偏微分方程数值解法

任课教师：黄忠亿

清华大学数学科学系

参考书目

1. 《偏微分方程数值解法》，陆金甫、关治编著，清华大学出版社

目录

常微方程差分方法基本理论

许多常见、重要的物理、化学、生物等过程都可以用常微方程(组)初值问题来描述. 另外偏微方程的许多初边值问题经过半离散化(method of lines)以后也可以化为常微方程组来描述. 因此, 系统回顾一下常微方程(组)的差分方法很有必要.

考虑一阶常微方程(组)初值问题:

$$\begin{cases} \dfrac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad t \in (0, T], \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0. \end{cases} \tag{1.1}$$

这里 $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}, \mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_m \end{pmatrix}, \mathbf{y}_0 = \begin{pmatrix} y_{0,1} \\ \vdots \\ y_{0,m} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m.$

常微分方程差分方法基本理论

首先我们来看该问题 (1.1) 的适定性.

定义 1.1 (适定性)

如果初值问题 (1.1) 满足

1. 存在唯一解;
2. 对于任给的 $\varepsilon > 0$, 存在正数 δ^*, 使得当 $|\vec{\varepsilon}_0| < \delta^*$ 时, 在 $[0, T]$ 上有 $\vec{\delta}(x)$ 连续, 且 $\left\|\vec{\delta}\right\| < \delta^*$ 时, 初值问题
$$\begin{cases} \mathbf{z}_t = \mathbf{f}(t, \mathbf{z}) + \vec{\delta}, & t \in (0, T], \\ \mathbf{z}(0) = \mathbf{z}_0 + \vec{\varepsilon}_0 . \end{cases}$$
存在唯一解 $\mathbf{z}$, 且 $\forall t \in [0, T]$ 有 $\|\mathbf{z} - \mathbf{y}\| < \varepsilon$.

那么就称初值问题 (1.1) 是适定的.

常微方程差分方法基本理论

为了保证上述问题 (1.1) 的适定性 (即解的存在唯一性及对初值和源项的连续依赖性), 通常假设 $\mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ 关于 $\mathbf{y}$ 满足 Lipschitz 连续条件, 即 $\exists L > 0$, $\forall t \in [0, T]$, $\forall \mathbf{x}, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$, 有

$$\|\mathbf{f}(t, \mathbf{x}) - \mathbf{f}(t, \mathbf{z})\| \leq L \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\| .$$

这里 $\|\cdot\|$ 为 $\mathbb{R}^m$ 中的某种范数.

由于仅有极少数情形可以写出问题 (1.1) 的解的简单解析表达式, 我们这里仅考虑离散化求解方法.

为简单起见，假设对区间 $[0, T]$ 采用等距剖分:

$$\text{取自然数}N, \ \text{令步长}h = \frac{T}{N}, \quad t_n = nh, \quad n = 0, 1, \cdots, N.$$

下面看如何用数值方法计算出 $y(t_n)$ 的近似值 y_n.

差分格式的一般形式

为简单起见, 以下取 $m=1$. 可以很容易推广到 $m>1$ 情形.

一般来说，如果知道了 $y_0, y_1, \cdots, y_{k-1}$ 的值, 可用以下算法来求 y_k:

$$
\begin{cases}
\displaystyle\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n+j} = h\phi_f(t_n; y_n, y_{n+1}, \cdots, y_{n+k}; h), \\
y_j = S_j(h), \quad j = 0, 1, \cdots, k-1.
\end{cases} \tag{1.2}
$$

这里假设 $\alpha_k \neq 0$.

$k=1$ 称为单步法. $k>1$ 称为多步法.

ϕ_f 取不同形式的函数，可得到不同的方法。

Runge-Kutta 方法——数值积分

下面主要从数值积分的角度推导一下 Runge-Kutta 方法:

将 (1.1) 中的方程改写成积分形式

$$y(t) = y(t_0) + \int_{t_0}^{t} f\big(s, y(s)\big) ds. \tag{1.3}$$

这样如果我们知道了 y_n, 可以如下计算 y_{n+1}:

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f\big(s, y(s)\big) ds.$$

问题是如何计算上面的定积分. 要想获得高精度近似解, 一般在 $[t_n, t_{n+1}]$ 上引入几个新节点: $t_n \le s_1 \le s_2 \le \cdots \le s_m \le t_{n+1}$.

可以记 $s_j = t_n + a_j h$.

