^{(s)} + \sum_{i=1}^{\infty} \nu_{i,p}^{(s)}\nu_{i,q}^{(s)} \tag{4.11}$$

定理 4.1 的证明

观察一：$\mathcal{F}_{p,q}(s)$ 为有理函数。

观察二：只需要证明该有理函数在不可数集合 $\widehat{\mathbb{R}}$ 上为 0 。

其中 $\widehat{\mathbb{R}} = \mathbb{R} \setminus \{0, \pm\frac{1}{2}, \pm 1, \pm\frac{3}{2} ...\}$

定理 4.1 的证明

定理 4.6[P9]

对于任意 $p, q \in \mathbb{Z}^+$ 和任意 $s \in \widehat{\mathbb{R}}$，有理函数 $\mathcal{F}_{p,q}(s)$ 都为零，也就是说

$$\gamma_{p-1,q-1}^{(s)} + \sum_{i=1}^{min\{p,q\}} \nu_{i,p}^{(s)} \nu_{i,q}^{(s)} = 0 \quad \forall p, q \in \mathbb{Z}^+, \quad \forall s \in \widehat{\mathbb{R}} \tag{4.12}$$

定理 4.6 的证明

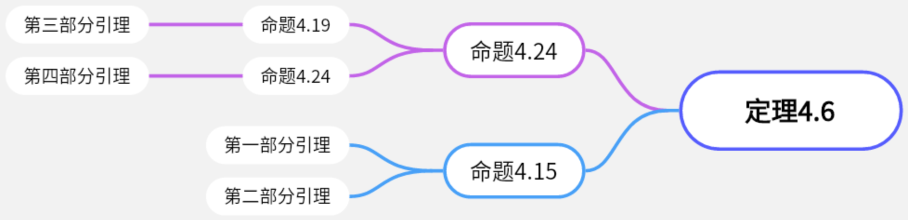

图: 证明流程

$$\varphi_n^{(3)}(s;p,q) = \frac{(s+\frac{1}{2}-p)_n(-p)_n(s+\frac{1}{2}-q)_n(1-q)_n}{(p-s+1)_n(p+\frac{3}{2})_n(q-s+2)_n(q+\frac{3}{2})_n} \tag{4.44}$$

$$\phi_n^{(3)}(s;p,q) := \varphi_n^{(3)}(s;p,q)\frac{\mathcal{C}_{n,p,q}^{(1,s)(3)} + \mathcal{C}_{n,p,q}^{(2,s)(3)}}{(2p+1)(p-s)(q-s+1)(2q+1)} \tag{4.45}$$

这之中的系数满足关系：

$$\mathcal{C}_{n,p,q}^{(1,s)(3)} = (4n+3)(s-2q)(p-n)(2s-2p+2n+1)$$

$$\mathcal{C}_{n,p,q}^{(2,s)(3)} = (4n+1)(s-2p)(s-q-n-1)(2q+2n+1)$$

而 $(x)_0 := 1, \quad (x)_n := \prod_{k=0}^{n-1}(x+k), \quad n \in \mathbb{Z}^+$ **为升阶乘函数。**

命题 4.15 与 4.24

命题 4.15[P15]

对于任意 $s \in \widehat{\mathbb{R}}$ ，任意 $p, q \in \mathbb{Z}^+$ 且 $p \equiv q + 1 (mod\ 2)$ ，我们都有如下等式成立。

$$\sum_1^{\infty} \nu_{i,p}^{(s)} \nu_{i,q+1}^{(s)} + \sum_1^{\infty} \nu_{i,p+1}^{(s)} \nu_{i,q}^{(s)} = (\frac{(s-p)(s-q)}{s^2} + 1) \eta_p^{(s)} \eta_q^{(s)} = \theta_p^{(s)} \theta_q^{(s)} + \eta_p^{(s)} \eta_q^{(s)} \tag{4.43}$$

命题 4.15 与 4.24

命题 4.24[P23]

