第一章　常微分方程初、边值问题数值解法

§1.1　引 言

一阶常微分方程初值问题

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y), \quad x \in [a,b] \tag{1.1.1}$$

$$y(a) = y_0 \tag{1.1.2}$$

其中 f 是 (x,y) 的已知函数， y_0 为给定的初始值。

定理 1.1.1.　如果假设 $f(x,y)$ 满足：

(i) $f(x,y)$ 是实值函数，

(ii) 函数 $f(x,y)$ 在矩形区域 $\Omega = \{(x,y)|\ x \in [a,b],\ \ y \in (-\infty,\infty)\}$ 内连续，

(iii) $f(x,y)$ 关于 y 满足 **Lipschitz 条件**: 即存在正常数 L, 使得对的任意 $x \in [a,b]$, 不等式

$$|f(x,y_1) - f(x,y_2)| \leq L|y_1 - y_2|, \tag{1.1.3}$$

均成立。

则问题存在唯一的解 $y(x), x \in [a,b]$ 。

定义 1.1.1.　称初值问题 *(1.1.1)-(1.1.2)* 对初值 y_0 是适定的，如果存在常数 $K > 0$, $\eta > 0$, 使得当 $\forall \varepsilon \leq \eta$, 及

$$|y_0 - \tilde{y}_0| < \varepsilon, \quad |f(x,y) - \tilde{f}(x,y)| < \varepsilon,\ (x,y) \in \Omega \tag{1.1.4}$$

时，初值问题

$$\frac{dz}{dx} = \tilde{f}(x,y), \quad z(x_0) = \tilde{y}_0 \tag{1.1.5}$$

有解存在，且满足 $|y(x) - z(x)| \leq K\varepsilon$.

定理 1.1.2.　如果右端函数 $f = f(x,y)$ 在区域 Ω 上满足 *Lipschitz* 条件，则初值问题 *(1.1.1)-(1.1.2)* 对任何初值 u_0 都是适定的。

常微分方程的两类计算方法：

(1) **单步法**.　y_{n+1} 的值仅取决于 x_n 处的应变量及其导数值。

(2) **多步法**. y_{n+1} 的值需要应变量及其导数在 x_{n+1} 之前的多个网格结点处的值。

§1.2 Euler 方法

§1.2.1 Euler 方法及其几何意义

计算前要对求解区间作剖分

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b,$$

计算出解 $y(x)$ 的近似值 $y(x_i) \approx y_i (i = 1, \cdots, n)$ 。一般常取 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为等距的，即 $x_i = a + ih \ (i = 0, 1, \cdots, n)$, $h = (b - a)/n$ 称为 **步长** 。

当 $y(x_0)$ 已知时，由给定方程计算出 $y'(x_0)$. 假设 $x_1 = x_0 + h$ 充分接近 x_0, 则

$$y(x_1) \approx y_1 := y_0 + hy'(x_0). \tag{1.2.1}$$

因此可以用

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) \tag{1.2.2}$$

近似 $y(x)$ 在 $x = x_1$ 处的值。类似地，又可算出 $y(x)$ 在 $x_2 = x_0 + 2h$ 处的近似值

$$y(x_2) \approx y_2 \equiv y_1 + hf(x_1, y_1) \tag{1.2.3}$$

一般地 (**Euler 公式**)

$$y_{m+1} = y_m + hf(x_m, y_m) \tag{1.2.4}$$

几何意义： **以折代曲**, 即过点 (x_0, y_0) 的积分曲线就可以用一条折线 $(x_0, y_0) \longleftrightarrow (x_1, y_1) \longleftrightarrow \cdots \longleftrightarrow (x_m, y_m) \longleftrightarrow (x_{m+1}, y_{m+1}) \longleftrightarrow \cdots$ 来近似地代替。

§1.2.2 Euler 方法的误差分析

在区间 $[x, x + h]$ 积分，则有

$$y(x + h) = y(x) + \int_x^{x+h} f(s, y(s))\ ds \tag{1.2.5}$$

再用左矩形公式计算积分，并令 $x = x_m$, 则有

$$y(x_m + h) = y(x_m) + hf(x_m, y(x_m)) + R_m \tag{1.2.6}$$

其中

$$R_m = \int_{x_m}^{x_{m+1}} f(s, y(s))ds - hf(x_m, y(x_m)).$$

如果用 y_m 代替 (1.2.6) 中的 $y(x_m)$, 则导出 Euler 方法 (1.2.4) 。R_m 称为 Euler 方法的 **局部截断误差** 。它表示当 $y_m = y(x_m)$ 是精确值时，利用 Euler 方法计算 $y(x_m + h)$ 的误差。

1.估计局部截断误差 R_m

设 $f(x, y)$ 关于 x 和 y 均满足 Lipschitz 条件， K, L 为相应的 Lipschitz 常数，则有

$$\begin{aligned}
|R_m| &= |\int_{x_m}^{x_{m+1}} [f(x, y(x)) - f(x_m, y(x_m))]dx| \\
&\le \int_{x_m}^{x_{m+1}} |f(x, y(x)) - f(x_m, y(x))|dx \\
&+ \int_{x_m}^{x_{m+1}} |f(x_m, y(x)) - f(x_m, y(x_m))| \\
&\le K \int_{x_m}^{x_{m+1}} |x - x_m| \; dx + L \int_{x_m}^{x_{m+1}} |y(x) - y(x_m)| \; dx \\
&\le \frac{1}{2} K h^2 + L \int_{x_m}^{x_{m+1}} |y'(\xi)| \cdot |x - x_m| \; dx \\
&\le \frac{h^2}{2}(K + LM) \equiv R, \quad x_m < \xi < x_{m-1}
\end{aligned} \tag{1.2.7}$$

式中

$$M = \max_{a \le x \le b} |y'(x)| = \max_{a \le x \le b} |f(x, y(x))|.$$

2.估计整体误差 ε_m

整体误差 ε_m 定义为

$$\varepsilon_m \equiv y(x_m) - y_m.$$

因为 Euler 公式

$$y_{m+1} = y_m + hf(x_m, y_m)$$

和

$$y(x_m+h)=y(x_m)+hf(x_m,y(x_m))+R_m$$

两式相减得

$$\varepsilon_{m+1}=\varepsilon_m+h[f(x_m,y(x_m))-f(x_m,y_m)]+R_m \tag{1.2.8}$$

则

$$|\varepsilon_{m+1}|\le(1+hL)|\varepsilon_m|+|R_m|$$

对 $n=m+1,m,\cdots,1$, 反复利用上述不等式和 (1.2.7), 有

$$\begin{aligned}|\varepsilon_n| &\le (1+hL)|\varepsilon_{n-1}|+R\\ &\le (1+hL)^2|\varepsilon_{n-2}|+R+(1+hL)R\\ &\quad\cdots\\ &\le (1+hL)^n|\varepsilon_0|+R\sum_{j=0}^{n-1}(1+hL)^j\end{aligned}$$

如果 $a\le x_n=nh\le b$, 则有

$$\begin{aligned}|\varepsilon_n| &\le (1+hL)^n|\varepsilon_0|+\tfrac{R}{hL}\left((1+hL)^n-1\right)\\ &\le e^{L(b-a)}|\varepsilon_0|+\tfrac{R}{hL}(e^{L(b-a)}-1),n=1,2,\cdots\end{aligned}$$

综上所述，有

定理 1.2.1. 如果 $f(x,y)$ 关于 x,y 满足 *Lipschitz* 条件， L,K 为相应的 *Lipschitz–* 常数，且当 $h\to 0$ 时， $y(x_0)\to y_0$, 则 *Euler* 方法的解 x_n 一致收敛于初值问题 *(1.1.1)–(1.1.2)* 的解，且整体截断误差 ε_n 满足估计式

$$|\varepsilon_n|\le e^{L(b-a)}|\varepsilon_0|+\frac{h}{2}(M+K/L)(e^{L(b-a)}-1). \tag{1.2.9}$$

如果 $y(x_0)=y_0$, 则由上式得

$$|\varepsilon_n|=O(h)$$

即 *Euler* 方法的截断误差与 h 同阶。

§1.2.3 Euler 方法的稳定性 (渐近稳定性)

如果存在常数 C 及 h_0, 使得对任意初值 y_0 和 z_0, 对应 Euler 方法的解 y_m 和 z_m 满足估计式

$$|y_m - z_m| \le C|y_0 - z_0|,\ 0 < h < h_0,\ a \le mh \le b \tag{1.2.10}$$

则称 Euler 方法是 **稳定的**. 其中 y_m 和 z_m 分别是以 y_0 和 z_0 为初值的精确解，即不考虑算法在计算中的舍入误差。

定理 1.2.2. *在定理 1.2.1 的条件下， Euler 方法是稳定的。*

证明 考虑

$$y_{m+1} = y_m + hf(x_m, y_m)$$

$$z_{m+1} = z_m + hf(x_m, z_m)$$

令 $e_m = y_m - z_m$, 则有

$$\begin{aligned}|e_{m+1}| &\le |e_m| + h|f(x_m, y_m) - f(x_m, z_m)| \\ &\le (1+hL)|e_m| \le (1+hL)^2|e_{m-1}| \\ &\le \cdots \le (1+hL)^{m+1}|e_0|\end{aligned}$$

从而，当 $a \le mh \le b$ 时，有 $|e_m| \le e^{L(b-a)}|e_0| = C|e_0|$ 。

§1.2.4 改进的 Euler 方法 (梯形公式)

对

$$y(x_{m+1}) = y(x_m) + \int_{x_m}^{x_{m+1}} f(x, y(x))dx \tag{1.2.11}$$

再用梯形公式计算右端积分

$$\begin{aligned}y(x_{m+1}) = y(x_m) \quad &+\tfrac{h}{2}[f(x_m, y(x_m)) \\ &+f(x_{m+1}, y(x_{m+1}))] + R_m^{(1)}\end{aligned} \tag{1.2.12}$$

其中

$$\begin{aligned}R_m^{(1)} = \quad &\textstyle\int_{x_m}^{x_{m+1}} f(x, y(x))\ dx \\ &-\tfrac{h}{2}[f(x_m, y(x_m)) + f(x_{m+1}, y(x_{m+1}))]\end{aligned} \tag{1.2.13}$$

容易验证 $R_m^{(1)}$ 的阶比 R_m 高，且有

$$R_m^{(1)} = -\frac{h^3}{12}y'''(x_m + \xi h), \quad 0 \le \xi \le 1 \tag{1.2.14}$$

将 (1.2.12) 中的 $R_m^{(1)}$ 舍去，有

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2}[f(x_m, y_m) + f(x_{m+1}, y_{m+1})] \tag{1.2.15}$$

梯形公式的 **显式迭代算法**:

$$y_{m+1}^{(n+1)} = y_m + \frac{h}{2}[f(x_m, y_m) + f(x_{m+1}, y_{m+1}^{(n)})] \tag{1.2.16}$$

$n = 0, 1, 2, \cdots$ 。当 h 充分小时，此迭代程序是收敛的，因为，若记

$$G(y) \equiv y_m + \frac{h}{2}[f(x_m, y_m) + f(x_{m+1}, y)]$$

则由 $f(x, y)$ 满足的 Lipschitz 条件得到

$$|G(y) - G(z)| \le \frac{h}{2}L|y - z|$$

因而当 h 充分小时有 $hL < 2$, 这就是上述迭代程序收敛的充分条件 (当初始近似选得适当时) 。

实际计算时， $y_{m+1}^{(0)}$ 可以用 Euler 方法确定，即

$$y_{m+1}^{(0)} = y_m + hf(x_m, y_m)$$

当步长 h 取得适当时，由 Euler 方法确定的 $y_{m+1}^{(0)}$ 已是较好的近似。

§1.3 Runge-Kutta 方法

§1.3.1 显式 Runge-Kutta 方法

事实上，当 $y(x_m)$ 给定时，就可以通过微分方程 (1.1.1) 把 y 的各阶导数 y', y'', $\cdots$, 在 x_m 处的值计算出来，例如,

$$\begin{aligned}
&y'(x_m) = f(x_m, y(x_m)) \\
&y''(x_m) = f'_x(x_m, y(x_m)) + f'_y(x_m, y(x_m))y'(x_m) \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots
\end{aligned}$$

因而用 $p(\geq 1)$ 阶 Taylor 多项式近似 $y(x_m+h)$, 即

$$y(x_{m+1}) \approx y_{m+1} := y_m + hy'_m + \cdots + \frac{h^p}{p!} y_m^{(p)}. \tag{1.3.1}$$

式中 $y_m^{(i)} \approx y^{(i)}(x_m)$ 。若取 $p=1$, 则 (1.3.1) 化为 Euler 方法。 Runge (1895) 首先提出。

定义 1.3.1. *设 s 是一个整数，代表使用函数值 f 的个数，$a_{2,1}$, $a_{3,1}$, $a_{3,2}$, $\cdots$, $a_{s,1}$, $\cdots$, $a_{s,s-1}$, b_1, $\cdots$, b_s, c_1, $\cdots$, c_s 是一些待定的权因子 (为实数) 。则方法*

$$y_{m+1} = y_m + h(b_1k_1 + \cdots + b_sk_s) \tag{1.3.2}$$

k_i 满足下列方程：

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(x_m, y_m) \\
k_2 &= f(x_m + c_2h, y_m + ha_{2,1}k_1) \\
k_3 &= f(x_m + c_3h, y_m + h(a_{3,1}k_1 + a_{3,2}k_2)) \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots \\
k_s &= f(x_m + c_sh, y_m + h(a_{s,1}k_1 + \cdots + a_{s,s-1}k_{s-1}))
\end{aligned} \tag{1.3.3}$$

称为 (1.1.1) 的 s 级显式 Runge–Kutta (ERK) 方法。

$$\begin{array}{c|ccccc}
0 & & & & & \\
c_2 & a_{2,1} & & & & \\
c_3 & a_{3,1} & a_{3,2} & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\
c_s & a_{s,1} & a_{s,2} & \cdots & a_{s,s-1} & \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \cdots & b_{s-1} & b_s
\end{array}$$

现以 $s=2$ 为例，将 k_1 和 k_2 在 (x_m, y_m) 展开，则有

$$\begin{aligned}
k_1 &= f_m = f(x_m, y_m) \\
k_2 &= f_m + h(c_2f'_{x_m} + a_{21}f_mf'_{y_m}) + O(h^2)
\end{aligned} \tag{1.3.4}$$

于是

$$\begin{aligned}
y_{m+1} &= y_m + h[b_1f_m + b_2f_m] + b_2h(c_2f'_{x_m} + a_{21}f_{x_m}f'_{y_m}) + O(h^3) \\
&= y_m + h(b_1+b_2)f_m + h^2[b_2c_2f'_{x_m} + b_2a_{21}f_{x_m}f'_{y_m}] + O(h^3)
\end{aligned}$$

与 $y(x_m+h)$ 在点 x_m 处的 Taylor 展式：

$$\begin{aligned} y(x_m+h) &= y(x_m)+hf(x_m,y(x_m))+\tfrac{h^2}{2!}(f'_{x_m}+f_{x_m}f'_{y_m}) \\ &\quad +\tfrac{h^3}{3!}[(f''_{x_mx_m}+2f''_{x_my_m}+f^2_{x_m}f''_{y_my_m}) \\ &\quad +f'_{y_m}(f'_{x_m}+f_{x_m}f'_{y_m})]+\cdots \end{aligned} \tag{1.3.5}$$

逐项比较，令 h 和 h^2 前的系数相等，则有

$$b_1+b_2=1,\ b_2c_2=1/2,\ b_2a_{21}=1/2$$

4 个未知数， 3 个方程，可取 c_2 为自由参数，来定其它三个参数。例如

$$\begin{aligned} c_2=1/2: &\quad b_1=0,b_2=1,a_{21}=1/2 \\ c_2=2/3: &\quad b_1=1/4,b_2=3/4,a_{21}=2/3 \\ c_2=1: &\quad b_1=1/2,b_2=1/2,a_{21}=1 \end{aligned}$$

对应的 ERK 公式 (二级二阶)

中点公式：

$$y_{m+1}=y_m+hf\Big(x_m+\frac{1}{2}h,y_m+\frac{1}{2}hf_m\Big)$$

Heun 公式

$$y_{m+1}=y_m+\frac{h}{4}\Big[f(x_m,y_m)+3f\big(x_m+\frac{2}{3}h,y_m+\frac{2}{3}hf_m\big)\Big]$$

改进的显式 Euler 公式

$$y_{m+1}=y_m+\frac{h}{2}[f(x_m,y_m)+f(x_m+h,y_m+hf_m)]$$

这是三个典型的二阶 ERK 方法。

对于 $s=3,4$ 的情形可类似地推导出高阶 ERK 公式，这里仅将几个著名的公式列举如下：

(I) 三级三阶 ERK 公式 (三个)

$$\begin{cases} y_{m+1}=y_m+\frac{h}{6}[k_1+4k_2+k_3] \\ k_1=f(x_m,y_m) \\ k_2=f(x_m+\frac{1}{2}h,,y_m+\frac{1}{2}hk_1) \\ k_3=f(x_m+h,y_m-hk_1+2hk_2) \end{cases} \tag{1.3.6}$$

$$
\begin{cases}
y_{m+1} = y_m + \frac{h}{4}[k_1 + 3k_3] \\
k_1 = f(x_m, y_m) \\
k_2 = f(x_m + \frac{1}{3}h, y_m + \frac{1}{3}hk_1) \\
k_3 = f(x_m + \frac{2}{3}h, y_m + \frac{2}{3}hk_2)
\end{cases}
\tag{1.3.7}
$$

$$
\begin{cases}
y_{m+1} = y_m + \frac{h}{9}[2k_1 + 3k_2 + 4k_3] \\
k_1 = f(x_m, y_m) \\
k_2 = f(x_m + \frac{1}{2}h, y_m + \frac{1}{2}hk_1) \\
k_3 = f(x_m + \frac{3}{4}h, y_m + \frac{3}{4}hk_2)
\end{cases}
\tag{1.3.8}
$$