Runge-Kutta 方法——数值积分

如果知道了 f 在 $(s_j, y(s_j))$ 上的值 K_j, 可以用公式

$$y_{n+1} = y_n + h\sum_{j=1}^{m} c_j K_j$$

来计算 y_{n+1}, 其中

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f\big(s, y(s)\big)ds \approx h\sum_{j=1}^{m} c_j K_j = h\sum_{j=1}^{m} c_j f\big(s_j, y(s_j)\big)$$

为数值积分公式. 即用 f 在 $s_j(j=1,\cdots,m)$ 上的值构造 $m-1$ 次插值多项式, 然后代替 f 计算积分便求得上面定积分的近似.

如何计算 $y(s_j) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_n+a_jh} f\big(s, y(s)\big)ds$ 又有多个选择:

如果使用显式格式计算，即用 f 在 $s_1,\cdots,s_{j-1}$ 上的值做插值来计算上述积分: $y(s_j) \approx y_n + h\sum_{l=1}^{j-1} b_{jl} f\big(s_l, y(s_l)\big)$.

Runge-Kutta 方法——数值积分

代入 K_j 的表达式即得: $K_j = f(t_n + a_j h, y_n + h\sum_{l=1}^{j-1} b_{jl}K_l)$, $j = 1, 2, \cdots, m$.

由显式计算的要求, 有 $a_1 = 0$, 即 $s_1 = t_n$, $K_1 = f(t_n, y_n)$.

最终得到显式 Runge-Kutta 格式为

$$
(1.4)\quad \begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\sum_{j=1}^{m} c_j K_j, \\ K_j = f\left(t_n + a_j h, y_n + h\sum_{l=1}^{j-1} b_{jl}K_l\right), \quad j = 1, \cdots, m. \end{cases}
$$

这相当于在(1.2) 中取 $\phi_f = \sum_{j=1}^{m} c_j K_j$.

Runge-Kutta 方法——待定系数法

我们也可以基于待定系数法和Taylor 展开来推导 R-K 格式.

我们假设 R-K 格式有 (1.4) 形式. 下面问题是如何确定系数 $\{a_j, b_{jl}, c_j\}$

由 Taylor 展开 (假设 $0 < h \ll 1$):

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hy'(t_n) + \cdots + \frac{h^p}{p!} y^{(p)}(t_n) + \mathcal{O}(h^{p+1}).$$

若令 $\phi(t, y(t); h) = \sum_{j=1}^{p} \frac{h^{j-1}}{j!} \frac{d^{j-1} f(t, y(t))}{dt^{j-1}}$, 则有

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h\phi(t_n, y(t_n); h) + \mathcal{O}(h^{p+1}).$$

舍去高阶项便得到计算公式

$$y_{n+1} = y_n + h\phi(t_n, y_n; h). \tag{1.5}$$

Runge-Kutta 方法——待定系数法

当然，上面 (1.5) 一般不使用，原因是其中包含 f 的高阶偏导数, 这些表达式不易计算.

但是我们可以通过比较 (1.4) 与 (1.5) 来确定系数 $\{a_j, b_{jl}, c_j\}$.

我们将 (1.4) 中的 K_j 也在 (t_n, y_n) 处做 Taylor 展开, 也能得到如下形式

$$y_{n+1} = y_n + h\widetilde{\phi}(t_n, y_n; h).$$

其中 $\widetilde{\phi}(t_n, y_n; h)$ 也按照 h 的升幂次序排列，其中的系数自然包含了 $\{a_j, b_{jl}, c_j\}$. 将之与 (1.5) 中的 ϕ 关于 h 的相应幂次项的系数做比较, 令其相同便可求出 $\{a_j, b_{jl}, c_j\}$.

Runge-Kutta 方法——待定系数法

例 1.1

$m=1$ 即为最简单的 *Euler* 法: $y_{n+1}=y_n+hf(t_n,y_n)$.

$m=2$ 时, 比较系数有 $c_1+c_2=1$, $a_2c_2=\frac{1}{2}$.

这自然有无穷多组解. 常用的有以下两种 $(f_n\equiv f(t_n,y_n))$:

1. 显式中点格式: $c_1=0, c_2=1, a_2=\frac{1}{2}$, 即 $y_{n+1}=y_n+hf(t_n+\frac{h}{2},y_n+\frac{h}{2}f_n)$.
2. 改进 *Euler* 法: $c_1=c_2=\frac{1}{2}, a_2=1$, 即 $y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f_n+f(t_n+h,y_n+hf_n)]$.

$m=4$ 时, 首先由显式要求及相容性有

$a_1=0$, $a_2=b_{21}$, $a_3=b_{31}+b_{32}$, $a_4=b_{41}+b_{42}+b_{43}$.