对于任意 $s \in \widehat{\mathbb{R}}$ ，任意 $p, q \in \mathbb{Z}^+$ 且 $q \equiv p(mod\ 2)$，我们都有如下等式成立。

$$\sum_{1}^{\infty} \nu_{i,p}^{(s)} \nu_{i,q+1}^{(s)} + \sum_{1}^{\infty} \nu_{i,p+1}^{(s)} \nu_{i,q}^{(s)} = (\frac{(s-p)(s-q)}{s^2} - 1)\eta_p^{(s)}\eta_q^{(s)} = \theta_p^{(s)}\theta_q^{(s)} - \eta_p^{(s)}\eta_q^{(s)} \tag{4.67}$$

定理 4.6 的证明

$$
\begin{aligned}
\sum_{i-1}^{\infty}\nu_{i,p}^{(s)}\nu_{i,q}^{(s)} &= \sum_{k=0}^{p-1}(-1)^k\sum_{i=1}^{\infty}\nu_{i,p-k}^{(s)}\nu_{i,q+k}^{(s)} - \sum_{k=1}^{p-1}(-1)^k\sum_{k=1}^{\infty}\nu_{i,p-k}^{(s)}\nu_{i,q+k}^{(s)} \\
&= \sum_{k=1}^{p}(-1)^{k-1}\sum_{i=1}^{\infty}\nu_{i,p-k+1}^{(s)}\nu_{i,q+k-1}^{(s)} + \sum_{k=1}^{p-1}(-1)^{k-1}\sum_{k=1}^{\infty}\nu_{i,p-k}^{(s)}\nu_{i,q+k}^{(s)} \\
&= \sum_{k=1}^{p-1}(-1)^{k-1}\boxed{\left(\sum_{i=1}^{\infty}\nu_{i,p-k+1}^{(s)}\nu_{i,q+k-1}^{(s)} + \sum_{k=1}^{\infty}\nu_{i,p-k}^{(s)}\nu_{i,q+k}^{(s)}\right)} \\
&\quad + (-1)^{p-1}\sum_{i=1}^{\infty}\nu_{i,1}^{(s)}\nu_{i,p+q-1}^{(s)}
\end{aligned}
$$

定理 4.2 的证明

定理 4.25[P25]

给定 $s \in \mathbb{Z}^+$ ，$1 \leq p, q \leq s-1$ 且 $p, q \in \mathbb{Z}^+$ 时，有如下等式成立：

$$\gamma_{p-1,q} + \gamma_{p,q-1} = -\alpha_{p,q} \tag{4.68}$$

当 $s > 1$ 时，存在 k 使得 $0 < k < s$ ，对于这部分 k ，我们有

$$\beta_k = \sum_{l=max\{0,2k-s\}}^{min\{2k,s\}} \alpha_{l,2k-l}(-1)^{k-l} = \gamma_{k-1,k} + \gamma_{k,k-1} + \alpha_{k,k} = 0 \text{ 。}$$

Outline

1. 背景介绍
2. Padé 逼近及例子
3. 一般次对角 Padé 逼近型 RK 方法的离散能量定律
4. **总结**
5. 参考文献

总结

- 利用数值实验发现了任意阶次对角 Padé 逼近相应矩阵的 Cholesky 分解。
- 利用超几何级数技术与复杂的组合恒等式完成了严格证明。
- 证明了次对角 Padé 逼近型 RK 方法对任何线性半负定系统都是无条件强稳定的。
- 拓展了论文 [Sun, Wei & Wu, SIAM Journal on Numerical Analysis, 2022, 60(5): 2448-2481] 中关于对角 Padé 逼近的理论结果。

谢谢，请各位老师批评指正。

Outline

1 背景介绍

2 Padé 逼近及例子

3 一般次对角 Padé 逼近型 RK 方法的离散能量定律

4 总结

5 参考文献

参考文献 I

[1] SUN Z, WEI Y, WU K. On Energy Laws and Stability of Runge–Kutta Methods for Linear Seminegative Problems[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 2022, 60(5): 2448-2481.

[2] EHLE B L. A-Stable Methods and Padé Approximations to the Exponential[J]. SIAM Journal on Mathematical Analysis, 1973, 4(4): 671-680.