(II) 四级四阶 ERK 公式 (三个)

古典 ERK 公式

$$
\begin{cases}
y_{m+1} = y_m + \frac{h}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] \\
k_1 = f(x_m, y_m) \\
k_2 = f(x_m + \frac{1}{2}h, y_m + \frac{1}{2}hk_1) \\
k_3 = f(x_m + \frac{1}{2}h, y_m + \frac{1}{2}hk_2) \\
k_4 = f(x_m + h, y_m + hk_3)
\end{cases}
\tag{1.3.9}
$$

Kutta 公式

$$
\begin{cases}
y_{m+1} = y_m + \frac{h}{8}[k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4] \\
k_1 = f(x_m, y_m) \\
k_2 = f(x_m + \frac{1}{3}h, y_m + \frac{1}{3}hk_1) \\
k_3 = f(x_m + \frac{2}{3}h, y_m - \frac{1}{3}hk_1 + hk_2) \\
k_4 = f(x_m + h, y_m + hk_1 - hk_2 + hk_3)
\end{cases}
\tag{1.3.10}
$$

Gill 公式

$$
\begin{cases}
y_{m+1} = y_m + \frac{h}{6}[k_1 + (2-\sqrt{2})k_2 + (2+\sqrt{2})k_3 + k_4] \\
k_1 = f(x_m, y_m) \\
k_2 = f(x_m + \frac{1}{2}h, y_m + \frac{1}{2}hk_1) \\
k_3 = f\left[x_m + \frac{1}{2}h, y_m + \frac{\sqrt{2}-1}{2}hk_1 + (1-\frac{\sqrt{2}}{2})hk_2\right] \\
k_4 = f\left[x_m + h, y_m - \frac{\sqrt{2}}{2}hk_2 + (1+\frac{\sqrt{2}}{2})hk_3\right]
\end{cases}
\tag{1.3.11}
$$

对 $s = 2, 3, 4$, 存在 s 阶 ERK 方法；但 $s = 5$ 只能得到四阶 ERK 方法；为得到五阶 ERK 方法， s 至少应为 6; $s = 7$ 或 8, 可给出六阶 ERK 方法；$s = p(\geq 9)$ 可给出一个 $(p-2)$ 阶 ERK 方法。

§1.3.2 单步法的稳定性和收敛性

单步法一般可写成

$$
y_{m+1} = y_m + h\varphi(x_m, y_m, h) \tag{1.3.12}
$$

其在 $x = x_m$ 处的截断误差表示为

$$
R_m = y(x_m + h) - y(x_m) - h\varphi(x_m, y(x_m), h) \tag{1.3.13}
$$

$\varphi(x_m, y_m, h)$ 称为增量函数.

定义 1.3.2. 如果 p 是使下式成立的最大整数

$$
R_m = O(h^{p+1}), \tag{1.3.14}
$$

则称单步法 *(1.3.12)* 是 p 阶的。

如果 $y(x)$ 是微分方程 (1.1.1) 解，则由 (1.3.12) 知，当 $h \to 0$ 时,

$$
\frac{y(x+h) - y(x)}{h} = \varphi(x, y, h)
$$

应逼近于微分方程 (1.1.1), 为此应要求 $\varphi(x, y, h) \to f(x, y)$. 当 $\varphi(x, y, h)$ 关于 h 连续时，相容性等价于 $\varphi(x, y, 0) = f(x, y)$ 。

定义 1.3.3. 如果单步法的增量函数 $\varphi(x_m, y_m, h)$ 满足

$$\varphi(x_m, y_m, 0) = f(x, y), \tag{1.3.15}$$

则称单步法 *(1.3.12)* 是与微分方程 *(1.1.1)* 相容的， *(1.3.15)* 称为相容性条件.

定理 1.3.1. 如果 $\varphi(x, y, h)$ 对于 $a \le x \le b$, $0 < h \le h_0$ 以及所有实数 y, 关于 y 满足 *Lipschitz* 条件，则单步方法 *(1.3.12)* 是稳定的。

定义 1.3.4. *(**收敛性的定义**)* 由增量函数 $\varphi(x_m, y_m, h)$ 所确定的单步法称为是收敛的，是

$$\lim_{h \to 0} y_m = y(x), \quad 当 x = x_m 时, \tag{1.3.16}$$

稳定性与收敛性的关系

定理 1.3.2. 如果在定理 *1.3.1* 的条件下，$\varphi(x, y, h)$ 也关于 x, h 满足 *Lipschitz* 条件，则 *(1.3.12)* 的收敛性与相容性等价。

证明 令 $\varphi(x, y, 0) = g(x, y)$ 。由条件及定理 1.1.1 知，微分方程

$$z' = g(x, z), \quad z(0) = y_0 \tag{1.3.17}$$

存在唯一 (可微) 解。下面将证明 (1.3.12) 所确定的数值解收敛于 $z(x)$, 并由此推出 $f = g$ 是收敛的充分必要条件。

利用中值定理

$$\begin{aligned} z(x_{m+1}) &= z(x_m) + hz'(x_m + \tau h) \\ &= z(x_m) + hg(x_m + \tau h, z(x_m + \tau h)) \\ &= z(x_m) + h\varphi(x_m + \tau h, z(x_m + \tau h), 0) \end{aligned}$$

记 $e_m = y_m - z(x_m)$, 由 (1.3.12) 减去上式得

$$\begin{aligned} e_{m+1} &= e_m + h[\varphi(x_m, y_m, h) - g(x_m + \tau h, z(x_m + \tau h))] \\ &= e_m + h[\varphi(x_m, y_m, h) - \varphi(x_m, z(x_m), h) \end{aligned}$$

$$+ \varphi(x_m, z(x_m), h) - \varphi(x_m, z(x_m), 0)$$
$$+ \varphi(x_m, z(x_m), 0) - \varphi(x_m, z(x_m + \tau h), 0)$$
$$+ \varphi(x_m, z(x_m + \tau h), 0) - \varphi(x_m + \tau h, z(x_m + \tau h), 0)],$$

进而有

$$|e_{m+1}| \le |e_m| + hL|e_m| + h^2 L_1 + h^2 L_0 \tag{1.3.18}$$
$$+ hL|z(x_m) - z(x_m + \tau h)| \tag{1.3.19}$$
$$\le (1 + hL)|e_m| + h^2(L_0 + L_1 + LL_2), \tag{1.3.20}$$

式中 L_0, L, L_1 分别为 $\varphi(x, y, h)$ 相应于 x, y, h 的 Lipschitz 常数,

$$L_2 = \max |z'(x)|.$$

从而有

$$|e_n| \le e^{LT}|e_0| + h\frac{L_0 + L_1 + LL_2}{L}(e^{LT} - 1), \qquad n = 1, 2, \cdots . \tag{1.3.21}$$

又由于 $e_0 = y_0 - z(0) = 0$, 因此当 $h \to 0$ 时 $|e_n| \to 0$, 即 (1.3.12) 所定义的数值解收敛于 (1.3.17) 的解。

若 $\varphi(x, y, h)$ 满足相容性条件, 即 $g = \varphi(x, y, 0) = f$, 则 (1.3.17) 与 (1.1.1) 相同，这意味着 $z(x)$ 是方程 (1.1.1) 的解。

反之，若 (1.3.12) 的解收敛于初值问题，即 $y_m \longrightarrow z(x)$.

$$f(x, y(x)) = y^{'}(x) = z^{'}(x) = g(x, z(x)) = g(x, y(x))$$

所以

$$f(x, y) = g(x, y(x))$$

即

$$f(x, y) = \varphi(x, y, 0)$$

证毕。

利用 Taylor 公式可以把 R_m 表成 h 的幂级数, 其系数是解 $y(x)$ 的微商。如果单步方法 (1.3.12) 是 p 阶的，则

$$|R_m| \le R = Ch^{p+1}. \tag{1.3.22}$$

于是仿定理 1.2.1 容易证明下面定理。

定理 1.3.3. *在定理 1.3.2 的条件下，如果局部截断误差 R_m 满足 (1.3.22), 则单步方法 (1.3.12) 的解 y_m 的整体截断误差 $\varepsilon_m = y(x) - y_m$ 满足估计式*

$$|\varepsilon_m| \leq e^{LT}|\varepsilon_0| + h^p \frac{C}{L}(e^{LT} - 1). \tag{1.3.23}$$

上述一般性结论容易直接用于 Runge-Kutta 方法。实际上，从表达式 (1.3.2) 可看出，当 f 满足 Lipschitz 条件时， φ 也满足 Lipschitz 条件，因而可以应用前述定理。

§1.4　线性多步方法

线性多步方法可写成

$$y_{m+1} = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i y_{m-i+1} + h \sum_{i=0}^{k} \beta_i y'_{m-i+1} \tag{1.4.1}$$

式中 α_j, β_j 是常数，且 $\alpha_k \neq 0$ $\alpha_0\beta_0 \neq 0$, 称为一般线性多步方法。 (1.4.1) 中为确定 y_{m+1} 的值利用了其前面 k 个值 $y_m, \cdots, y_{m-k+1}$, 故这类方法又通称为线性 k 步方法。 $k = 1$ 为单步法， $k > 1$ 为多步法。

§1.4.1　Adams 外插法

考虑方程 (1.1.1) 的积分形式

$$\begin{aligned} y(x_{m+1}) &= y(x_m) + \int_{x_m}^{x_{m+1}} y'(x)\ dx \\ &= y(x_m) + \int_{x_m}^{x_{m+1}} f(x, y(x))\ dx \end{aligned} \tag{1.4.2}$$

的数值近似。

利用这 $k+1$ 个插值基点 $(x_m, x_{m-1}, \cdots, x_{m-k})$ 构造函数 $f(x, y(x))$ 的 k 次多项式。而这样的多项式是唯一的，记其为 $L_{m,k}$, 即

$$y'(x) \equiv f(x, y) = L_{m,k}(x) + r_{m,k}(x). \tag{1.4.3}$$

将其代入 (1.4.2), 则有

$$\begin{aligned} y(x_{m+1}) = y(x_m) + \int_{x_m}^{x_{m+1}} L_{m,k}(x)\ dx \\ + \int_{x_m}^{x_{m+1}} r_{m,k}(x)\ dx, \end{aligned} \tag{1.4.4}$$

如果舍去余项，并用 y_i 代替 $y(x_i)$, 则有公式

$$y_{m+1} = y_m + \int_{x_m}^{x_{m+1}} L_{m,k}(x)\ dx \tag{1.4.5}$$

为了给出 (1.4.5) 的显式表达式， $L_{m,k}(x)$ 采用 Newton 向后插值公式 (计算 x_m 附件点 x 的函数值).($x = x_m + \tau h$, 或 $\tau = \frac{x - x_m}{h}$)

$$\begin{aligned} L_{m,k}(x) &= L_{m,k}(x_m + \tau h) \\ &= f_m + \frac{\tau}{1!}\Delta f_{m-1} + \frac{\tau(\tau+1)}{2!}\Delta^2 f_{m-2} \cdots + \frac{\Pi_{i=0}^{k-1}(\tau+i)}{k!}\Delta^k f_{m-k} \\ &= f_m + \frac{\tau}{1!}\nabla f_m + \cdots + \frac{\Pi_{i=0}^{k-1}(\tau+i)}{k!}\nabla^k f_m \end{aligned} \tag{1.4.6}$$

其中 $\Delta f_{m-1} = \nabla f_m = f_m - f_{m-1}$, $\Delta^k f_{m-k} = \nabla^k f_m$ 。如果引进二项式系数

$$\left(\begin{array}{c} s \\ j \end{array} \right) = \frac{s(s-1)\cdots(s-j+1)}{j!}, \quad \left(\begin{array}{c} s \\ 0 \end{array} \right) = 1, \tag{1.4.7}$$

则有

$$\begin{aligned} L_{m,k}(x_m + \tau h) &= \sum_{j=0}^{k} (-1)^j \left(\begin{array}{c} -\tau \\ j \end{array} \right) \Delta^j f_{m-j} \\ &= \sum_{j=0}^{k} (-1)^j \left(\begin{array}{c} -\tau \\ j \end{array} \right) \nabla^j f_m \end{aligned} \tag{1.4.8}$$

代入 (1.4.5) 有

$$y_{m+1} = y_m + h \sum_{j=0}^{k} a_j \nabla^j f_m = y_m + h \sum_{j=0}^{k} a_j \Delta^j f_{m-j} \tag{1.4.9}$$

其中系数 a_j 为

$$a_j = \int_0^1 (-1)^j \left(\begin{array}{c} -\tau \\ j \end{array} \right)\ d\tau,\ j = 0, 1, \cdots \tag{1.4.10}$$

在 (1.4.3) 或 (1.4.6) 中，由于被插值点 $x \in (x_m, x_{m+1}]$ 不包含在插值节点所决定的最大区间 $[x_{m-k}, x_m]$ 内，因此 (1.4.9) 称为外插公式 —Adams 外插公式 (有的教材也称其为 Adams 显式公式) 。

Adams 外插公式局部截断误差为

$$R_{m,k} = \int_{x_m}^{x_{m+1}} r_{m,k}(x)\ dx. \tag{1.4.11}$$

(1.4.9) 的系数 a_j 与函数 f 无关. 逐个地计算出 $a_0, a_1, a_2, \cdots$ 。在下表中给出 a_j 的部分数值：

j	0	1	2	3	4	5	$\cdots$
a_j	1	1/2	5/12	3/8	251/720	95/288	$\cdots$

由插值公式的余项

$$\begin{aligned} r_{m,k}(x) &= r_{m,k}(x_m + \tau h) \\ &= (-1)^{k+1} \begin{pmatrix} -\tau \\ k+1 \end{pmatrix} h^{k+1} y^{(k+2)}(\tilde{\xi}), \\ &\tilde{\xi} \in [x_{m-k}, x_m] \end{aligned} \tag{1.4.12}$$

代入 (1.4.11), 则有

$$\begin{aligned} R_{m,k} &= h^{k+2} \textstyle\int_0^1 (-1)^{k+1} \begin{pmatrix} -\tau \\ k+1 \end{pmatrix} y^{(k+2)}(\tilde{\xi})\ d\tau \\ &= h^{(k+2)} a_{k+1} y^{(k+2)}(\xi),\ \ \xi \in [x_{m-k}, x_m] \end{aligned} \tag{1.4.13}$$

这说明 Adams 外插公式 (1.4.9) 的局部截断误差阶为 $O(h^{k+2})$ 。$k+1$ 步 $k+1$ 阶方法。

又由于差分与函数值之间存在关系：

$$\Delta^j f_{m-j} = \nabla^j f_m = \sum_{i=0}^{j} (-1)^j \begin{pmatrix} j \\ i \end{pmatrix} f_{m-j}$$

表示成函数值的和

$$y_{m+1} = y_m + h \sum_{i=0}^{k} b_{ki} f_{m-i} \tag{1.4.14}$$

其中

$$b_{ki} = (-1)^i \sum_{j=i}^{k} a_j \begin{pmatrix} j \\ i \end{pmatrix} \tag{1.4.15}$$

利用 a_i 的递推式，可算出 b_{ki} 。在下表中给出 b_{ki} 的部分数值：

$k+1$ 步	i		0	1	2	3	4	5	$\cdots$
$k=0$	1	b_{0i}	1						$\cdots$
$k=1$	2	b_{1i}	3	-1					$\cdots$
$k=2$	12	b_{2i}	23	-16	5				$\cdots$
$k=3$	24	b_{3i}	55	-59	37	-9			$\cdots$
$k=4$	720	b_{4i}	1901	-2774	2616	-1274	251		$\cdots$
$k=5$	1440	b_{5i}	4277	-7923	9982	-7298	2877	-475	$\cdots$

(1) 表中 b_{ki} 左边的数字代表其分母，右边的数字代表其分子。

(2) b_{ki} 满足相容性条件： $\sum_{i=0}^{k} b_{ki} = 1$ 。

(3) 对 k: $k+1$ 步， $k+1$ 阶。例如

一步（单步）一阶：

$$k=0 \quad y_{m+1} = y_m + hf_m$$

二步二阶

$$k=1 \quad y_{m+1} = y_m + \frac{3}{2}hf_m - \frac{1}{2}hf_{m-1}$$

三步三阶

$$k=2 \quad y_{m+1} = y_m + \frac{23}{12}hf_m - \frac{16}{12}hf_{m-1} + \frac{5}{12}hf_{m-2}$$

四步四阶

$$k=3 \quad y_{m+1} = y_m + \frac{h}{24}[55f_m - 59f_{m-1} + 37f_{m-2} - 9f_{m-3}]$$