Runge-Kutta 方法——待定系数法

再比较 ϕ 与 $\widetilde{\phi}$ 的系数 (利用了前面的公式) 有

$$\sum_{j=1}^{4} c_j a_j^{l-1} = \frac{1}{l}, l = 1, 2, 3, 4; \quad c_3 a_2 b_{32} + c_4 (b_{42} a_2 + b_{43} a_3) = \frac{1}{6},$$

$$c_3 b_{32} a_2^2 + c_4 b_{43} a_3^2 = \frac{1}{12}, \quad c_4 b_{43} a_2 b_{32} = \frac{1}{24},$$

$$c_3 a_3 a_2 b_{32} + c_4 a_4 (b_{42} a_2 + b_{43} a_3) = \frac{1}{8}.$$

这显然也有无穷多组解. 取一组特殊值

$$\mathbf{a} = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1\right), \quad \mathbf{c} = \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}\right),$$

$$b_{21} = \frac{1}{2}, \ b_{31} = 0, \ b_{32} = \frac{1}{2}, \ b_{41} = 0 = b_{42}, \ b_{43} = 1.$$

此即经典 4 级 Runge-Kutta 方法.

隐式 Runge-Kutta 方法

当然我们也可以采用隐式的 Runge-Kutta 方法, 即用 f 在所有 s_l 上的值做插值来计算 $y(s_j) = y(t_n) + \int_{t_n}^{s_j} f\big(t, u(t)\big)dt$ 中积分:

$$y(s_j) = y(t_n + a_j h) \approx y_n + h\sum_{l=1}^{m} b_{jl} f\big(s_l, y(s_l)\big),$$

代入 K_j 的表达式即有以下隐式 R-K 算法:

$$(1.6) \qquad \begin{cases} y_{n+1} = y_n + \displaystyle\sum_{j=1}^{m} c_j K_j, \\ K_j = f\Big(t_n + ha_j, y_n + h\displaystyle\sum_{l=1}^{m} b_{jl} K_l\Big), \quad j = 1, \cdots, m. \end{cases}$$

显然隐式 R-K 格式的短处在于无法显式计算上面的 K_j, 通常需要求解一个非线性方程组才能得到.

隐式 Runge-Kutta 方法

虽然我们也可以用待定系数法来得到隐式 R-K 格式, 以下我们仅从数值积分角度来推导.

我们既然用隐式格式，自然希望格式的精度尽可能高, 从而我们希望数值积分公式的代数精度尽可能高. 这样一来我们应该采用 Gauss 型求积公式来计算积分:

$$(1.7)\, y_{t_n+1} = y(t_n)+\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(s,y(s))ds \approx y_n + h\sum_{j=1}^{m} c_j K_j,$$

$$(1.8)\, y(s_j) = y(t_n)+\int_{t_n}^{s_j} f(s,y(s))ds \approx y_n+h\sum_{l=1}^{m} b_{jl}K_l,\ 1\le j\le m.$$

即 $s_1,\cdots,s_m$ 应该是在区间 $[t_n,t_{n+1}]$ 上 m 次 Legendre 多项式零点.

隐式 Runge-Kutta 方法

有了高斯积分节点 s_j, 由 (1.7) 积分公式应该具有 $2m-1$ 阶代数精度, 可取 $f(t_n+\tau h)=(\tau h)^{l-1}, l=1,\cdots,m$ 代入 (1.7) 即得

(1.9) $$\sum_{j=1}^{m} c_j a_j^{l-1} = \frac{1}{l}, \quad l=1,\cdots,m.$$

求解上述方程组便可得到 c_j. 类似由 (1.8) 具有 $2m-1$ 阶代数精度, 同样可得

(1.10) $$\sum_{j=1}^{m} b_{ij} a_j^{l-1} = \frac{1}{l} a_i^l, \quad l=1,\cdots,m;\ i=1,\cdots,m.$$

同样求解上述方程组便可得到 b_{ij}.

隐式 Runge-Kutta 方法

即计算 a_j, b_{ij}, c_j 的步骤为:

1. 求 $[-1,1]$ 上 m 次 Legendre 多项式的零点 $\xi_j \Longrightarrow a_j = \frac{1+\xi_j}{2}$;
2. 由 (1.9) 式计算出 c_j, $j=1,\cdots,m$;
3. 对 $i=1,\cdots,m$ 由 (1.10) 式计算出 b_{ij}, $j=1,\cdots,m$.