相应的局部截断误差（ $k=3$ ）

$$R_{m,3} = h^5 a_4 y^{(5)}(\xi) = \frac{251}{720}h^5 y^{(5)}(\xi),\ \xi \in [x_{m-3}, x_m]$$

§1.4.2 Adams 内插法

取插值节点 x_{m-k}, x_{x-k+1}, $\cdots$, x_m, $\cdots$, x_{m+p}(p是整数), 构造 $y' = f(x,y)$ 的 Lagrange 型插值多项式 $L_{m,k}^{(p)}(x)$:

$$y'(x) \equiv f(x, y(x)) = L_{m,k}^{(p)}(x) + r_{m,k}^{(p)}(x) \tag{1.4.16}$$

$r_{m,k}^{(p)}(x)$ 为插值余项。将此式代入 (1.4.2), 则有

$$y(x_{m+1}) = y(x_m) + \int_{x_m}^{x_{m+1}} L_{m,k}^{(p)}(x)\ dx + \int_{x_m}^{x_{m+1}} r_{m,k}^{(p)}(x)\ dx, \tag{1.4.17}$$

如果舍去上式中的余项

$$R_{m,k}^{(p)} = \int_{x_m}^{x_{m+1}} r_{m,k}^{(p)}(x)\ dx, \tag{1.4.18}$$

并用 y_i 代替 $y(x_i)$, 即导出内插公式

$$y_{m+1} = y_m + \int_{x_m}^{x_{m+1}} L_{m,k}^{(p)}(x)\ dx \tag{1.4.19}$$

当 $p=0$ 时上式就退化为外插公式 (1.4.5), 当 $p=1$, $k=0$ 时上式变为改进 Euler 公式 (1.2.15) 。

$p=1$ 情形的内插公式，因此对 $p=1$ 情形的推导显式表达式。所用的点为 $x_{m-k}, x_{m-k+1}, \cdots, x_m, x_{m+1}$. 令 $x = x_{m+1} + \tau h, x \in [x_m, x_{m+1}], -1 < \tau \leq 0$. 仍采用 **Newton 向后插值公式**

$$\begin{aligned} L_{m,k}^{(1)}(x) &= L_{m,k}^{(1)}(x_{m+1} + \tau h) \\ &= f_{m+1} + \frac{\tau}{1!}\Delta f_m + \frac{\tau(\tau+1)}{2!}\Delta^2 f_{m-1} \cdots + \frac{\Pi_{i=0}^{k}(\tau+i)}{(k+1)!}\Delta^{k+1} f_{m-k} \\ &= f_{m+1} + \frac{\tau}{1!}\nabla f_{m+1} + \frac{\tau(\tau+1)}{2!}\nabla^2 f_{m+1} \cdots + \frac{\Pi_{i=0}^{k}(\tau+i)}{(k+1)!}\nabla^{k+1} f_{m+1} \end{aligned} \tag{1.4.20}$$

利用二项式系数记号，则有

$$L_{m,k}^{(1)}(x_{m+1} + \tau h) = \sum_{j=0}^{k+1} (-1)^j \begin{pmatrix} -\tau \\ j \end{pmatrix} \Delta^j f_{m-j+1} \tag{1.4.21}$$

将其代入 (1.4.19) 有

$$y_{m+1} = y_m + h \sum_{j=0}^{k+1} a_j^* \nabla^j f_{m+1} = y_m + h \sum_{j=0}^{k+1} a_j^* \Delta^j f_{m-j+1} \tag{1.4.22}$$

其中系数 a_j^* 为

$$a_j^* = \int_{-1}^{0} (-1)^j \begin{pmatrix} -\tau \\ j \end{pmatrix} d\tau,\ j = 0, 1, \cdots \tag{1.4.23}$$

逐个地计算出 $a_0^*, a_1^*, a_2^*, \cdots$ 。在下表中给出 a_j^* 的部分数值：

j	0	1	2	3	4	5	$\cdots$
a_j^*	1	-1/2	-1/12	-1/24	-19/720	-3/160	$\cdots$

由插值公式的余项

$$\begin{aligned} r_{m,k}^{(1)}(x) &= r_{m,k}(x_{m+1} + \tau h) \\ &= (-1)^k \begin{pmatrix} -\tau \\ k+2 \end{pmatrix} h^{k+2} y^{(k+3)}(\tilde{\xi}), \\ &\quad \tilde{\xi} \in [x_{m-k}, x_{m+1}] \end{aligned}$$

有

$$\begin{aligned} R_{m,k}^{(1)} &= h^{k+3} \textstyle\int_{-1}^{0} (-1)^k \begin{pmatrix} -\tau \\ k+2 \end{pmatrix} y^{(k+3)}(\tilde{\xi})\ d\tau \\ &= h^{(k+3)} a_{k+2}^* y^{(k+3)}(\xi),\ \xi \in [x_{m-k}, x_{m+1}] \end{aligned}$$

这说明 Adams 内插公式的局部截断误差阶为 $O(h^{k+3})$ 。

类似地，利用差商与函数值之间的关系， (1.4.22) 还可以改写成为

$$y_{m+1} = y_m + h \sum_{i=0}^{k+1} b_{k+1,i}^* f_{m-i+1} \tag{1.4.24}$$

其中

$$b_{k+1,i}^* = (-1)^i \sum_{j=i}^{k+1} a_j^* \begin{pmatrix} j \\ i \end{pmatrix} \tag{1.4.25}$$

在下表中列出了 b_{ki}^* 的部分数值：

$k+1$ 步	i		0	1	2	3	4	5	$\cdots$
	1	b_{0i}^*	1						$\cdots$
$k=0$	2	b_{1i}^*	1	1					$\cdots$
$k=1$	12	b_{2i}^*	5	8	-1				$\cdots$
$k=2$	24	b_{3i}^*	9	19	-5	1			$\cdots$
$k=3$	720	b_{4i}^*	251	646	-264	106	-19		$\cdots$
$k=4$	1440	b_{5i}^*	475	1427	-798	482	-173	27	$\cdots$

(1) 表中 b_{ki}^* 左边的数字代表其分母，右边的数字代表其分子。

(2) b_{ki}^* 满足相容性条件： $\sum_{i=0}^{k} b_{ki}^* = 1$ 。

(3) 对 k: $k+1$ 步， $k+2$ 阶。例如

一步 (单步) 二阶

$$k=0 \quad y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2}[f_{m+1} + f_m]$$

二步三阶

$$k=1 \quad y_{m+1} = y_m + \frac{h}{12}[5f_{m+1} - 8f_m - f_{m-1}]$$

三步四阶

$$k=2 \quad y_{m+1} = y_m + \frac{h}{24}[9f_{m+1} + 19f_m - 5f_{m-1} + f_{m-2}]$$

相应的局部截断误差（ $k=2$ ）

$$R_{m,2} = h^5 a_4^* y^{(5)}(\xi) = -\frac{19}{720} h^5 y^{(5)}(\xi),\ \xi \in [x_{m-2}, x_{m+1}]$$

§1.4.3 一般插值型公式

k 步线性多步法的一般形式可写成

$$\sum_{j=0}^{k}\alpha_j y_{m+j}=h\sum_{j=0}^{k}\beta_j f_{m+j}. \tag{1.4.26}$$

其中 α_j,β_j 为实数， $\alpha_k\neq 0,\ \alpha_0\beta_0\neq 0.$ 该式表明计算 x_{m+k} 处的值用到了 $x_m,\cdots,x_{m+k-1}$ 处的值。定义算符

$$L[y(x);h]=\sum_{j=0}^{k}[\alpha_j y(x+jh)-h\beta_j y'(x+jh)] \tag{1.4.27}$$

将 $y(x+jh)$ 及 $y^{'}(x+jh)$ 作 Taylor 展开，可以整理成

$$L[y(x);h]=\sum_{i=0}^{\infty}c_i h_i y^{(i)}(x)+\cdots, \tag{1.4.28}$$

其中 $c_i(i=0,1,\cdots,p)$ 为常数，它与 α_j, β_j 之间满足关系式

$$\begin{cases} c_0=\sum\limits_{i=0}^{k}\alpha_i, \\ c_1=\sum\limits_{i=0}^{k}i\alpha_i-\sum\limits_{i=0}^{k}\beta_i \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ c_p=\frac{1}{p!}\sum\limits_{i=0}^{k}i^p\alpha_i-\frac{1}{(p-1)!}\sum\limits_{i=0}^{k}i^{p-1}\beta_i, \\ \qquad p=2,3,\cdots \end{cases} \tag{1.4.29}$$

由此看出，如果 $y(x)$ 有 $p+1$ 次连续微商，那么，只要 k 充分大，就可以选出 α_j 和 β_j, 使 $c_i(I=0,1,\cdots,p)=0$, 而 $c_{p+1}\neq 0$ 。对于如此选定的系数有

$$L[y(x);h]=c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x)+O(h^{p+2})$$

从而，当 $y(x)$ 满足 (1.1.1) 式时，由 (1.4.27) 及上式导出

$$\sum_{j=0}^{k}[\alpha_j y(x+jh)-h\beta_j f(x+jh,y(x+jh))] \\ =c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x)+O(h^{p+2}) \tag{1.4.30}$$

舍去上式右端项，即得到 (1.4.26) 。此时，称 (1.4.26) 为 **线性 p 阶 k 步方法** 。

以二步方法 ($k=2$) 为例。设 $\alpha_2=1$, 并记 $\alpha_0=\alpha$ 。其它系数 α_1, β_0,β_1, β_2 可由 $c_0=c_1=c_2=c_3=0$ 来确定。由 (1.4.29), 有

$$\begin{cases} c_0 & =\alpha+\alpha_1+1=0 \\ c_1 & =\alpha_1+2-(\beta_0+\beta_1+\beta_2)=0 \\ c_2 & =\frac{1}{2!}(\alpha_1+4)-(\beta_1+2\beta_2)=0 \\ c_3 & =\frac{1}{3!}(\alpha_1+8)-\frac{1}{2!}(\beta_1+4\beta_2)=0 \end{cases}$$

解之得

$$\begin{gathered} \alpha_1=-1-\alpha, \beta_0=-\frac{1}{12}(1+5\alpha), \\ \beta_1=\frac{2}{3}(1-\alpha), \beta_2=\frac{1}{12}(5+\alpha) \end{gathered}$$

从而一般二步方法可以写成为

$$\begin{aligned} y_{m+2}-(1+\alpha)y_{m+1}+\alpha y_m=\frac{h}{12}[(5+\alpha)f_{m+2} \\ 8(1-\alpha)f_{m+1}-(1+5\alpha)f_m] \end{aligned} \tag{1.4.31}$$

另外， (1.4.28) 中的系数 c_4 和 c_5 也可由参数 α 表示为

$$c_4=-\frac{1}{4!}(1+\alpha), \quad c_5=-\frac{1}{3\cdot 5!}(17+13\alpha) \tag{1.4.32}$$

由上可知,

(1) $\alpha=-5$ 时， (1.4.31) 是显式的;

(2) $\alpha=0$ 时， (1.4.31) 是二步 Adams 内插法;

(3) $\alpha\neq -1$ 时， (1.4.31) 是三阶二步法;

(4) $\alpha=-1$ 时， $c_4=0\neq c_5$, (1.4.31) 是四阶二步方法，即

$$y_{m+2}=y_m+\frac{h}{3}(f_{m+2}+4f_{m+1}+f_m). \tag{1.4.33}$$

它称为 Milne 方法。

§1.5 线性多步法的稳定性、收敛性

§1.5.1 线性差分方程

关系式

$$a_k(m)y_{m+k}+a_{k-1}(m)y_{m+k-1}+\cdots+a_0(m)y_m=b(m) \tag{1.5.1}$$

称为未知函数 $y(m)=y_m$ 的 k 阶线性差分方程，其中 $a_i(m), b(m)$ 是正整数变量 m 的已知 (实值) 函数，且 $a_k(m)a_0(m)\neq 0$ 。若已知给定 k 个初始值 y_0, $y_1,\cdots,y_{k-1}$, 便可由方程 (1.5.1) 逐个地求出 $y_k, y_{k+1},\cdots$ 。 $b(m)=0$ 时的方程

$$a_k(m)y_{m+k}+a_{k-1}(m)y_{m+k-1}+\cdots+a_0(m)y_m=0 \tag{1.5.2}$$

称为齐次差分方程；否则，称为非齐次差分方程。

引理 1.5.1. *如果 $y_m^{(1)}, y_m^{(2)},\cdots, y_m^{(k)}$ 是方程 (1.5.2) 的特解，则它们的任意线性组合*

$$z_m=C_1y_m^{(1)}+C_2y_m^{(2)}+\cdots+C_ky_m^{(k)} \tag{1.5.3}$$

也是方程 (1.5.2) 的解，其中 $C_i(i=1,2,\cdots,k)$ 是常数。

引理 1.5.2. *在命题 (1.5.1) 的前提下，如果 Wronski 行列式*

$$\begin{vmatrix} y_0^{(1)} & y_1^{(1)} & \cdots & y_{k-1}^{(1)} \\ y_0^{(2)} & y_1^{(2)} & \cdots & y_{k-1}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ y_0^{(k)} & y_1^{(k)} & \cdots & y_{k-1}^{(k)} \end{vmatrix} \neq 0, \tag{1.5.4}$$

即 $y_m^{(1)}, y_m^{(2)},\cdots, y_m^{(k)}$ 是线性无关的，称 $y_m^{(1)}, y_m^{(2)},\cdots, y_m^{(k)}$ 是方程 (1.5.2) 的基本解组。此时方程 (1.5.2) 的任何解都可表示为 (1.5.3) 的形式，即 (1.5.3) 是 (1.5.3) 的通解。

引理 1.5.3. *非齐次方程 (1.5.1) 的通解可以表示为它的任意一个特解与齐次方程 (1.5.2) 的通解之和。*

引理 1.5.4. *非齐次方程 (1.5.1) 的解可以通过相应齐次方程的解迭加得到。*

若方程 (1.5.1) 或 (1.5.2) 中的系数 $a_i(m)$, $b(m)$ 与 m 无关，则称此方程是线性常系数差分方程

$$a_k y_{m+k} + a_{k-1} y_{m+k-1} + \cdots + a_0 y_m = b, \tag{1.5.5}$$

$$a_k y_{m+k} + a_{k-1} y_{m+k-1} + \cdots + a_0 y_m = 0, \tag{1.5.6}$$

式中 $a_k a_0 \neq 0$ 。令

$$y_m = \lambda^m,\ \lambda \neq 0, \tag{1.5.7}$$

并将其代入 (1.5.2), 便得到关于 λ 的代数方程

$$a_k \lambda^k + a_{k-1}\lambda^{k-1} + \cdots + a_1 \lambda + a_0 = 0 \tag{1.5.8}$$

方程 (1.5.8) 称为方程 (1.5.6) 的 **特征方程**, 方程 (1.5.8) 的根称为 **特征根** 。另外，也容易验证，如果 λ 是方程 (1.5.8) 的根，则 $y_m = \lambda^m$ 必为方程 (1.5.6) 的解。

引理 1.5.5. *(i).* 如果 λ_1, λ_2, $\cdots$, λ_k 是特征方程 *(1.5.8)* 的 k 个互不相同的根，则 λ_1^m, λ_2^m, $\cdots$, λ_k^m 为齐次差分方程 *(1.5.2)* 的 k 个线性无关解。此时 *(1.5.2)* 的通解可以表示为

$$y_m = \sum_{j=1}^{k} c_j \lambda_j^m \tag{1.5.9}$$

(ii) 如果特征方程 *(1.5.8)* 有一个重根， λ_j, 其重数为 r_j, 则 λ_j^m, $m\lambda_j^m$, $\cdots$, $m^{r_j}\lambda_j^m$ 形成齐次差分方程 *(1.5.2)* 的 r_j 个线性无关解。此时 *(1.5.2)* 的通解可以表示为

$$y_m = \sum_{j=1}^{k_0} \Big(\sum_{i=1}^{r_j} c_{ji} m^{i-1} \Big) \lambda_j^m \tag{1.5.10}$$

k_0 为 *(1.5.8)* 的互异根的个数。

(iii) 如果方程 *(1.5.8)* 有一个复根， $\lambda_j = \rho e^{i\theta}$, 则 $\rho^m \cos(m\theta)$, $\rho^m \sin(m\theta)$ 是 *(1.5.2)* 的两个线性无关解。此时 *(1.5.2)* 的通解可以表示为

$$y_m = \sum_{j=1}^{k} c_{j1}(\lambda_j^m + \overline{\lambda}_j^m) + \sum_{j=1}^{k} c_{j2}(\lambda_j^m - \overline{\lambda}_j^m) \tag{1.5.11}$$