例 1.2

$m=1$, $P_1(t)=t \Longrightarrow a_1=\frac{1}{2}$, $c_1=1$, $b_{11}=\frac{1}{2}$. 此即隐式中点格式:

$$y_{n+1} = y_n + hf\left(t_n + \frac{h}{2}, \frac{1}{2}(y_n + y_{n+1})\right).$$

$m=2$, $P_2(t)=\frac{3t^2-1}{2} \Longrightarrow$

$$a_{1,2} = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{6}, \quad c_{1,2} = \frac{1}{2}, \quad B = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

单步法的相容性、收敛性与稳定性

定义 1.2

对于公式 $y_{n+1} = y_n + h\phi(t_n, y_n; h)$, 令

$$R_n = L[y_n; h] = y(t_{n+1}) - y(t_n) - h\phi(t_n, y(t_n); h)$$

为单步法的局部截断误差, 即假设之前函数值准确的前提下, 用该单步法计算一步产生的误差 (或者说用数值积分公式计算积分 $\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(s, y(s))ds$ 带来的误差). 进一步的, 令 $\varepsilon_n = y(t_n) - y_n$ (为近似解与真解之间的误差) 称为整体截断误差.

定义 1.3

如果 $h \to 0$ 时差分格式收敛到常微方程, 则称格式与原问题相容. 一般如果整体截断误差为 $\varepsilon_n = \mathcal{O}(h^p)$, 就称为$p$ 阶相容格式.

单步法的相容性、收敛性与稳定性

例 1.3

对于 *Euler* 法，利用 *Taylor* 展开 $R_n = \frac{h^2}{2} y''(\xi)$，其中 $\xi \in (t_n, t_{n+1})$. 假设 $y(t)$ 充分光滑，即有局部截断误差为 $R_n = \mathcal{O}(h^2)$ 二阶.

下面看如何得到整体截断误差？由

$$
\begin{aligned}
y(t_{n+1}) &= y(t_n) + hf(t_n, y(t_n)) + R_n, \\
y_{n+1} &= y_n + hf(t_n, y_n),
\end{aligned}
$$

相减得到 $\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + h[f(t_n, y(t_n)) - f(t_n, y_n)] + R_n$.

由 f 关于 y 满足 *Lipschitz* 条件，以及令 $R = \max_n |R_n| = \mathcal{O}(h^2)$

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

单步法的相容性、收敛性与稳定性

$\Longrightarrow |\varepsilon_{n+1}| \le (1 + Lh)^{n+1}|\varepsilon_0| + R\frac{(1+Lh)^{n+1}-1}{Lh}$. 再由 $(1 + \frac{x}{n})^n \le e^x$
$\Longrightarrow (1 + Lh)^{n+1} = \left(1 + L\frac{T}{N}\right)^{n+1} \le \left(1 + L\frac{T}{N}\right)^N \le e^{LT} \Longrightarrow |\varepsilon_{n+1}| \le$
$|\varepsilon_0|e^{LT} + \dfrac{R}{Lh}\left(e^{LT} - 1\right)$.

设 $\varepsilon_0 = 0$, 由 $R = \mathcal{O}(h^2) \Longrightarrow \varepsilon_n = \mathcal{O}(h)$. 即 Euler 法整体误差为一阶.

类似可以得到一般常用的 $m(\le 4)$ 级显式 Runge-Kutta 方法整体截断误差为 m 阶,

m 级隐式 Runge-Kutta 方法整体截断误差为 $2m$ 阶.

单步法的相容性、收敛性与稳定性

但是实际上 ε_0 一般不为零, 例如是测量数据的话可能包含测量误差, 如果是用其它方法计算得到的，也可能包含舍入误差等. 这样我们需要考虑此误差随计算过程的传递是否会带来恶性影响.

定义 1.4

如果初值误差带来的影响可以被初始误差的某个常数倍控制，则称该方法*对初值是稳定的*.

对于线性问题，如果使用一个相容的、稳定的格式求解，离散解会收敛到真解（在忽略每一步计算的舍入误差影响下）. 稍后我们再考虑每一步舍入误差带来的影响。

单步法的相容性、收敛性与稳定性

对于 Euler 法，假设有不同初值 (或者相当于初值有扰动):

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n), \quad z_{n+1} = z_n + hf(t_n, z_n).$$

令 $e_n = y_n - z_n$, 两式相减有 $e_{n+1} = e_n + h[f(t_n, y_n) - f(t_n, z_n)]$, 利用 f 的 Lipschitz 连续性条件得到

$$|e_{n+1}| \leq (1 + Lh)|e_n| \leq (1 + Lh)^{n+1}|e_0| \leq e^{LT}|e_0|.$$

即 Euler 法对初值是稳定的。

类似可证明其他 R-K 方法在此条件下也是对初值稳定的.