这里 $\overline{\lambda}$ 是 λ 的共轭复数。

例 1: 求下列二阶常系数差分方程

$$y_{m+1} - 2y_m + y_{m-1} = 2h^2 q y_m \tag{1.5.12}$$

的通解。其中 h, q 是实常数，且 $h > 0$ 。 (1.5.12) 是二阶微分方程 $y'' = 2qy$ 的差分近似，其特征方程是

$$\lambda^2 - 2(1 + h^2 q)\lambda + 1 = 0.$$

它的根为

$$\lambda_{1,2} = (1 + h^2 q) \pm h\sqrt{(2 + h^2 q)q}.$$

因此有：

(1) 当 $q = 0$ 时， $\lambda_1 = \lambda_2$ 。此时 (1.5.12) 的通解为

$$y_m = c_1 + c_2 m.$$

(2) 当 $q > 0$ 时， $\lambda_{1,2}$ 均为实数，且 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ 。因此 (1.5.12) 的通解可表示为

$$y_m = c_1 \lambda_1^m + c_2 \lambda_2^m.$$

(3) 当 $q < 0$ 时， $\lambda_{1,2}$ 为两个共轭复数，其模为 1, 复角 θ 由关系式

$$\cos(\theta) = 1 + h^2 q, \quad 0 \leq \theta < 2\pi$$

确定。此时 (1.5.12) 的通解可表示为

$$y_m = c_1 \cos(m\theta) + c_2 \sin(m\theta).$$

§1.5.2　线性多步的相容性、收敛性及稳定性

前面讨论的多步方法，其一般形式可以写成

$$\alpha_k y_{m+k} + \alpha_{k-1} y_{m+k-1} + \cdots + \alpha_0 y_m = h\varphi(x_m, y_{m+k}, y_{m+k-1}, \cdots, y_m, h, f), \tag{1.5.13}$$

其中 $\alpha_k \neq 0, k \geq 1$, 当 $k=1$ 时即为单步法. 定义方法 (1.5.13) 的局部截断误差

$$R(x,y,h)=\sum_{i=0}^{k}\alpha_k y(x+ih)-h\varphi(x,y(x+kh),y(x+(k-1)h),\cdots,y(x),h,f), \tag{1.5.14}$$

记

$$\begin{aligned}\rho(\xi)&=\alpha_k\xi^k+\cdots+\alpha_0=\sum_{j=0}^{k}\alpha_j\xi^j\\ \sigma(\xi)&=\beta_k\xi^k+\cdots+\beta_0=\sum_{j=0}^{k}\beta_j\xi^j\end{aligned} \tag{1.5.15}$$

它由多步方法 (**??**) 完全确定。反之，如果给定了 $\rho(\xi),\sigma(\xi)$, 则由它们唯一确定一个 k 步方法。

定义 1.5.1. *多步法 (1.5.13) 称为相容性的, 是指对每个在区域 $x\in[a,b],|y|<\infty$ 的连续函数 $f(x,y)$, 存在函数 $\tau(h)$, 且 $\lim\limits_{h\to 0}\tau(h)=0$, 以使*

$$|R(x,y,h)|\leq\tau(h)h, \tag{1.5.16}$$

对所有 $x\in[a,b],|y|<\infty$ 成立. 称方法 (1.5.13) 是 q 阶的, 若 q 是使关系式 $\tau(h)=O(h^q)$ 成立的最大整数.

相容性的判定定理.

定理 1.5.6. *k 步线性多步方法*

$$\alpha_k y_{m+k}+\cdots+\alpha_0 y_m=h(\beta_k f_{m+k}+\cdots+\beta_0 f_m), \tag{1.5.17}$$

其中 $\alpha_k\neq 0,|\alpha_0|+|\beta_0|>0$, 与初值问题 (1.1.1)–(1.1.2) 相容的充分必要条件是

$$\sum_{i=0}^{k}\alpha_i=0,\quad \sum_{i=1}^{k}i\alpha_i=\sum_{i=0}^{k}\beta_i, \tag{1.5.18}$$

式 (1.5.18) 称为 **相容性条件**. 相容性条件也可表示成 $\rho(1)=0,\rho^{'}(1)=\sigma(1)$.

定义 1.5.2. 多步法 *(1.5.13)* 是收敛的，是指关系式

$$\lim_{h\to 0} y_m = y(x), \quad x = x_m, \quad h = \frac{b-a}{m}, \tag{1.5.19}$$

对所有 $a \leq x \leq b$ 、所有满足基本假设的 f 和满足下式的初值 $y_\mu, \mu = 1, 2, \cdots, k-1$,

$$\lim_{h\to 0} y_\mu = \lim_{h\to 0} y_\mu(h) = y_(0), \tag{1.5.20}$$

定义 1.5.3. 线性多步方法 *(1.5.17)* 称为稳定的，如果对任何满足 *Lipschitz* 条件的一阶方程 (1.1.1) − (1.1.2)，存在常数 C 及 h_0，使得当 $0 < h \leq h_0$ 时，*(1.5.17)* 的任何两个解满足不等式

$$\max_{a\leq mh\leq b} |y_m - z_m| \leq CM_0, \tag{1.5.21}$$

其中

$$M_0 = \max_{0\leq j<k} |y_j - z_j|. \tag{1.5.22}$$

上述稳定性的意义是它确切地刻划了当 h 充分小时，多步方法的解将连续地依赖初始值.

k 步法需要 k 个出发值，而初值问题只提供一个

$$y_0 = y(a) = \eta = \eta_0.$$

在使用 k 步法时尚需用其它单步法补充 $k-1$ 个出发值，假定是

$$y_\mu = \eta_\mu(h), \ \mu = 1, 2, \cdots, k-1.$$

当 $h \to 0$ 时，这 $k-1$ 个出发值都应收敛于共同的极限 η, 即

$$\lim_{h\to 0} y_\mu = \lim_{h\to 0} \eta_\mu(h) = \eta \qquad \mu = 1, 2, \cdots, k-1 \tag{1.5.23}$$

在这个前提下，如果任意的 $x \in [a, b], a + nh = x$, 由 k 步公式计算的结果 y_n 随 $h \to 0$ 而趋于初值问题的解 $y(x)$, 则称 k 步法是收敛的。

为了讨论 k 步法的收敛性问题，需要用到多项式

$$\rho(\xi) = \alpha_k \xi^k + \cdots + \alpha_0, \tag{1.5.24}$$

$$\sigma(\xi) = \beta_k \xi^k + \cdots + \beta_0 \tag{1.5.25}$$

我们称 (1.5.24) 为 k 步公式 (1.5.17) 的 **特征多项式**. 显然, 相容性条件 (1.5.18 可以表示成

$$\rho(1) = 0, \quad \rho'(1) = \sigma(1) \tag{1.5.26}$$

定理 1.5.7. *k 步线性多步法 (1.5.17) 收敛的充分必要条件为： (i) 相容性条件 (1.5.26) 成立； (ii) 特征多项式 $\rho(\xi)$ 的零点的模不能大于 1, 并且在单位上的零点只能是单零点 (单重根).*

对于稳定性，有如下判定定理：

定理 1.5.8. *设 $f(x,y)$ 在区域 $a \le x \le b, -\infty < y < \infty$ 中为 x, y 的连续函数，并对 y 满足 Lipschitz 条件，则 k 步法公式 (6.10) 对所有这样的 $f(x,y)$ 为稳定的充分必要条件是 k 步公式满足特征根条件。*

根据定理 (1.5.6)—(1.5.7) 所阐述的结论，实际上在相容性、收敛性和稳定性之间，存在着以下的等价关系式

定理 1.5.9. *对于前述函数类 $f(x,y)$, 在相容性条件成立的前提下， k 步法 (1.5.17) 的收敛性和稳定性是等价的.*

推论 1.5.10. *在相容性条件成立时，稳定性和收敛性的充分必要条件都是特征根条件成立.*

Adams 外推公式为

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{24}(55f_m - 59f_{m-1} + 37f_{m-2} - 9f_{m-3}),$$

所以

$$\rho(\xi) = \xi^4 - \xi^3,\ \sigma(\xi) = \frac{1}{24}(55\xi^3 - 59\xi^2 + 37\xi - 9).$$

易知， $\rho(1) = 0, \rho'(1) = \sigma(1)$, 从而可知相容条件成立。另外，由于特征多项式 $\rho(\xi)$ 有三个零点是 0, 有一个是 1, 它在单位圆上，但为单重的，所以也满足特征根条件。所以，对于满足定理 3 条件的函数类 $f(x,y)$, 三步四阶 Adams 外推法是收敛的和稳定的。

例 用多步公式

$$-\frac{1}{2}y_{m+2} + 2y_{m+1} - \frac{3}{2}y_m = hf_m$$

来解初值问题

$$y' = y, \quad y(0) = 1.$$

相应的特征多项式为

$$\rho(\xi) = -\frac{1}{2}\xi^2 + 2\xi - \frac{3}{2},$$

它的两个零点是 1 和 3 。容易求出，解就是 $y(x) = e^x$ 。取步长 $h = 0.1$, 出发值 $y_0 = 1.0, y_1 = 1.10517$, 计算的结果及其和理论解的误差见下表：

x_n	y_n	$y_n - e^{nh}$
0.0	1.00000	0.00000
0.1	1.10517	0.00000
0.2	1.22068	-0.00072
0.3	1.34618	-0.00368
0.4	1.47854	-0.01329
0.5	1.60638	-0.04234
0.6	1.69419	-0.12993
0.7	1.63634	-0.37741
0.8	1.12395	-1.10159
0.9	-0.74049	-3.20009
1.0	-6.55860	-9.27688

从上表可以看出，误差增长很快。这个例子说明，不稳定的方法也不会收敛。

§1.5.3　绝对稳定性

上面考虑的稳定性概念，是在 $h \to 0$ 的情况下讨论的。这样的稳定性称之为渐近稳定性 (或古典的稳定性) 。然而，实际上我们是取有限的固定步长 h 进行计算的，它并不能随意地缩小，这种情况下的稳定性，就是通常所说的绝对稳定性。

在考虑方法的绝对稳定性时，一般只限于 **模型方程**

$$y' = \lambda y \tag{1.5.27}$$

步长 h 和 λ 值的限制许范围，就称为相应方法的绝对稳定区间 (域) 。

例 1 考虑 Euler 法

$$y_{m+1} = y_m + hf_m$$

绝对稳定区间 (域). 对于模型方程，它的特征多项式为 $\rho(\xi) = \xi - (1 + \lambda h)$, 特征根为

$$\xi_1 = 1 + \lambda h.$$

要想 Euler 法为绝对稳定，则应有

$$|\xi_1| = |1 + \lambda h| \leq 1.$$

故绝对稳定区间为 $|1 + \lambda h| \leq 1$, 当 λ 为复数时，它表示复平面上以实轴上点 -1 为中心的单位园内部；当 λ 为实常数时，绝对稳定区间为实轴上的线段 $-2 < \lambda h < 2$.

条件稳定：具有有限的绝对稳定区的边界.

无条件稳定：没有绝对稳定区的边界.

A- **稳定**：绝对稳定区域若为整个左半复平面

例 2 向后的 Euler 法

$$y_{m+1} = y_m + hf_{m+1}.$$

它是最简单的隐式单步法，与 Euler 法一样，它也是一阶收敛，在用于模型方程 $y' = \lambda y, (Re\lambda < 0)$ 时，得到

$$y_{m+1} = \frac{1}{1 - \lambda h} y_m.$$

它的特征根是

$$\mu = \frac{1}{1 - \lambda h}.$$

因为 $Re(\lambda) < 0$, 所以恒有 $|\mu_1| < 1$, 从而可知，向后的 Euler 法是 A- 稳定的. 如果 λ 为常数，则绝对稳定区间为 $(-\infty, 0) \cup (2, \infty)$.

例 3 梯形法

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2}(f_m + f_{m+1}).$$

在用于模型方程时，由于

$$y_{m+1}=\frac{1+\frac{1}{2}\lambda h}{1-\frac{1}{2}\lambda h}y_m,$$

所以

$$|\mu|=|\frac{1+\frac{1}{2}\lambda h}{1-\frac{1}{2}\lambda h}|.$$

当 $Re(\lambda)<0$ 时， $|\mu_1|<1$ 恒成立. 故方法的绝对稳定区域为左半复平面 $Re(\lambda)<0$, 而绝对稳定区间为 $(-\infty,0)$, 即梯形方法是 A- 稳定的.

我们称微分方程 $y'=\lambda y$, $Re(\lambda)<0$ 具有固有稳定性，因为它的通解为 $y=ce^{\lambda x}$(c 为常数). 当 $Re(\lambda)<0$ 时，对固定的 h, 随着 x 的增大是减小的，反之，如 λ 取正常数，则该解随 x 的增大而急剧增大.

k 步线性多步法的稳定性

设所考虑的模型方程仍为 $y'=\lambda y$, 则 (1.5.17) 可以表示成

$$\rho(E)y_m-\lambda h\sigma(E)y_m=0, \tag{1.5.28}$$

其中

$$\rho(\xi)=\alpha_k\xi^k+\alpha_{k-1}\xi^{k-1}+\cdots+\alpha_0, \tag{1.5.29}$$

$$\sigma(\xi)=\beta_k\xi^k+\beta_{k-1}\xi^{k-1}+\cdots+\beta_0. \tag{1.5.30}$$

E 表示移位算子，其作用为 $Ey_m=y_{m+1}$,$E^ky_m=y_{m+k}$. 由于有舍入误差，所以实际数据 $\tilde{y_m}$ 满足的方程并非 (1.5.28) 而是

$$\rho(E)\tilde{y_m}-\lambda h\sigma(E)\tilde{y_m}+\tilde{\eta_m}=0, \tag{1.5.31}$$

(1.5.28) 减去 (1.5.31), 得

$$\rho(E)[y_m-\tilde{y_m}]-\lambda h\sigma(E)[y_m-\tilde{y_m}]-\tilde{\eta_m}=0, \tag{1.5.32}$$

为便于讨论，假定 $\tilde{\eta_m} = \eta$ 为常数，它表示第 m 步 $(m = 1, 2, \cdots)$ 数值解时的局部舍入误差，令 $y_m - \tilde{y_m} = \varepsilon_m$, 于是上式又可写成

$$\rho(E)\varepsilon_m - \lambda h\sigma(E)\varepsilon_m - \eta = 0. \tag{1.5.33}$$

这就是舍入误差 ε_m 所满足的线性常系数非齐次方程，它的解由齐次方程的通解 ε_{m_h} 和非齐次方程的一个特解

$$\varepsilon_{m_p} = \frac{\eta}{(\sum\limits_{i=0}^{k}\alpha_i - \lambda h\sum\limits_{i=2}^{k}\beta_i)} \tag{1.5.34}$$

所组成. 我们要研究的是, 当 m 增大时, 在什么条件下 $\varepsilon_m = \varepsilon_{m_p} + \varepsilon_{m_p}$ 有界, 由于 ε_{m_p} 为与 m 无关的常数，所以我们只要研究齐次方程的通解就行了，为此记

$$\pi(\mu; \lambda h) = \rho(\lambda) - \lambda h\sigma(\lambda). \tag{1.5.35}$$

考虑齐次方程的特征方程为

$$\rho(\mu) - \lambda h\sigma(\mu) = 0 \tag{1.5.36}$$

的根,并研究要使方法为稳定时,这些特征根所满足的条件. 设 k 个根 $\mu_1, \cdots, \mu_k$ 互异，显然它们是 λh 的函数

$$\mu_i = \mu_i(\lambda h), \quad i = 1, \cdots, k. \tag{1.5.37}$$

于是，齐次差分方程的通解为

$$\varepsilon_{m+1} = c_1\mu_1^m + c_2\mu_2^m + \cdots + c_k\mu_k^m, \tag{1.5.38}$$

其中 $c_1, \cdots, c_k$ 可由初始值的误差 $\varepsilon_0, \cdots, \varepsilon_{k-1}$ 所确定. 因为误差方程的特征方程 (1.5.36) 与数值解 y_m 所满足的 (1.5.28) 特征方程相同，所以

$$y_m = d_1\mu_1^m + d_2\mu_2^m + \cdots + d_k\mu_k^m, \tag{1.5.39}$$

其中 $d_1, \cdots, d_k$ 由初始值 $y_0, \cdots, y_{k-1}$ 所确定.

易知在 $h \to 0$ 时, $\mu_i = \mu_i(\lambda h) \to \bar{\mu}_i$, 而 $\bar{\mu}_i$ 满足方程 $\rho(\mu) = 0$, 即 $\bar{\mu}_i$ 为 $\rho(\xi)$ 的根. Dahlquist 曾证明, 稳定性的条件为 $|\bar{\mu}_i \leq 1|$, 且在单位园上的根不能为重根, 这就是定理 (1.5.7) 中所述的稳定性, 它为渐近稳定性的定义. 下面给出多步法的绝对稳定性的定义.

定理 1.5.11. *对于给定的 λh, 如多项式 (1.5.35) 的所有根 μ_i 都满足 $|\mu_i| < 1, i = 1, \cdots, k$, 则称方法 (1.5.17) 关于 λh 是绝对稳定的; 若对实轴上的某区间 (或复平面上某区域) 内的任意 λh, 方法都是绝对稳定的, 则称此区间 (或区域) 为绝对稳定区间 (或区域).*

稳定多项式: $\pi(\mu; \lambda h)$

从该定义及 (1.5.38) 可知, 当方法绝对稳定时, 误差函数 ε_m 随着 m 的增大而减少.

例 1 研究 Mline 方法

$$y_{m+1} = y_{m-1} + \frac{h}{3}[f_{m+1} + 4f_m + f_{m-1}] \tag{1.5.40}$$

的绝对稳定性.

解 设模型方程为 $y' = \lambda y$, 代入到 (1.5.40) 中, 得

$$(1 - \frac{\lambda h}{3})y_{m+1} - \frac{4\lambda h}{3}y_m - (1 + \frac{\lambda h}{3})y_{m-1} = 0. \tag{1.5.41}$$

该式的特征方程为

$$(1 - \frac{\lambda h}{3})\mu^2 - \frac{4\lambda h}{3}\mu - (1 + \frac{\lambda h}{3}) = 0. \tag{1.5.42}$$

它是一个二次方程, 故有两个根

$$\begin{cases} \mu_1 = (1 - \frac{\lambda h}{3})^{-1}[\frac{2\lambda h}{3} + (1 + \frac{\lambda^2 h^2}{3})^{\frac{1}{2}}], \\ \mu_2 = (1 - \frac{\lambda h}{3})^{-1}[\frac{2\lambda h}{3} - (1 + \frac{\lambda^2 h^2}{3})^{\frac{1}{2}}]. \end{cases} \tag{1.5.43}$$

将 (1.5.43) 中含有平方根的项展开, 便可得

$$\mu_1 \approx e^{1+\lambda h}, \quad \mu_2 \approx e^{-1+\lambda h/3}. \tag{1.5.44}$$

不论 λ 为正数或复数, μ_1, μ_2 中总有一个模大于 1(当 h 充分小时), 所以 Miline 方法对通常的 λ 不是绝对稳定的. 在 $h \to 0$ 的渐近情况下, 特征方程 (1.5.42)

化为

$$\mu^2 - 1 = 0, \tag{1.5.45}$$

它的两个根为 $\mu_1 = +1, \mu_2 = -1$, 它是渐近稳定的.

例 2 确定二步方法

$$y_{m+2} = y_m + \frac{h}{2}(f_{m+1} + 3f_m) \tag{1.5.46}$$

的绝对稳定区间.

解 特征多项式为

$$\pi(\mu; \lambda h) = \mu^2 - \tfrac{1}{2}\lambda h \mu - (1 + \tfrac{3}{2}\lambda h),$$

根据代数方程与系数的关系定理可知，稳定多项式的两个根 $|\mu_1| < 1, |\mu_2| < 2$ 的充要条件为 $-\frac{4}{3} < \lambda h < 0$, 这就是方法的绝对稳定区间.

相对稳定性问题 误差函数的增长速度低于数值解的增长速度，而不影响数值解的精度.

§1.6 预测 – 校正算法

首先介绍一个最简单的校正算法将中点公式

$$\begin{cases} y_{m+1} = y_{m-1} + 2hf_m \\ R_m = \frac{h^3}{3} y'''(\xi_1) \quad x_{m-1} < \xi_1 < x_{m+1} \end{cases} \tag{1.6.1}$$

和梯形公式

$$\begin{cases} y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2}[f_{m+1} + f_m] \\ R_m = -\frac{h^3}{12} y'''(\xi_2) \quad x_m < \xi_1 < x_{m+1} \end{cases} \tag{1.6.2}$$

结合起来构造 **预测 – 校正算法**.

1. PECE 算法

$$\begin{cases} \bar{y}_{m+1} = y_{m-1} + 2hf_m \\ \bar{f}_{m+1} = f(x_{m+1}, \bar{y}_{m+1}) \\ y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2}(\bar{f}_{m+1} + f_m) \\ f_{m+1} = f(x_{m+1}, y_{m+1}) \end{cases} \tag{1.6.3}$$

2. $PE(CE)^N$

$$\begin{cases} y_{m+1}^{(0)} = y_{m-1} + 2hf_m \\ f_{m+1}^{(0)} = f(x_{m+1}, y_{m+1}^{(0)}) \\ y_{m+1}^{(n+1)} = y_m + \frac{h}{2}(f_{m+1}^{(n)} + f_m) \\ f_{m+1}^{(n+1)} = f(x_{m+1}, y_{m+1}^{(n+1)}) \quad n = 0, 1, 2, \cdots, N-1 \end{cases} \tag{1.6.4}$$

k 步隐式方法可以写成下列形式：

$$y_{m+k} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y_{m+j} = h\beta_k f(x_{m+k}, y_{m+k}) + h\sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{m+j}, \tag{1.6.5}$$

其中 y_{m+j}, $f_{m+j}, j = 0, 1, \cdots$, $k-1$ 是已知的。一般说来，这是关于 y_{m+k} 的非线性方程，通常用迭法求解：

$$y_{m+k}^{(n+1)} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y_{m+j} = h\beta_k f(x_{m+k}, y_{m+k}^{(n)}) + h\sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{m+j},$$

$$n = 0, 1, 2, \cdots, \tag{1.6.6}$$

$y_{m+k}^{(0)}$ 为给定的初始近似。易证，当初始近似 $y_{m+k}^{(0)}$ 选得适当好时，若 $h < \frac{1}{L|\beta_k|}$，则 (1.6.6) 收敛。这里 L 为关于 y 的 Lipschitz 常数。初始值 $y_{m+k}^{(0)}$ 用显式算法计算：

$$y_{m+k}^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j^* y_{m+j} = h\sum_{j=0}^{k-1} \beta_J^* f_{m+j}. \tag{1.6.7}$$

用 (1.6.6) 、(1.6.7) 构成的算法通称 **预测 - 校正算法**, 简称或 **PC 算法**(Predictor-Corrector method),(1.6.7) 称为 **预估算式**(P 算式),(1.6.6) 称为 **校正算式**(C 算式) 。

用预校算法进行计算时,首先利用预估算法得到 $y_{m+k}^{(0)}$,然后计算 $f(x_{m+k}, y_{m+k}^{(0)})$,接着再使用校正算式，这算完成了一步校正。然后对 $y_{m+k}^{(1)}$ 重复上述过程，如此循环下去。这种算法记为 $P(EC)^N E$ **算法**,具体计算公式为：

$$
\begin{aligned}
&P: \quad y_{m+k}^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y_{m+j}^{(N)} = h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j^* f_{m+j}^{(N)}, \\
&E: \quad f_{m+k}^{(n)} = f(x_{m+k}, y_{m+k}^{(n)}), \\
&C: \quad y_{m+k}^{(n+1)} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y_{m+j}^{(N)} = h\beta_k f_{m+k}^{(n)} + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{m+j}^{(N)}, \\
&\qquad\qquad n = 0, 1, 2, \cdots, N-1, \\
&E: \quad f_{m+k}^{(N)} = f(x_{m+k}, y_{m+k}^{(N)}).
\end{aligned} \tag{1.6.8}
$$

现在分析预校算法的截断误差。预估算法 (1.6.7) 和校正算式 (1.6.6) 的特征多项式分别为

$$
\rho^*(\lambda) = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j^* \lambda^j, \quad \alpha_k^* = 1, \quad \sigma^*(\lambda) = \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j^* \lambda^j, \tag{1.6.9}
$$

$$
\rho(\lambda) = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \lambda^j, \quad \alpha_k = 1, \quad \sigma(\lambda) = \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j \lambda^j, \tag{1.6.10}
$$

用 $\mathcal{L}^*$ 与 $\mathcal{L}$ 分别表示由它们确定的算法 (1.6.7) 及 (1.6.5), 设它们的阶分别为 p^* 与 p 。当微分方程解充分光滑时，我们有

$$
\mathcal{L}^*[y(x); h] = c_{p^*+1}^* h^{p^*+1} y^{(p^*+1)}(x) + O(h^{p^*+2}), \tag{1.6.11}
$$

$$
\mathcal{L}[y(x); h] = c_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(x) + O(h^{p+2}). \tag{1.6.12}
$$

从而预估方法的局部截断误差为

$$
y(x_{m+k}) - y_{m+k}^{[0]} = c_{p^*+1}^* h^{p^*+1} y^{(p^*+1)}(x_m) + O(h^{p^*+2}) \tag{1.6.13}
$$

校正算法一般是一个迭代过程,据定义,局部截断误差表示计算 y_{m+k} 时,所有已知值均取精确值时产生的误差，经推导，得这个误差为

$$
y(x_{m+k}) - y_{m+k}^{[N]} = c_{p+1} h^{p+1+N-1} y^{(p+1+N-1)}(x_m) + O(h^{p^*+N+1}) + O(h^{p+2+N-1}) \tag{1.6.14}
$$

由此，当 $p^* + N + 1 \geq p + N$ 即 $p^* + 1 \geq p + 1$ 时，有

$$y(x_{m+k}) - y_{m+k}^{[N]} = c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_m) + O(h^{p+2}) \tag{1.6.15}$$

一般情形有

$$y(x_{m+k}) - y_{m+k}^{[N]} = O(h^{q+1}),$$

其中

$$q = min(p, p^* + 1). \tag{1.6.16}$$

从 (1.6.15) 看出，当预估算法误差阶比校正算法误差阶低一阶或者相等时，只需迭代一次或不迭代，其最终误差将与校正算法误差同阶。

下面以 Adams 方法为例, 进一步说明预测公式和校正公式的建立。Adams 四步四阶显式公式为

$$y_{m+4} = y_{m+3} + \frac{h}{24}(55f_{m+3} - 59f_{m+2} + 37f_{m+1} - 9f_m), \tag{1.6.17}$$

其截断误差为

$$T_1 = \frac{251}{720}h^5 f^{(5)}(\xi_1), \quad x_m < \xi_1 < x_{m+4} \tag{1.6.18}$$

三步四阶隐式公式为

$$y_{m+4} = y_{m+3} + \frac{h}{24}(9f_{m+4} + 19f_{m+3} - 5f_{m+2} + f_{m+1}), \tag{1.6.19}$$

其截断误差为

$$T_2 = -\frac{19}{720}h^5 f^{(5)}(\xi_2), \quad x_{m+1} < \xi_2 < x_{m+4} \tag{1.6.20}$$

我们可以用 (1.6.17) 来计算初始近似 $y_{m+4}^{(0)}$, 这个步骤称为预测 (predictor), 用 P 表示，接着用它计算 f, 这个步骤用 E 表示，然后按隐式公式 (1.6.19) 计算 $y_{m+4}^{(1)}$, 这个步骤称为校正 (corrector), 用 C 表示，最后用 $y_{m+4}^{(1)}$ 再计算新的函

数值 $f_{m+4}^{(1)}$, 为下次迭代计算作准备. 整个格式可以表示为

$$\begin{aligned}
&P: \quad y_{m+4}^{(0)}=y_{m+3}+\tfrac{h}{24}(55f_{m+3}-59f_{m+2}+37f_{m+1}-9f_m),\\
&E: \quad f_{m+4}^{(0)}=f(x_{m+4},y_{m+4}^{(0)}),\\
&C: \quad y_{m+4}^{(1)}=y_{m+3}+\tfrac{h}{24}(9f_{m+4}+19f_{m+3}-5f_{m+2}+f_{m+1}),\\
&E: \quad f_{m+4}^{(1)}=f(x_{m+4},y_{m+4}^{(1)}).
\end{aligned} \tag{1.6.21}$$

这个公式称为 Adams 四阶预测–校正格式 ($PECE$) 模式。

上面用于预测公式和校正公式的截断误差为同阶, 它们系数不同, 因此, 便可以用预测值和校正值的组合来表示截断误差, 从而提高精度。设 p_m 和 c_m 分别是第 m 步 y_m 的预测值和校正值, 则

$$y(x_{m+4})-p_{m+4}=\frac{251}{720}h^5f^{(5)}(\xi_1), \quad x_m<\xi_1<x_{m+4}, \tag{1.6.22}$$

$$y(x_{m+4})-c_{m+4}=-\frac{19}{720}h^5f^{(5)}(\xi_2), \quad x_{m+1}<\xi_2<x_{m+4}, \tag{1.6.23}$$

(1.6.22) 减去 (1.6.23), 得

$$c_{m+4}-p_{m+4}=\frac{19}{720}h^5f^{(5)}(\xi_2)+\frac{251}{720}h^5f^{(5)}(\xi_1). \tag{1.6.24}$$

假定微分方程的解 $y(x)$ 的 5 阶导数 $y^{(5)}(x)$ 在所述区间内是连续的, 则在 x_m 与 x_{m+4} 之间必存在一数 ξ, 使

$$\begin{aligned}
\frac{19}{720}h^5f^{(5)}(\xi_2)+\frac{251}{720}h^5f^{(5)}(\xi_1)&=h^5[\frac{19}{720}f^{(5)}(\xi)+\frac{251}{720}f^{(5)}(\xi)]\\
&=\frac{270}{720}h^5f^{(5)}(\xi), \quad x_m<\xi<x_{m+4},
\end{aligned}$$

于是 (1.6.24) 式化为

$$c_{m+4}-p_{m+4}=\frac{270}{720}h^5f^{(5)}(\xi), \quad x_m<\xi<x_{m+4}, \tag{1.6.25}$$

从而得到

$$h^5f^{(5)}(\xi)=\frac{720}{270}(c_{m+4}-p_{m+4}), \quad x_m<\xi<x_{m+4}, \tag{1.6.26}$$

假定微分方程的解的 6 阶导数 $y^{(6)}(x)$ 在 (x_m, x_{m+4}) 内存在并连续，则

$$
\begin{aligned}
f^{(5)}(\xi_1) &= f^{(5)}(\xi) + O(h), \\
f^{(5)}(\xi_2) &= f^{(5)}(\xi) + O(h).
\end{aligned}
$$

于是可以把预测公式和校正公式中的截断误差 T_1 和 T_2 分别表示为

$$
T_1 = \frac{251}{720} h^5 f^{(5)}(\xi_1) = \frac{251}{270}(c_{m+4} - p_{m+4}) + O(h^6), \tag{1.6.27}
$$

$$
T_2 = -\frac{19}{720} h^5 f^{(5)}(\xi_2) = -\frac{19}{270}(c_{m+4} - p_{m+4}) + O(h^6). \tag{1.6.28}
$$

利用上面两式，又可算出 $y_{m+4}^{(0)}$ 和 $y_{m+4}^{(1)}$ 的修正值

$$
\bar{y}_{m+4}^{(0)} = y_{m+4}^{(0)} + \frac{251}{270}(c_{m+4} - p_{m+4}),
$$

$$
\bar{y}_{m+4}^{(1)} = y_{m+4}^{(0)} - \frac{19}{270}(c_{m+4} - p_{m+4}).
$$

由于在求 $\bar{y}_{m+4}^{(0)}$ 时，校正值 c_{m+4} 在其后面尚未算出，故分别用前一点的预测值和校正值代替，假定用仍上标 (0) 表示预测值，用上标 (1) 表示校正值，用 $-$ 表示经过了修正，则此可构成 $PMECME$ 模式：

$$
\begin{aligned}
&P: \quad y_{m+4}^{(0)} = \bar{y}_{m+3}^{(1)} + \tfrac{h}{24}[55\bar{f}_{m+3}^{(1)} - 59\bar{f}_{m+2}^{(1)} + 37\bar{f}_{m+1}^{(1)} - 9\bar{f}_{m}^{(1)}], \\
&M: \quad \bar{y}_{m+4}^{(0)} = y_{m+4}^{(0)} + \tfrac{251}{270}(\bar{y}_{m+3}^{(1)} - \bar{y}_{m+3}^{(0)}), \\
&E: \quad \bar{f}_{m+4}^{(0)} = f(x_{m+4}, \bar{y}_{m+4}^{(0)}), \\
&C: \quad y_{m+4}^{(1)} = \bar{y}_{m+3}^{(1)} + \tfrac{h}{24}[9\bar{f}_{m+4}^{(0)} + 19\bar{f}_{m+3}^{(1)} - 5\bar{f}_{m+2}^{(1)} + \bar{f}_{m+1}^{(1)}], \\
&M: \quad \bar{y}_{m+4}^{(1)} = y_{m+4}^{(1)} - \tfrac{19}{270}(y_{m+4}^{(1)} - \bar{y}_{m+4}^{(0)}), \\
&E: \quad \bar{f}_{m+4}^{(1)} = f(x_{m+4}, \bar{y}_{m+4}^{(1)}).
\end{aligned} \tag{1.6.29}
$$

类似地可得出 $PME(CME)^N$ 模式。

由于开始时无预测值和校正值可以利用，故令它们都为零，以后就可以按上列步骤进行计算．量 $y_{m+4}^{(1)} - y_{m+4}^{(0)}$ 还可以用来确定合适的步长．如果它的绝对值非常小，则步长 h 还可以放大；如果它的绝对值比较大，说明步长 h 取得过大，需要缩小．

§1.7 刚性方程组的解法

为了讨论在实际问题中常遇到的刚性方程组的数值解法，我们首先介绍一下一阶常微分方程组的解法.