Gronwall 不等式

引理 1.1 (连续情形 Gronwall 不等式)

设 $\eta(t)$ 对 $t \in [a,b]$ 连续且满足:

$$\exists \alpha, \beta \geq 0, \forall t \in [a,b], \quad |\eta(t)| \leq \beta + \alpha \int_a^t |\eta(\tau)| d\tau.$$

则有 $|\eta(t)| \leq \beta e^{\alpha(t-a)}, \quad \forall t \in [a,b].$

$\lhd$ 先设 $\beta > 0$. 令 $\xi(t) = \beta + \alpha \int_a^t |\eta(\tau)| d\tau \Longrightarrow |\eta(t)| \leq \xi(t)$. 且 $\xi'(t) = \alpha|\eta(t)| \leq \alpha\xi(t)$. 结合 $\xi(t) \geq \beta > 0 \Longrightarrow \frac{\xi'}{\xi} \leq \alpha$

积分并利用 $\xi(a) = \beta$ 即得 $|\eta(t)| \leq \xi(t) \leq \beta e^{\alpha(t-a)}$

对 $\beta = 0$ 情形加一个摄动 $\varepsilon > 0$: $\beta_\varepsilon = \beta + \varepsilon > 0$ 即可证明. $\rhd$

离散 Gronwall 不等式

引理 1.2 (离散情形 Gronwall 不等式)

设 $\alpha, \beta \geq 0$, $T, h > 0$, 序列 $\{\eta_n\}_{n\geq 0}$ 满足:

$$|\eta_n| \leq \beta + \alpha h \sum_{j=0}^{n-1} |\eta_j|, \quad \text{对} n = k, k+1, \cdots, \text{且} nh \leq T \text{ 成立},$$

则当 $n \geq k$ 且 $nh \leq T$ 时，有 $|\eta_n| \leq e^{\alpha nh}(\beta + \alpha kh M_0)$，其中 $M_0 = \max(|\eta_0|, \cdots, |\eta_{k-1}|)$.

$\triangleleft$ 将前面积分换成求和, 令 $\xi_n = \beta + \alpha h \sum_{j=0}^{n-1} |\eta_j|$,

有 $|\eta_n| \leq \xi_n$, 且 $\xi_n - \xi_{n-1} = \alpha h |\eta_{n-1}| \leq \alpha h \xi_{n-1}$

$\Longrightarrow \xi_n \leq (1+\alpha h)\xi_{n-1} \leq (1+\alpha h)^{n-k} \xi_k$.

又 $\xi_k = \beta + \alpha h \sum_{j=0}^{k-1} |\eta_j| \leq \beta + \alpha h k M_0$,

且 $(1+\alpha h)^{n-k} \leq (1+\alpha h)^n \leq e^{\alpha nh}$. 代入上面即得. $\triangleright$

目录

线性多步法

从单步法的构造中我们可以看到，每一步我们需要通过插值来计算 $K_j\ (\approx f(s_j, y(s_j)))$. 当我们已经获得了多个节点的值 $y_j\ (j=1,2,\cdots,k-1)$ 之后，我们可以尝试利用这些现成的函数值来做插值，而不需要再引入新的节点 s_j. 这就是多步法,相当于之前的增量函数取成

$$\phi_f = \sum_{j=0}^{k} \beta_j f(t_{n+j}, y_{n+j}),$$

即线性多步法为

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f(t_{n+j}, y_{n+j}). \tag{1.11}$$

这里一般设 $\alpha_k \neq 0$. 如果 $\beta_k = 0$, 为显式格式; 反之若 $\beta_k \neq 0$，则为隐式格式.

线性多步法

类似于前面单步法，我们也可令

$$L[y(t_n);h]=\sum_{j=0}^{k}\left[\alpha_j y(t_{n+j})-h\beta_j f\left(t_{n+j},y(t_{n+j})\right)\right]$$

为多步法 (1.11) 的局部截断误差. 将之在 t_n 做 Taylor 展开, 写成

$$L[y(t_n);h]=c_0y(t_n)+c_1hy'(t_n)+\cdots+c_ph^py^{(p)}(t_n)+\cdots$$

易得

$$\left\{\begin{aligned} c_0 &= \alpha_0+\alpha_1+\cdots+\alpha_k\\ c_1 &= \alpha_1+2\alpha_2+\cdots+k\alpha_k-(\beta_0+\beta_1+\cdots+\beta_k)\\ &\vdots\\ c_p &= \tfrac{\alpha_1+2^p\alpha_2+\cdots+k^p\alpha_k}{p!}-\tfrac{\beta_1+2^{p-1}\beta_2+\cdots+k^{p-1}\beta_k}{(p-1)!}\\ &\vdots \end{aligned}\right. \tag{1.12}$$