§1.7.1 一阶常微分方程组的解法

前面介绍了一阶常微分方程的各种数值解法，这些解法对微分方程组同样适用，下面以二个未知数的方程组为例加以说明. 考虑方程组

$$\begin{aligned} &\tfrac{dy}{dx}=f(x,y,z),\quad y(x_0)=y_0,\\ &\tfrac{dz}{dx}=g(x,y,z),\quad z(x_0)=z_0. \end{aligned} \tag{1.7.1}$$

(1)$Euler$ 方法的计算公式

$$\begin{aligned} &y_{m+1}=y_m+hf(x_m,y_m,z_m),\quad y(x_0)=y_0,\\ &z_{m+1}=z_m+hg(x_m,y_m,z_m),\quad z(x_0)=z_0. \end{aligned} \tag{1.7.2}$$

(2) 向后 Euler 方法

因向后 Euler 方法是隐式格式，所以必须和显式方法联合使用，先算出初始值，再进行迭代 $(k=0,1,2,\cdots)$, 若以 k 表示迭代次数，则计算公式为

$$\begin{aligned} &y_{m+1}^{(0)}=y_m+hf(x_m,y_m,z_m),\\ &z_{m+1}^{(0)}=z_m+hg(x_m,y_m,z_m),\\ &y_{m+1}^{(k+1)}=y_m+hf(x_{m+1},y_{m+1}^{(k)},z_{m+1}^{(k)}),\\ &z_{m+1}^{(k+1)}=z_m+hg(x_{m+1},y_{m+1}^{(k)},z_{m+1}^{(k)}) \end{aligned} \tag{1.7.3}$$

(3) 改进的 Euler 公式

同样必须和显式方法联合使用,先算出初始值,再进行迭代 $(k=0,1,2,\cdots)$, 计算公式为

$$\begin{aligned} &y_{m+1}^{(0)}=y_m+hf(x_m,y_m,z_m),\\ &z_{m+1}^{(0)}=z_m+hg(x_m,y_m,z_m),\\ &y_{m+1}^{(k+1)}=y_m+\tfrac{h}{2}[f(x_m,y_m^{(k)},z_m^{(k)})+f(x_{m+1},y_{m+1}^{(k)},z_{m+1}^{(k)})],\\ &z_{m+1}^{(k+1)}=z_m+\tfrac{h}{2}[g(x_m,y_m^{(k)},z_m^{(k)})+g(x_{m+1},y_{m+1}^{(k)},z_{m+1}^{(k)})]. \end{aligned} \tag{1.7.4}$$

(4)Runge-Kutta 方法

以最常用的古典四级四阶 ERK 方法 (1.3.9) 为例，其计算公式为

$$
\begin{aligned}
&y_{m+1}=y_m+\frac{h}{6}(K_1+2K_2+2K_3+K_4),\\
&z_{m+1}=z_m+\frac{h}{6}(M_1+2M_2+2M_3+M_4),\\
&K_1=f(x_m,y_m,z_m),\quad M_1=g(x_m,y_m,z_m),\\
&K_2=f(x_m+\tfrac{h}{2},y_m+\tfrac{K_1}{2},z_m+\tfrac{M_1}{2}),\\
&M_2=g(x_m+\tfrac{h}{2},y_m+\tfrac{K_1}{2},z_m+\tfrac{M_1}{2}),\\
&K_3=f(x_m+\tfrac{h}{2},y_m+\tfrac{K_2}{2},z_m+\tfrac{M_2}{2}),\\
&M_3=g(x_m+\tfrac{h}{2},y_m+\tfrac{K_2}{2},z_m+\tfrac{M_2}{2}),\\
&K_4=f(x_m+h,y_m+K_3,z_m+M_3),\\
&M_4=g(x_m+h,y_m+K_3,z_m+M_3).
\end{aligned}
\tag{1.7.5}
$$

(5)Adams 外插公式

$$
\begin{aligned}
&y_{m+4}=y_{m+3}+\frac{h}{24}(55f_{m+3}-59f_{m+2}+37f_{m+1}-9f_m),\\
&z_{m+4}=z_{m+3}+\frac{h}{24}(55g_{m+3}-59g_{m+2}+37g_{m+1}-9g_m).
\end{aligned}
\tag{1.7.6}
$$

(6)Adams 内插公式

Adams 内插公式是隐式公式，若用 Adams 外插公式先算出初始值，再进行迭代 ($k=0,1,2,\cdots$), 则计算公式为

$$
\begin{aligned}
&y_{m+4}^{(0)}=y_{m+3}+\frac{h}{24}(55f_{m+3}-59f_{m+2}+37f_{m+1}-9f_m),\\
&z_{m+4}^{(0)}=z_{m+3}+\frac{h}{24}(55g_{m+3}-59g_{m+2}+37g_{m+1}-9g_m),\\
&y_{m+4}^{(k+1)}=y_{m+3}+\frac{h}{24}(9f_{m+3}^{(k)}+19f_{m+2}^{(k)}-5f_{m+1}^{(k)}+f_m^{(k)}),\\
&z_{m+4}^{(k+1)}=z_{m+3}+\frac{h}{24}(9g_{m+3}^{(k)}+19g_{m+2}^{(k)}-5g_{m+1}^{(k)}+g_m^{(k)}).
\end{aligned}
\tag{1.7.7}
$$

§1.7.2 刚性方程组的解法

在实际问题中，如化学反应过程、电力系统计算及模拟理论等方面的问

题，数学模型为常微分方程组的初值问题

$$\begin{cases}\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(a) = \mathbf{y}_0.\end{cases} \tag{1.7.8}$$

其中 $\mathbf{y} = [y_1, \cdots, y_n]^T$,$\mathbf{y}_0 = [y_1, \cdots, y_n]^T$ 为 n 维向量, 这种系统的物理特征, 是与它的 Jacobi 矩阵 $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}$ 的特征值 $\lambda_k = \alpha_k + i\beta_k(k = 1, 2, \cdots, m)$ 所关联的. 特征值的实部 $Re\lambda_k = \alpha_k$, 当 $\alpha_k > 0$ 时表示运动振幅的增长；反之， $\alpha_k < 0$, 则表示衰减，特征值的虚部 $Im\lambda_k = \beta_k$ 表示周期性振动的频率，而 $|Re\lambda_k|$ 是一与物理系统时间常数所关联的量，它用来说明衰减速率的．例如方程

$$y' = \lambda y,$$

有通解 $y = ce^{\lambda t}$, 如果 λ 的实部是负的，则在时间 $-\frac{1}{|Re\lambda|}$ 后， y 衰减 e^{-1} 倍, $-\frac{1}{|Re\lambda|}$ 就是时间常数． $|Re\lambda|$ 的绝对值愈大，时间常数愈小．对于线性系统, 解可以用指数函数的形式表示，对于非线性系统，经线性化后在局部范围内接也可以用指数函数的形式表示．在一个系统中，不同的项以不同的速度衰减, 也就是说可以具有不同的时间常数．如果一些分量衰减得很慢，另一些分量衰减得很快，则衰减快的部分将决定方法的稳定性．由于在很少几步以后，这些分量已经衰减到可以忽略的程度，故使方法的截断误差由变化慢的分量来确定．例如下面的系统

$$\begin{cases}y' = -y, \quad y(0) = 1, \\ z' = -100z, \quad z(0) = 1.\end{cases} \tag{1.7.9}$$

如果用 Euler 方法来求解，根据稳定性的要求，即 Euler 方法的绝对稳定区间是 $(-2 < \lambda h < 0)$, 则第一个方程要求 $0 < h < 2$, 而第二个方程则要求 $0 < 100h < 2$, 为了使两个方程都能满足稳定性的要求，只能使 $0 < h < \frac{2}{1000}$. 当然上面两个方程因为是独立的，因此，比较合理的作法是对第一个方程采用大步长，对第二个方程采用小步长，但一般说来，方程组是不能分开为相互独

立的方程的，例如，考虑系统

$$\begin{cases} y' = 998y + 1998z, \quad y(0) = 1, \\ z' = -999y - 1999z, \quad z(0) = 0. \end{cases} \tag{1.7.10}$$

该方程组的系数矩阵的特征值为

$$\lambda_1 = -1000, \quad \lambda_2 = -1.$$

它们的解为

$$\begin{cases} y = 2e^{-x} - e^{-1000x}, \\ z = -e^{-x} + e^{-1000x}. \end{cases} \tag{1.7.11}$$

y, z 均含有快变和慢变分量，对应于 λ_1 的快速衰减的分量在积分几步之后就可以被忽略，解由对应于 λ_2 的慢变分量来确定，所以这时希望积分步长由 λ_2 来选取. 例如，用 Euler 方法计算，则希望步长 h 只满足不等式 $|1+\lambda_2 h| \le 1$，但实际情况是为了保持误差传播的绝对稳定，仍然要求 $|1+\lambda_1 h| \le 1$ 都满足，这样由于 λ_1 很大而使步长取得很小，积分步数也因此增多. 事实上为了积分要稳态，总的积分时间是由 λ_2 来决定，而积分步数与 $max|Re\lambda_i|/min|Re\lambda_i|$ 成比例，如比例很大，求解步数十分巨大，可使积分时间长得无法进行.

上述困难首先是在考虑由不同刚度 (stiffness) 的跳跃所控制的物体的方程中遇到，故称具有这种现象的方程组为刚性方程组，也称为坏条件方程组，下面给出它的确切定义.

定义 1.7.1. 对一阶常系数线性方程组的初值问题

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{y}}{dx} = A\mathbf{y} + \mathbf{g}(x), \\ \mathbf{y}(x_0) = \mathbf{y}_0. \end{cases} \tag{1.7.12}$$

$\mathbf{y} = [y_1, \cdots, y_m]^T$，若系数矩阵的特征值 λ_i 满足关系

(1)$Re\lambda_i < 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m.$ (2) $\max\limits_i |Re\lambda_i| \gg \min\limits_i |Re\lambda_i|$ 则称这个方程组为刚性 *(stiff)* 方程组，比例 $\max\limits_i |Re\lambda_i| / \min\limits_i |Re\lambda_i|$ 称为刚性比.

为简单起见，假定 A 的 m 个特征值互不相同，若对应于 m 个特征值的特征向量为 $\mathbf{v}_j$, 则 (1.7.12) 的解的一般形式为

$$\mathbf{y}(x)=\sum_{j=1}^{m}Q_j\mathbf{v}_je^{\lambda_jx}+\varphi(x), \tag{1.7.13}$$

其中 Q_j 为常数， $\mathbf{y}(x)$ 为 m 维未知函数向量， λ_j 是 m 个互异特征值， $\mathbf{v}_j$ 为对应的特征向量， $\varphi(x)$ 为 (1.7.12) 的特解．我们称 (1.7.13) 右端第一项为“暂态解”，右端第二项为“稳态解”．在用数值方法求解稳态解时，必须要求计算到暂态解中衰减最慢的那一项忽略为止．因此， $\min\limits_j|Re\lambda_j|$ 越小，则积分过程越长；而 $\max\limits_j|Re\lambda_j|$ 越大，则步长 h 要求越小，这就是刚性问题计算时的矛盾．

从上面的分析看出，解这类问题选用的数值方法最好是对 h 不加限制，也就是说最好是 A- 稳定的方法．前面研究过的向后 Euler 法和梯形法，它们都是 A- 稳定的，适用于刚性方程组的求解．解刚性微分方程组还可用隐式 Runge-Kutta 方法，隐式 Runge-Kutta 方法是 A- 稳定的，下面以单个方程的形式给出常用的三种方法：

(1) 中点法

$$\begin{cases}y_{m+1}=y_m+hk,\\ k=f(x_m+\frac{h}{2},y_m+\frac{k}{2}).\end{cases} \tag{1.7.14}$$

它是二阶方法.

(2) 二级二阶方法

$$\begin{cases}y_{m+1}=y_m+\frac{h}{2}(k_1+k_2),\\ k_1=f(x_m,y_m),\\ k_2=f(x_m+h,y_m+\frac{h}{2}k_1+\frac{h}{2}k_2).\end{cases} \tag{1.7.15}$$

(3) 二级四阶方法

$$
\begin{cases}
y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2}(k_1 + k_2), \\
k_1 = f(x_m + (\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6})h, y_m + \frac{h}{4}k_1 + (\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6})hk_2), \\
k_2 = f(x_m + (\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}h, y_m + (\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6})hk_1 + \frac{1}{4}hk_2).
\end{cases}
\tag{1.7.16}
$$

Gear 放弃了对稳定性的要求，引进了刚性稳定的概念，还给出了刚性稳定的数值方法，它们的一般形式可写成

$$
\sum_{j=0}^{k} \alpha_j \mathbf{y}_{m+j} = h\beta_k \mathbf{f}_{m+k}, \tag{1.7.17}
$$

其中系数 α_j,β_k 如下表所示：

Gear方法系数表

k	β_k	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6
1	1	-1	1					
2	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{4}{3}$	1				
3	$\frac{6}{11}$	$-\frac{2}{11}$	$\frac{9}{11}$	$-\frac{8}{11}$	1			
4	$\frac{12}{25}$	$\frac{3}{25}$	$-\frac{16}{25}$	$-\frac{36}{25}$	$-\frac{48}{25}$	1		
5	$\frac{60}{137}$	$-\frac{12}{137}$	$\frac{75}{137}$	$-\frac{200}{137}$	$\frac{300}{137}$	$-\frac{300}{137}$	1	
6	$\frac{60}{147}$	$\frac{10}{147}$	$-\frac{72}{147}$	$\frac{225}{147}$	$-\frac{400}{147}$	$\frac{450}{147}$	$-\frac{360}{147}$	1

利用 (1.7.16) 计算时，每步需要求解 $\mathbf{y}_{m+k}$ 的方程组，其简单迭代法的收敛条件为

$$
\|h\beta_k \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}\| < 1 \tag{1.7.18}
$$

因为解刚性方程时 h 有时取得很大，因而上述条件未必满足．故采用牛顿迭代法． k 步的 Gear 方法是 k 阶的， $k=1$ 是就是隐式的 Euler 方法.

§1.8 常微分方程边值问题的数值解法

常微分方程的初值问题是求满足一定初始条件的常微分方程的特解. 然而，在物理及工程科学中的常微分方程也常常有给出不定点处的定解条件. 例如在讨论简支梁的挠度曲线 $y = y(x)$ 满足微分方程

$$EJ\frac{d^4y}{dx^4} = q(x), \quad a < x < l,$$

其中 $q(x)$ 是梁上荷载的集度函数， E 为弹性模量， J 为梁截面的惯性矩. 此外，简支梁在两端 $x = 0, x = l$ 的挠度和弯矩都等于零，即

$$y(0) = y'(0) = y(l) = y'(l) = 0,$$

这里确定简支梁挠度曲线的定解条件，就是在 $x = 0$ 及 $x = l$ 处两端点处的值.

由于这种定解条件给出在区间的边界 (两端点) 上，故称为 “边界条件”，并称相应的定解问题为 “边值问题”.

§1.8.1 边值问题解的存在性和唯一性

本章以二阶常微分方程为例来讨论它的两点边值问题，它可表示成如下形式

$$y''(x) = f(x, y, y'), \quad a < x < b, \tag{1.8.1}$$

其边值条件可分为下面三类：

第一类边值条件

$$y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta; \tag{1.8.2}$$

第二类边值条件

$$y'(a) = \alpha, \quad y'(b) = \beta; \tag{1.8.3}$$

第三类边值条件

$$y(a) - \alpha_0 y'(a) = \alpha, \quad y(b) + \beta_0 y'(b) = \beta. \tag{1.8.4}$$

其中 $\alpha_0 > 0, \beta_0 > 0$.

当然，两端点处的边值条件可以是不同类型的，为此，可将上述三类边界条件统一写成

$$\alpha_0 y(a) - \alpha_1 y'(a) = \alpha, \qquad \beta_0 y(b) + \beta_1 y'(b) = \beta. \tag{1.8.5}$$

其中 $\alpha_0\alpha_1 \geq 0, \beta_0\beta_1 \geq 0$.

定理 1.8.1. 对于二阶常微分方程

$$y'' = f(x, y, y')$$

设函数 f 及 $\frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial y'}$ 在区域

$$D = \{(x, y, y') | a \leq x \leq b, -\infty < y < \infty, \quad -\infty < y' < \infty\},$$

连续，且

(i) $\frac{\partial f}{\partial y} > 0, \forall (x, y, y') \in D$,

(ii) $\frac{\partial f}{\partial y'}$ 在 D 内有界，即存在常数 M, 使

$$\left|\frac{\partial f(x, y, y')}{\partial y'}\right| \leq M, \quad \forall (x, y, y') \in D,$$

则边值问题

$$y'' = f(x, y, y'). \quad a < x < b, \tag{1.8.6}$$

$$y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta. \tag{1.8.7}$$

的解存在且唯一.

当 (1.8.6) 为线性方程时，可写为

$$-y'' + p(x)y' + q(x)y = f(x). \tag{1.8.8}$$

将上式两端同乘以 $e^{-\int^x p(x)dx}$, 可得

$$-(y'e^{-\int^x p(x)dx})' + qe^{-\int^x p(x)dx}y = fe^{-\int^x p(x)dx}, \tag{1.8.9}$$

令 $t = \int^x e^{\int^x p(x)dx}dx \equiv \varphi(x)$, 则方程 (1.8.8) 可化为

$$-\frac{d^2y}{dt^2} + Q(t)y = R(t) \tag{1.8.10}$$

的形式，它不再显含 y', 容易验证，在这种变化下，边值条件的形式不变. 对于这种线性方程，其解的存在唯一定理可简单地表述为上述定理 1.8.1 的推论.

推论 1.8.2. 设函数 $p(x)$,$q(x)$,$r(x)\in C[a,b]$, 且在区间 $[a,b]$ 内 $q(x)>0$, 则线性边

$$\begin{cases} -y''+p(x)y'+q(x)y=r(x), \quad a<x<b \\ y(a)=\alpha, \quad y(b)=\beta \end{cases} \tag{1.8.11}$$

的解存在并且唯一.

求解常微分方程边值问题的数值解法，主要有 **试射法** (**打靶法**) **和差分法**. 试射法 (shooting) 可用来解二阶或高价的线性或非线性常微分方程. 这个方法的实质在于把边值问题化为初值问题来解. 此时可以采用已讨论过的各种初值问题的单步法或多步法进行求解. 下面分别就线性和非线性常微分方程加以说明.

§1.8.2　二阶常微分方程的试射法

对于一般的二阶线性常微分方程边值问题

$$\begin{cases} Ly=-y''+p(x)y'+q(x)y=r(x), \quad a<x<b, \\ \alpha_0 y(a)-\alpha_1 y'(a)=\alpha, \\ \beta_0 y(b)+\beta_1 y'(b)=\beta. \end{cases} \tag{1.8.12}$$

其中，$\alpha_0\alpha_1\geq 0$, $\beta_0\beta_1\geq 0$, $\alpha_0+\alpha_1\neq 0, \beta_0+\beta_1\neq 0$, 当 $p(x),q(x),r(x)\in[a,b]$, 且在区间 $[a,b]$ 内 $q(x)>0$ 时，该边值问题的解存在且唯一. 该问题可转化为如下两个初值问题

$$\begin{cases} Lu=r(x), \quad a\leq x\leq b, \\ u(a)=-c_1\alpha, \quad u'(a)=-c_0\alpha. \end{cases} \tag{1.8.13}$$

和

$$\begin{cases} Lv=0, \quad a\leq x\leq b, \\ v(a)=\alpha_1, \quad v'(a)=\alpha_0. \end{cases} \tag{1.8.14}$$

其中 c_0 和 c_1 是任意选取的两个常量，但应满足条件

$$c_0\alpha_1 - c_1\alpha_0 = 1. \tag{1.8.15}$$

现设式 (1.8.13) 和式 (1.8.14) 的解分别为 $u(x)$ 和 $v(x)$, 则由

$$y(x) = u(x) + \gamma v(x), \tag{1.8.16}$$

所确定的函数 $y(x)$ 必满足 (1.8.12) 的第一边界条件，为使 $y(x)$ 满足第二类边界条件，只需取 γ 为

$$\gamma = \frac{\beta - [\beta_0 u(b) + \beta_1 u'(b)]}{\beta_0 v(b) + \beta_1 v'(b)}. \tag{1.8.17}$$

二阶方程 (1.8.13) 和 (1.8.14) 可分别化为两个一阶微分方程组的初值问题，令

$$u_1 = u, \quad u_2 = u', \tag{1.8.18}$$

$$v_1 = v, \quad v_2 = v', \tag{1.8.19}$$

则式 (1.8.13) 可写成

$$\begin{cases} u_1' = u_2, \\ u_2' = p(x)u_2 + q(x)u_1 - r(x), \\ u_1(a) = -c_1\alpha, \quad u_2(a) = -c_0\alpha. \end{cases} \tag{1.8.20}$$

而式 (1.8.14) 可写成

$$\begin{cases} v_1' = v_2, \\ v_2' = p(x)v_2 + q(x)v_1, \\ v_1(a) = \alpha_1, \quad v_2(a) = \alpha_0. \end{cases} \tag{1.8.21}$$

然而, 利用前面所讲的常微分方程组初值问题的数值解法 (如 Runge-Kutta 法等) 可求出在各节点处的值 u 和 v, 再由式 (1.8.16) 得到原问题的数值解.

§1.8.3　二阶非线性常微分方程的试射法

现考虑二阶非线性方程的第一类边值问题

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y'), \quad a < x < b, \\ y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta. \end{cases} \tag{1.8.22}$$

解法的思想是设法确定 $y'(a)$ 的值 γ 使满足边值问题 $y(a) = \alpha, y'(a) = \gamma$ 的解也满足另一边值条件 $y(b) = \beta$, 也就是要从微分方程 (1.8.22) 的经过点 (a, α) 而且有不同斜率的积分曲线中，去寻找一条经过 (b, β) 的曲线. 首先我们可以根据经验，，选取一个斜率 γ_1, 用这个斜率进行试算，可解初值问题

$$y'' = f(x, y, y'), \quad y(a) = \alpha, \quad y'(a) = \gamma_1,$$

这样便得到一个解 $y_1(x)$, 如果 $y_1(b) = \beta$ 或 $|y_1(b) - \beta| < \varepsilon$ (ε 为允许误差), 则 $y_1(x)$ 即为所求的解，否则，可根据 $\beta_1 = y_1(b)$ 与 β 的差距来适当地将 γ_1 修改为 γ_2 (例如取 $\gamma_2 = \frac{\beta}{\beta_1}\gamma_1$), 这时，再解初值问题

$$y'' = f(x, y, y'), \quad y(a) = \alpha, \quad y'(a) = \gamma_2.$$

于是又可得到另一个解 $y_2(x)$, 仿前进行判断或修改. 这样通过一系列初值问题

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y'), \quad a \le x \le b, \\ y(a) = \alpha, \quad y'(a) = \gamma_k, \quad k = 1, 2, \cdots \end{cases} \tag{1.8.23}$$

来求解问题的解 $y_k(x)$, 若记问题的解 $y_k(x)$ 为 $y(x; \gamma_k)$, 则序列 $\{\gamma_k\}$ 的选取应满足

$$\lim_{k \to \infty} y(b; \gamma_k) = \beta, \tag{1.8.24}$$

参数 γ_k 的理想值 γ 应满足

$$F(\gamma) = y(b; \gamma) - \beta = 0, \tag{1.8.25}$$

这是一个代数方程 (线性或非线性的), 但由于 $F(\gamma)$ 的具体表达式往往不明确所以解这方程一般是困难的，最简单的办法是由 γ_{k-1} 及 γ_k 用线性插值法求

出新的 γ_{k+1} 值，即

$$\gamma_{k+1}=\gamma_{k-1}+\frac{\gamma_k-\gamma_{k-1}}{\beta_k-\beta_{k-1}}(\beta-\beta_{k-1}), \tag{1.8.26}$$

其中 $\beta_k=y(b;\gamma_k)$,$\beta_{k-1}=y(b;\gamma_{k-1})$, 当然，用线性插值的依据是不足的．另外可用 Newton 法解之．对于式 (1.8.25) 的 Newton 法，首先选取初始迭代值 $\gamma_k(k=1,2,\cdots)$, 然后按公式

$$\gamma_{k+1}=\gamma_k-\frac{F(\gamma_k)}{F'(\gamma_k)},\quad k=1,2,\cdots, \tag{1.8.27}$$

逐次迭代来逼近 (1.8.25) 的根 γ. 当然从 γ_k 经迭代得到 γ_{k+1}, 需要计算 $F(\gamma_k)$ 和 $F'(\gamma_k)$ 的值， $F(\gamma_k)$ 可由 $y(b;\gamma_k)-\beta=\beta_k-\beta$ 算出，它由 (1.8.23) 的解在端点 b 处的值决定， $F'(\gamma_k)$ 通过确定 $\frac{\partial y(b;\gamma)}{\partial\gamma}|_{y=\gamma_k}$ 之值即可，方法如下所述.

首先将 (1.8.23) 的解看成 x,y 的函数，从而可将 (1.8.23) 写成

$$\begin{cases}y''(x;\gamma)=f(x,y(x;\gamma),y'(x;y)),\\ y(a;\gamma)=\alpha,\quad y'(a,\gamma)=\gamma.\end{cases} \tag{1.8.28}$$

其中 y',y'' 分别是 $y(x;\gamma)$ 关于 x 的一阶和二阶导数，将上式对 γ 求偏导，并记 $W(x;\gamma)=\frac{\partial y(x;\gamma)}{\partial\gamma}$, 则上述初值问题可表示为

$$\begin{cases}W''=\frac{\partial f}{\partial y}(x,y,y')W+\frac{\partial f}{\partial y'}(x,y,y')W',\\ W(a)=0,\quad W'(a)=1.\end{cases} \tag{1.8.29}$$

因而，当 γ=γ_k 时，由 (1.8.29) 的解 $W(b;\gamma_k)$=$\frac{\partial y(b;\gamma_k)}{\partial\gamma}$ 即是 $F'(\gamma_k)$ 的值.

以上讨论了第一边值问题，对于更一般的边值问题

$$\begin{cases}y''=f(x,y,y'),\quad a<x<b,\\ \alpha_0y(a)-\alpha_1y'(a)=\alpha,\\ \beta_0y(b)+\beta_1y'(b)=\beta.\end{cases} \tag{1.8.30}$$

其中 $\alpha_0\alpha_1 \geq 0$,$\beta_0\beta_1 \geq 0$,$\alpha_0+\alpha_1>0$, $\beta_0+\beta_1>0$. 可以考虑如下初值问题

$$\begin{cases} y''=f(x,y,y'), \quad a\leq x\leq b, \\ y(a)=\alpha_1\gamma-c_1\alpha, \\ y'(a)=\alpha_0\gamma-c_0\alpha, \end{cases} \tag{1.8.31}$$

其中 c_0 和 c_1 是满足关系式

$$c_0\alpha_1-c_1\alpha_0=1$$

的任意常数. 可以验证, 对任意参数 γ, 式 (1.8.31) 的解 $y(x;\gamma)$ 必满足 (1.8.30) 中的第一边界条件，为使其满足第二边界条件， γ 应选取为方程

$$F(\gamma)=\beta_0 y(b;\gamma)+\beta_1 y'(b;\gamma)-\beta=0 \tag{1.8.32}$$

的根．在数值求解 (1.8.31) 时，可把它转化为一阶微分方程组的初值问题

$$\begin{cases} u_1'=u_2, \\ u_2'=f(x,u_1,u_2), \\ u_1(a)=\alpha_1\gamma-c_1\alpha, \quad u_2(a)=\alpha_0\gamma-c_0\gamma. \end{cases} \tag{1.8.33}$$

来求解，参数 γ 仍可用 Newton 法来求解.

§1.9 Hamilton 系统的辛几何算法

哈密顿体系是动力系统的一个重要体系，一切真实的耗散可忽略不计的物理过程都可表示成哈密顿体系. 哈密顿体系的应用范围很广，它包括结构生物学、药理学、半导体、超导、等离子体、天体力学、材料力学和偏微分方程.

哈密顿体系的共同基础是辛几何，辛几何的历史可追溯到十九世纪英国天文学家哈密顿，他为了研究牛顿力学，引进广义坐标和广义动量来表示系统的能量，现在通称为哈密顿函数，对于自由度为 n 的系统， n 个广义坐标和 n 个广义动量，张成 $2n$ 维相空间，于是，牛顿力学就成为相空间中的几何学. 用现代观点来看，这是一种辛 (sympletic) 几何学.

辛几何在数值分析中的应用是冯康于 1984 年在北京召开双微会议上提出的. 它是基于分析力学中的基本定理：系统的解是一个单参数的保测变换 (即辛变换), 从而开创了哈密顿力学计算的新方法.

哈密顿体系离不开辛几何, 而哈密顿体系的计算方法离不开辛差分格式. 经典 Rung-Kutta 方法不适应解此类问题，它不能保持长期稳定性的计算，因为它不是一个辛算法，而是一个耗散的算法. 在本节，我们在简单介绍辛几何和辛代数的基础上，主要介绍哈密顿系统的两种辛格式：中心 Euler 格式和辛 Runge-Kutta 方法.

§1.9.1 辛几何与辛代数的基本概念

首先叙述一下哈密顿力学的要素和记号. 设 H 是 $2n$ 个变量 $p_1,\cdots,p_n,q_1,\cdots,q_n$ 的可微函数，则所谓哈密顿方程是

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -H_q\\ \dot{q} &= H_p\end{aligned} \tag{1.9.1}$$

其中 $p=(p_1,\cdots,p_n), q=(q_1,\cdots,q_n)$, 令

$$z=\begin{pmatrix} p\\ q\end{pmatrix},\qquad J=\begin{bmatrix} 0 & I_n\\ -I_n & 0\end{bmatrix}. \tag{1.9.2}$$

其中 I_n 是 n 阶单位阵， J 具有性质 $J^{-1}=J^T=-J$, 则 (1.9.1) 式可写成紧

凑的形式

$$\dot{z} = J^{-1} H_z \tag{1.9.3}$$

其中

$$H_z = \begin{pmatrix} H_p \\ H_q \end{pmatrix}, \tag{1.9.4}$$

函数 H 称为系统的 **哈密顿函数**.

既然哈密顿力学是相空间上的几何学 (辛几何), 那么 **辛几何** 与通常的 **欧几里得几何** 有什么区别呢？

欧氏空间 R_n 的欧几里得结构取决于双线性对称的、非退化内积：

$$< x, y > = < x, Iy >, \quad I\text{为单位阵}$$

由于非退化，当 $x \neq 0$ 时， $< x, y >$ 恒正，从而可以定义长度 $||x|| = \sqrt{< x, x >} > 0$. 保持内积即长度不变即满足 $A^T A = I$ 的线性算子 A 组成一个正交群，它的李代数由满足 $A^T + A = AI + IA = 0$ 的条件即反对称变换组成，也就是无穷小正交变换所组成.

辛几何是相空间中的几何学, 辛空间即相空间具有特定的辛结构, 它取决于一个双线性、反对称的非退化的内积 —- 辛内积

$$[x, y] = < x, Jy >, \quad J = J_{2n} = \begin{bmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{bmatrix}$$

当 $n = 1$ 时

$$[x, y] = \begin{vmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \end{vmatrix}$$

这就是以向量 $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ 为边的平行四边形的面积，一般地辛内积是面积度量，由于内积的反对称性，对于任意向量 $\mathbf{x}$ 恒有 $[x, x] = 0$, 因此不能由辛结构导致长度的概念, 这是辛几何与欧氏几何根本的差别. 保持辛内积不变的线性变换 $A^T J A = J$ 组成一个群，称为辛群，也是一个典型的李群. 它的李代数则由无

穷小辛变换 B 即满足 $B^TJ+JB=0$ 组成. 由于奇数维中不存在非退化的反对称阵, 因此辛空间必定是偶数维的, 相空间正是如此. 下表是欧氏几何和辛几何的主要相似和不同之处.

	欧氏几何	辛几何
(1)	R^n元 $x=(x_1,\cdots,x_n)$	R^{2n}元 $x=(x_1,\cdots,x_n,x_{n+1},\cdots,x_{2n})$
(2)	内积 $(x,y)=\sum\limits_{i=1}^{n}x_iy_i$ $=x'I_ny$, 其中 $I_n=\begin{bmatrix}1 & & 0\\ & \ddots & \\ 0 & & 1\end{bmatrix}$	$[x,y]=\sum\limits_{i=1}^{n}(x_iy_{n+i}-x_{n+i}y_i)$ $=x'J_{2n}y$, 其中 $J_{2n}=\begin{bmatrix}0 & I_n\\ -I_n & 0\end{bmatrix}$
(3)	(x,y)双线性	$[x,y]$双线性
(4)	对称性$(x,y)=(y,x)$	反对称性$[x,y]=-[y,x]$
(5)	非退化$\forall y\neq 0,\exists x,$ $(x,y)\neq 0\Rightarrow detI\neq 0$ $x,y\in R^n$	非退化$\forall y\neq 0,\exists x,$ $[x,y]\neq 0\Rightarrow detJ\neq 0$ $x,y\in R^{2n}$
(6)	正定性$(x,x)=\|\|x\|\|>0$	零化 $[x,x]=0$
(7)	对称性$A^T=A$	反对称性 $K^T=-K$
	(x,x)表示长度	$[x,y]=\begin{vmatrix}x_1 & y_1\\ x_2 & y_2\end{vmatrix}$表示面积
(8)	正交基$(e_i,e_j)=\delta_{ij}$	辛基$(e_1,\cdots,e_n,f_1,\cdots,f_n)$
	例 $e_1=(1,0,\cdots,0)'$ $e_2=(0,1,\cdots,0)'$ $\cdots\cdots$ $e_n=(0,0,\cdots,1)'$	例 $e_1=(1,0,\cdots,0,0,\cdots,0)'$ $\cdots\cdots$ $e_n=(0,0,\cdots,1,0,\cdots,0)'$ $f_1=(0,0,\cdots,0,1,\cdots,0)'$ $\cdots\cdots$ $f_n=(0,0,\cdots,0,0,\cdots,1)'$

定义 1.9.1. 设 V 是定义在实域 R 上的向量空间，在 $V \times V$ 上定义一个双线性 ω 称为辛的，如果满足

(1) 非退化： $\forall x \in V, st.\omega(x, y) = 0, \forall y \in V \Rightarrow x = 0.$

(2) 斜对称： $\forall x, y \in V, \omega(x, y) = -\omega(y, x).$

我们称 (V, ω) 为 **辛空间**, ω 为 **辛映射** 或 **辛结构**.

定义 1.9.2. 一个 $R^{2n} \rightarrow R^{2n}$ 中线性变换 S 称它为辛的，如果它保持内积 $[S\xi, S\eta] = [\xi, \eta], \forall \xi, \eta \in R^{2n}.$

定理 1.9.1. 辛空间上的一个线性变换 S 是辛的充分必要条件为

$$S^T JS = J \tag{1.9.5}$$

其中 S^T 是 S 的转置.

证明是显然的，因为 $[S\xi, S\eta] = [\xi, \eta] \Rightarrow (JS\xi, S\eta) = (S^T JS\xi, \eta) = (J\xi, \eta)$, 因此 $S^T JS = J.$

定义 1.9.3. 一个 $2n$ 阶矩阵是辛的，如果

$$S^T JS = J \tag{1.9.6}$$

所有辛阵组成一个群称为辛群，用 $Sp(2n)$ 来表示.