线性多步法

若(1.12)中 $c_0 = \cdots = c_p = 0$, $c_{p+1} \neq 0$, 则称多步法 (1.11) 是 p 阶方法, 局部截断误差为 $L[y(t_n); h] = c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(\xi_n)$.

一般取 $\alpha_k = 1$, 如果在 (1.12) 中令 $c_0 = c_1 = \cdots = c_p = 0$, 而且恰好 $p+1 = 2k+1$, 则可解出 $\alpha_0, \cdots, \alpha_{k-1}$ 和 $\beta_0, \cdots, \beta_k$. 这样就是用待定系数法来确定 (1.11) 中的系数。

当然也可以用数值积分办法来推导. 例如，由公式

$$y(t_{n+k}) = y(t_{n+k-1}) + \int_{t_{n+k-1}}^{t_{n+k}} f\big(t, y(t)\big)dt,$$

如果利用 f 在 $t_{n+k-1}, \cdots, t_n$ 上的值构造一个 $k-1$ 阶插值多项式 $L_{k-1}(t)$ 来代替 f 求积分，便得到 Adams 外插法格式:

Adams 多步法

$$y_{n+k} = y_{n+k-1} + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{n+j}. \tag{1.13}$$

这称为显式 Adams 格式 (外插法).

如果利用 f 在 $t_{n+k}, \cdots, t_n$ 上的值构造一个 k 阶插值多项式 $\widetilde{L}_k(t)$ 来代替 f 求积分，便得到 Adams 内插法格式:

$$y_{n+k} = y_{n+k-1} + h \sum_{j=0}^{k} \widetilde{\beta}_j f_{n+j}. \tag{1.14}$$

这称为隐式 Adams 格式 (内插法).

类似地也可以得到其他形式的线性多步法.

线性多步法的相容性与稳定性

由前面局部截断误差的定义，可以说，如果

$$L[y(t_n);h]=\sum_{j=0}^{k}[\alpha_j y(t_{n+j})-h\beta_j f(t_{n+j},y(t_{n+j}))]=c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(\xi_n),$$

则称多步法 (1.11) 与原初值问题是p 阶相容的.

如果引入多步法 (1.11) 的第一、第二特征多项式:

$$\rho(\lambda)=\sum_{j=0}^{k}\alpha_j\lambda^j,\quad \sigma(\lambda)=\sum_{j=0}^{k}\beta_j\lambda^j. \tag{1.15}$$

当 $h\to 0$ 时, 若

$$\frac{1}{h\rho'(1)}\sum_{j=0}^{k}[\alpha_j y(t_{n+j})-h\beta_j f(t_{n+j},y(t_{n+j}))]-[y'(t_n)-f(t_n,y(t_n))]=o(1),$$

即差分方程收敛到原微分方程, 则称(1.11)与(1.1)相容.

线性多步法的相容性与稳定性

可以验证 (将 y_{t_n+j}, $f(t_{n+j}, y_{t_n+j})$ 在 t_n 处 Taylor 展开):

多步法 (1.11) 与 (1.1) 相容 $\Longleftrightarrow \rho(1) = 0$, 且$\rho'(1) = \sigma(1)$.

下面我们来看其对初值的稳定性.

定义 1.5

称多步法 (1.11) 是对初值稳定的, 是指若存在不依赖于 h 的常数 C 及 $h_0, \varepsilon > 0$, s.t. $\forall h \in (0, h_0)$ 及任取两组不同初值得到的解 $\{u_n\}_{n=0}^N$ 和 $\{u_n\}_{n=0}^N$, 当 $\max\limits_{0\le j\le k-1} |u_j - v_j| < \varepsilon$ 时, 就有

$$\max_{nh\le T} |u_n - v_n| \le C \max_{0\le j\le k-1} |u_j - v_j|. \tag{1.16}$$

换句话说，只要步长充分小，多步法的解可以连续依赖于初值.

线性多步法的相容性与稳定性

那么多步法 (1.11) 什么时候具有对初值的稳定性呢?