定义 1.9.4. 一个 $2n$ 阶矩阵 B 称为无穷小辛阵，如果

$$JB + B^T J = 0 \tag{1.9.7}$$

所有无穷小辛阵对可易运算 $[A, B] = AB - BA$ 组成一个李代数，由 $sp(2n)$ 来表示，它是李群 $Sp(2n)$ 的李代数.

命题 1.9.1.

$$detS = 1, 若 \quad S \in Sp(2n).$$

命题 1.9.2.

$$S^{-1} = -JS^T J = J^{-1} S^T J, 若 \quad S \in Sp(2n).$$

命题 1.9.3.

$$SJS^T = J \quad 若 \quad S \in Sp(2n).$$

命题 1.9.4. 矩阵

$$\begin{pmatrix} I & B \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} I & 0 \\ D & I \end{pmatrix}$$

是辛的，当且仅当 $B^T = B, D^T = D$.

命题 1.9.5. $B \in Sp(2n)$, 则 $exp(B) \in Sp(2n)$.

命题 1.9.6. $B \in Sp(2n), |I + B| \neq 0$, 则

$$F = (I + B)^{-1}(I - B) \in Sp(2n)$$

称之为 B 的 $Cayler$ 变换.

§1.9.2 哈密顿系统的辛差分格式

哈密顿系统 1.9.1 称为线性哈密顿系统，如果哈密顿函数是 z 的二次形

$$H(z) = \frac{1}{2}z^T Sz, S^T = S$$

则方程 (1.9.1) 可写成

$$\frac{dz}{dt} = Bz, \quad B = J^{-1}S, S^T = S \tag{1.9.8}$$

这里 B 是无穷小辛阵，即 $B \in Sp(2n)$.

命题 1.9.7. 线性哈密顿系统的加权格式

$$\frac{z^{n+1} - z^n}{\tau} = B(\alpha z^{n+1} + (1 - \alpha)z^n) \tag{1.9.9}$$

当且仅当 $\alpha = \frac{1}{2}$ 是辛的，这时这个格式即为中心 $Euler$ 格式

$$\frac{z^{n+1} - z^n}{\tau} = B\frac{z^{n+1} + z^n}{2} \tag{1.9.10}$$

z^n 到 z^{n+1} 的变换可由下式得到

$$z^{n+1} = F_\tau z^n, \quad F_\tau = \phi(-\frac{\tau}{2}B), \phi(\lambda) = \frac{1 - \lambda}{1 + \lambda} \tag{1.9.11}$$

假设给定系统是可分的，即

$$H(p, q) = \frac{1}{2}(p^T, q^T)S\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \frac{1}{2}p^T Uq + \frac{1}{2}q^T Vq \tag{1.9.12}$$

其中

$$S = \begin{bmatrix} U & 0 \\ 0 & V \end{bmatrix}$$

$U^T = U$ 且正定， $V^T = V$ 则方程 (1.9.8) 变成

$$\begin{aligned} \tfrac{dp}{dt} &= -Vq \\ \tfrac{dq}{dt} &= Up \end{aligned} \tag{1.9.13}$$

则得到显式辛差分格式

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{\tau}(p^{n+1} - p^n) &= -Vq^{n+\frac{1}{2}} \\ \tfrac{1}{\tau}(q^{n+\frac{1}{2}+1} - q^{n+\frac{1}{2}}) &= Uq^{n+1} \end{aligned} \tag{1.9.14}$$

假设 p 在整点上计算 $(t = n\tau)$, q 在半点上计算 $(t = (n+\frac{1}{2})\tau)$, 则变换

$$w^n = \begin{bmatrix} p^n \\ q^{n+\frac{1}{2}} \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} p^{n+1} \\ q^{n+\frac{1}{2}+1} \end{bmatrix} = w^{n+1}$$

为

$$w^{n+1} = F_\tau w^n, \quad F_\tau = \begin{bmatrix} I & 0 \\ -\tau U & I \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} I & -\tau V \\ 0 & I \end{bmatrix}$$

下面我们要推广 Cayler 变换.

定理 1.9.2. *设 ψ 是复变量 λ 的函数，且满足*

(1)$\psi(\lambda)\psi(-\lambda)$ 在 $\lambda = 0$ 处能展成实系数的幂级数.

(2)$\psi'_\lambda(0) \neq 0$, $\psi(0) = 1$. 假定 $e^\lambda - \psi(\lambda) = O(|\lambda|^{n+1})$.

则

$$z^{n+1} = \psi(\tau B) z^n$$

作为方程 (1.9.1) 的近似时具有 $2m$ 阶精度，且 $\psi(\tau B)$ 是辛阵. 我们称 ψ 是无穷小辛阵 τB 的 Cayler 变换.

当 $\psi(\lambda)$ 是一个有理函数时，由定理 (1.9.2) 可得出差分近似表达式. 作为一个建立辛差分格式的具体应用，考虑下列 e^λ 的函数的对角 Pade 近似

$$e^\lambda - \frac{P(\lambda)}{P(-\lambda)} = O(|\lambda|^{2m+1})$$

其中

$$
\begin{aligned}
&P_0(\lambda) = 1,\\
&P_1(\lambda) = 2 + \lambda,\\
&P_2(\lambda) = 12 + 6\lambda + \lambda^2,\\
&P_2(\lambda) = 120 + 60\lambda + 12\lambda^2 + \lambda^3,\\
&\quad \cdots \quad \cdots \quad \cdots\\
&P_m(\lambda) = 2(2m-1)P_{m-1}(\lambda) + \lambda^2 P_{m-2}(\lambda),\\
&\quad \cdots \quad \cdots \quad \cdots
\end{aligned}
$$

定理 1.9.3. 哈密顿系统的差分格式

$$z^{n+1} = \frac{P(\tau B)}{P(-\tau B)} z^n, \quad m = 1, 2, \cdots$$

是辛的，A- 稳定的，$2m$ 阶精度，且与方程 *(1.9.1)* 有相同的双线性不变量.

当 $m = 1$ 时即是中心 Euler 格式，它具有二阶精度

$$z^{n+1} = z^n + \frac{\tau B}{2}(z^n + z^{n+1}), \quad F_\tau = \phi(\tau B)$$

$$\phi(\lambda) = \frac{1 + \frac{\lambda}{2}}{1 - \frac{\lambda}{2}}.$$

当 $m = 2$ 时，格式具有 4 阶精度

$$z^{n+1} = z^n + \frac{\tau B}{2}(z^n + z^{n+1}) + \frac{\tau^2 B^2}{12}(z^n - z^{n+1}),$$

$$F_\tau = \phi(\tau B), \quad \phi(\lambda) = \frac{1 + \frac{\lambda}{2} + \frac{\lambda^2}{12}}{1 - \frac{\lambda}{2} + \frac{\lambda^2}{12}}$$

§1.9.3 辛 Runge-Kutta 方法

方程 (1.9.1) 的单步 s 级 Runge-Kutta 方法可以表示成如下形式

$$
\begin{aligned}
&Z_{n+1} = Z_n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i f(Y_i)\\
&Y_i = Z_n + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(Y_i) \quad (1 \le i \le s)
\end{aligned}
\tag{1.9.15}
$$

这里 $\tau = t_{n+1} - t_n (n \geq 0)$,$b_i$ 称为权系数， $A = (a_{ij})(i, j = 1, 2, \cdots, s)$ 称为方法的系数矩阵，且满足条件 $c_j = \sum\limits_{j=1}^{s} a_{ij} (i = 1, 2, \cdots, s)$, 于是上式方法可由如下的系数矩阵来描述：

$$\begin{array}{c|c} \mathrm{C} & \mathrm{A} \\ \hline & B^T \end{array}$$

其中 C, B 表示列向量，上标 T 表示转置. 如果 A 是一个主对角元素为零的下三角矩阵，相应的方法称为显式的. 如果 A 是一个主对角元素为非零的下三角形矩阵则称其为半隐式的. 如果矩阵 A 为一般的 s 阶矩阵，相应的公式称为隐式的. 记

$$B := diag(b_1, b_2, \cdots, b_s) \quad M := BA + A^T B - bb^T$$

定理 1.9.4. *如果 $M = 0$, 则格式 (1.9.15) 是辛的.*

1　中点 Euler 公式

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array}$$

$$\begin{aligned} Z_{n+1} &= Z_n + \tau f(Y) \\ Y &= Z_n + \tfrac{\tau}{2} f(Y) \end{aligned} \tag{1.9.16}$$

把上式代入下式得 $Y = \frac{Z_{n+1} + Z_n}{2}$, 再代入下式得

$$Z_{n+1} = Z_n + \tau f(\frac{Z_{n+1} + Z_n}{2}).$$

2　4 阶 2 级隐格式

$$\begin{array}{c|cc} \frac{1}{2} - \frac{1}{6}\sqrt{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{1}{6}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{6}\sqrt{3} & \frac{1}{4} + \frac{1}{6}\sqrt{3} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

$$\begin{aligned} Z_{n+1} &= Z_n + \tfrac{\tau}{2}(f(Y_1) + f(Y_2)) \\ Y_1 &= Z_n + \tau(\tfrac{1}{4} f(Y_1) + (\tfrac{1}{4} - \tfrac{1}{6}\sqrt{3}) f(Y_2)) \\ Y_2 &= Z_n + \tau((\tfrac{1}{4} + \tfrac{1}{6}\sqrt{3}) f(Y_1) + \tfrac{1}{4} f(Y_2)) \end{aligned} \tag{1.9.17}$$

3 二级二阶半隐格式

$$
\begin{array}{c|cc}
\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\
\frac{3}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\
\hline
 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
\end{array}
$$

$$
\begin{aligned}
&Z_{n+1} = Z_n + \tfrac{\tau}{2}(f(Y_1) + f(Y_2)) \\
&Y_1 = Z_0 + \tfrac{\tau}{2} f(Y_1) \\
&Y_2 = Z_0 + \tfrac{\tau}{2} f(Y_1) + \tfrac{\tau}{4} f(Y_2)
\end{aligned}
\tag{1.9.18}
$$

这个格式相当于连用二次中点公式，等价地表示为

$$
\begin{aligned}
&Z_{\frac{1}{2}} = Z_0 + \tfrac{\tau}{2} f(\tfrac{Z_{\frac{1}{2}} + Z_0}{2}) \\
&Z_1 = Z_{\frac{1}{2}} + \tfrac{\tau}{2} f(\tfrac{Z_{\frac{1}{2}} + Z_1}{2}) \\
&Z_1 = Z_0 + \tfrac{\tau}{2} f(\tfrac{Z_{\frac{1}{2}} + Z_0}{2}) + \tfrac{\tau}{2} f(\tfrac{Z_{\frac{1}{2}} + Z_1}{2})
\end{aligned}
\tag{1.9.19}
$$

从计算角度来讲它并没有带来什么好处, 因为它是二阶的, 但连续三次适当选取系数可得三阶, 连续用四次可达到四阶精度, 用多步隐式格式语言来说它为

$$
\begin{array}{c|ccc}
\frac{1}{2}\,\mathrm{a} & \frac{1}{2}\,\mathrm{a} & & \\
\frac{3}{2}\,\mathrm{a} & \mathrm{a} & \frac{1}{2}a & \\
\frac{1}{2}+a & \mathrm{a} & \mathrm{a} & \frac{1}{2}-a \\
\hline
 & \mathrm{a} & \mathrm{a} & 1-2a
\end{array}
$$

$$
\begin{aligned}
&Z_1 = Z_0 + \tau b_1 f(Y_1) + \tau b_2 f(Y_2) + \tau b_3 f(Y_3) \\
&Y_1 = Z_0 + \tau \tfrac{b_1}{2} f(Y_1) \\
&Y_2 = Z_0 + \tau b_1 f(Y_1) + \tfrac{\tau b_2}{2} f(Y_2) \\
&Y_3 = Z_0 + \tau b_1 f(Y_1) + \tau b_2 f(Y_2) + \tfrac{\tau b_3}{2} f(Y_3)
\end{aligned}
\tag{1.9.20}
$$

为了达到三阶精度，则 $b_1 = b_2 = a, b_3 = 1 - 2a$,$a$ 必须满足 3 次代数方程

$$6a^3 - 12a^2 + 6a - 1 = 0$$

其中仅有一个根为 $a \approx 1.351207$. 若 $b_1 = b_3 = a, b_2 = 1 - 2a$, 由于格式对称性可达到四阶精度.

4 四阶半隐格式

$$
\begin{array}{c|cccc}
\frac{b_1}{2} & \frac{b_1}{2} & & & \\
b_1+\frac{b_2}{2} & b_1 & \frac{b_2}{2} & & \\
b_1+b_2+\frac{b_3}{2} & b_1 & b_2 & \frac{b_3}{2} & \\
b_1+b_2+b_3+\frac{b_4}{2} & b_1 & b_2 & b_3 & \frac{b_4}{2} \\
\hline
 & b_1 & b_2 & b_3 & b_4
\end{array}
$$

为了找出 b_1, b_2, b_3, b_4, 必须用计算机来求解，我们得到一组解

$$
\begin{aligned}
&b_1 = -0.70309412, \quad b_2 = -0.53652708 \\
&b_3 = 2.37893931, \qquad b_4 = 1.8606818856
\end{aligned}
$$

这个格式告诉我们，若连续四次重复应用 Euler 中点格式，分别取不同步长 $b_1\tau$,$b_2\tau$,$b_3\tau$,$b_4\tau$ 就可以达到四阶精度.

对可分系统即 $H(p,q) = U(p) + V(q)$, 可以构造一类显格式，它很象 Runge-Kutta 方法，我们提出下列格式

$$
\begin{aligned}
p_1 &= p^k + hc_1 f(q^k) & q_1 &= q^k + hd_1 g(p_1) \\
p_2 &= p_1 + hc_2 f(q_1) & q_2 &= q_1 + hd_2 g(p_2) \\
p_3 &= p_2 + hc_3 f(q_2) & q_3 &= q_2 + hd_3 g(p_3) \\
p^{k+1} &= p_3 + hc_4 f(q_3) & q^{k+1} &= q_3 + hd_4 g(p^{k+1})
\end{aligned}
\tag{1.9.21}
$$

其中 $f(q) = -\frac{\partial H}{\partial q}, g(p) = \frac{\partial H}{\partial p}$.

我们构造一个具有四阶精度且保持系统形如 $p^T Bp$ 二次守恒律的辛格式，其中

$$
\begin{aligned}
&c_1 = 0, c_2 = c_4 = \tfrac{1}{3}(2+\alpha), c_3 = -\tfrac{1}{3}(1+2\alpha); \\
&d_1 = d_4 = \tfrac{1}{6}(2+\alpha), d_2 = d_3 = \tfrac{1}{6}(1-\alpha)
\end{aligned}
$$

而 $\alpha = \sqrt[3]{2} + \sqrt[3]{\frac{1}{2}}$.

哈密顿系统的一个问题就是稳定性问题，这类问题在几何上的特点是：它的解在相空间上是保测的，其特征方程的根是纯虚数，所以不能用庞加莱里亚普诺夫渐近稳定性理论，而必须用 KAM(Kolmogorov, Arnold, Moser) 定理来加以研究，它是一种关于整体稳定性的论断.

任何一个格式不论是显式或隐式的，它都能看成从上一时刻到下一时刻的映射，如果这个映射是辛的，我们就说差分格式是辛格式. 辛格式往往是隐

式的，只有对于可分的哈密顿系统，利用显式隐式交替可得到的实质上是显式的辛差分格式，这是精度仅为一阶，把此格式对称化便得到二阶精度对称格式 (或称可逆格式)．由上面介绍可知，在多级 Runge-Kutta 格式序列里也存在着辛的多级 Runge-Kutta 辛格式．另外，冯康从分析力学出发，利用生成函数理论构造了种类繁多的任意阶精度的辛算法．在发展算法同时系统地发展了构造性生成函数理论与哈密顿 — 雅可比方程．即在线性达布变换框架下，构造了所有类型的生成函数与相应哈密顿 — 雅可比方程．

关于数值算法，一般有两类，即单步法 (Runge-Kutta 方法为代表) 和多步法，但是这些传统的数值方法有一个共同点，即有人为的能量耗散，使得相应哈密顿系统的总能量随时间呈线性变换 (即计算中能量误差有线性积累)，这将歪曲哈密顿系统的整体特征，从而导致对相应系统长期演化性态的研究失败．冯康等人从 80 年代以来建立的哈密顿算法 (即辛算法) 不仅是一种新的数值方法，而且从理论上清楚地阐明了传统数值方法导致能量耗散的根本原因，即相应的差分格式是非辛的，其截断是耗散项，辛算法对应的差分格式严格保持哈密顿系统的辛结构，这是哈密顿系统的一个极好的整体结构，有限阶辛算法的截断部分不会导致系统能量发生线性变化，而仅对应周期变化．其后果正是人们期望的，特别对动力天文中的定性研究问题，由于辛能保持系统的辛结构，将不会歪曲哈密顿系统的整体特征，使得长期演化性态能较真实地反映天文现象，而能量又是系统运动的一个重要参数，它的“保持”将使得相应的数值结果更具实际意义，不致于出现一些非系统本身所具有的“计算机现象”．