定理 1.1 (多步法对初值稳定的充要条件)

多步法 (1.11) 对初值稳定 $\Longleftrightarrow$ 第一特征多项式 $\rho(\lambda)$ 满足所谓的根条件: $\rho(\lambda)$ 的根都在单位圆内, 且在单位圆周上的根全为单根.

$\lhd$ 先证必要性 "$\Longrightarrow$". 即假设多步法对初值稳定. 可无妨设 $f \equiv 0$.

先证明 $\rho(\lambda)$ 的根都在单位圆内. 用反证法, 假设 $\rho(\lambda) = 0$ 有一解 μ s.t. $|\mu| > 1$. 考虑如下两组初值:

$$\begin{aligned} u_j &= \delta\mu^j, \\ v_j &= 0, \end{aligned} \quad 0 \le j \le k-1, \quad \text{这里}\delta > 0 \text{ 为待定常数}$$

显然有如果用 (1.11) 计算, 有其解为:

$$u_n = \delta\mu^n, \quad v_n \equiv 0, \quad n = 0, 1, \cdots$$

线性多步法的相容性与稳定性

这样尽管初始误差 $\max\limits_{0\leq j<k}|u_j - v_j| = \delta|\mu|^{k-1}$ 可以很小，但是当 $h \to 0, nh \leq T$ 时，会有 $n \to +\infty$，因而 $|u_n - v_n| = \delta|\mu|^n \to +\infty$.
显然此时不稳定，与前提矛盾，因此 $\rho(\lambda)$ 不会有模大于 1 的根.

再证单位圆周上只能有单根：依然用反证法，假设 $\rho(\lambda)$ 有重根 $\mu \in \mathbb{C}$ s.t. $|\mu| = 1$ 且 $\rho(\mu) = \rho'(\mu) = 0$.

此时考虑如下初值选取：

$$\begin{array}{rcl} u_j & = & \delta j\mu^j, \\ v_j & = & 0, \end{array} \quad 0 \leq j \leq k-1, \quad \text{这里}\delta > 0 \text{ 为常数}$$

易见如果用 (1.11) 计算，有其解为：

$$u_n = \delta n\mu^n, \quad v_n \equiv 0, \quad n = 0, 1, \cdots$$

线性多步法的相容性与稳定性

这样仍然有初始误差 $\max\limits_{0\le j<k}|u_j-v_j|=\delta(k-1)|\mu|^{k-1}=\delta(k-1)$ 可以足够小, 但 $|u_n-v_n|=\delta n\to+\infty$, 当 $n\to+\infty$. 与稳定性矛盾.

因此上面我们证明了: 如果多步法 (1.11) 对初值稳定，必然有 $\rho(\lambda)$ 满足根条件.

下面看充分性:“$\Longleftarrow$”, 即假设 $\rho(\lambda)$ 满足根条件, 欲证明对初值的稳定性. 要证明这个，我们先要把差分方程的解结构弄清楚.

先看齐次差分方程: $\alpha_k y_{n+k}+\cdots+\alpha_0 y_n=0$. 其通解可以写成

$$Y_n=\sum_{j=1}^{J}\sum_{l=1}^{r_j}c_{jl}n^{l-1}\xi_j^n,\quad (c_{jl}\text{ 为一些常数})\tag{1.17}$$

其中 ξ_j 为 $\rho(\lambda)=0$ 的 r_j 重根, 且 $\sum_{j=1}^{J}r_j=k$.

线性多步法的相容性与稳定性

对于非齐次差分方程: $\alpha_k z_{n+k}+\cdots+\alpha_0 z_n=\gamma_{n+k}$, 给了初值 $\{z_0,\cdots,z_k$
后的解为 (设 $\alpha_k\neq 0$)

$$z_n=\sum_{j=0}^{k-1} z_j Y_n^{(j)}+\frac{1}{\alpha_k}\sum_{j=0}^{n-k}\gamma_{j+k}Y_{n-j-1}^{(k-1)},\qquad n=k,k+1,\cdots \tag{1.18}$$

这里 $\{Y_n^{(j)}\}$ 是齐次差分方程 $\begin{cases}\sum_{l=0}^{k}\alpha_l Y_{n+l}^{(j)}=0,\\ Y_i^{(j)}=\delta_{ij},\quad 0\le i<k;\end{cases}$ 的解.

设 u_n,v_n 为用 (1.11) 式计算的任两组解, 令 $\varepsilon_n=u_n-v_n$, 有

$$\sum_{j=0}^{k}\alpha_j\varepsilon_{n+j}=\gamma_{n+k}\equiv h\sum_{j=0}^{k}\beta_j[f(t_{n+j},u_{n+j})-f(t_{n+j},v_{n+j})].$$

由前面结果知其解为: $\varepsilon_n=\sum_{j=0}^{k}\varepsilon_jY_n^{(j)}+\frac{1}{\alpha_k}\sum_{j=0}^{n-k}\gamma_{j+k}Y_{n-j-1}^{(k-1)}$.

线性多步法的相容性与稳定性

由于 $\rho(\lambda)$ 满足根条件，即 $|\xi_j| \le 1$，且若 $|\xi_j| = 1$ 必有 $r_j = 1$.

$\Longrightarrow$ $\exists C > 0$, s.t. $|Y_n| \le C$, (当 $nh \le T$) 即齐次方程的解总有界.

$\Longrightarrow |\varepsilon_n| \le C\left(\sum_{j=0}^{k-1}|\varepsilon_j| + \frac{1}{|\alpha_k|}\sum_{j=0}^{n-k}|\gamma_{j+k}|\right)$, 当 $n \ge k$.

令 $M_0 = \max\limits_{0\le j<k}|\varepsilon_j|$, 再利用 $f(t,y)$ 关于 y 满足 Lipschitz 连续性得

$$|\varepsilon_n| \le C\left(kM_0 + \frac{hL}{|\alpha_k|}\sum_{j=0}^{n-k}\sum_{l=0}^{k}|\beta_l||\varepsilon_{l+j}|\right)$$

再令 $B_0 = \dfrac{(k+1)L}{|\alpha_k|}\max\limits_{0\le l\le k}|\beta_l|$, 有

$$|\varepsilon_n| \le CkM_0 + hB_0\sum_{j=0}^{n}|\varepsilon_j|.$$

线性多步法的相容性与稳定性

显然当 h 充分小时, 可以有

$$|\varepsilon_n| \le CkM_0 + h\widetilde{C}\sum_{j=0}^{n-1}|\varepsilon_j|.$$

从而由离散 Gronwall 不等式 (引理 1.2)

$$\Longrightarrow |\varepsilon_n| \le e^{\widetilde{C}t}\left(CkM_0 + \widetilde{C}khM_0\right), \quad n \ge k,\ nh \le T.$$

即证明了格式对初值的稳定性。 $\triangleright$

由上面定理, 如果 (1.11) 满足相容性以及根条件, 且 $h \to 0$ 时, 假设初值误差 $\to 0$, 则 $t_0 + nh \to t$ 时, 有 $y_n = y(t_0 + nh) \to y(t)$, 即有离散解的收敛性.

线性多步法的相容性与稳定性

例 1.4

考虑初值问题 $\begin{cases} y'(t)=4t\sqrt{y},\ 0\le t\le 1, \\ y(0)=1; \end{cases}$ 其解为 $y(t)=(1+t^2)^2$.

用多步法: $y_{n+2}-(1+a)y_{n+1}+ay_n=\frac{h}{2}[(3-a)f_{n+1}-(1+a)f_n]$, 可以检验 $c_0=c_1=c_2=0$, $c_3=\frac{a+5}{12}$. 又由其第一特征多项式 $\rho(\lambda)=\lambda^2-(1+a)\lambda+a=(\lambda-1)(\lambda-a)$ 的根为 $\lambda_1=1, \lambda_2=a$.

我们知道 $a=-5$ 时，该方法为不稳定三阶格式; $a\neq-5$ (例如取$a=0$) 为二阶稳定格式. 假如取 $a=-5$, $h=0.1$, 可得

t	0	0.1	0.2	$\cdots$	0.7	0.8	0.9	1.0
$y(t)$	1	1.0201	1.0816	$\cdots$	2.2201	2.6896	3.2761	4.0000
y_n	1	1.0201	1.0812	$\cdots$	2.9130	-0.6026	—	—

目录

舍入误差的影响

前面我们一直没有考虑每一步计算中舍入误差带来的影响，但这事实上是无法避免的.

考虑如下一般形式的差分法:

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n+j} = h\phi_f(t_n; y_n, \cdots, y_{n+k}; h). \tag{1.19}$$

实际计算时，由于舍入误差的影响，实际计算式为

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j \bar{y}_{n+j} = h\phi_f(t_n; \bar{y}_n, \cdots, \bar{y}_{n+k}; h) + \delta_{n+k}. \tag{1.20}$$

其中 δ_{n+k} 表示每步计算带来的舍入误差影响.

通常可以认为 δ_l 是可以控制的，可以足够小.

舍入误差的影响

虽然我们前面估计了 y_n 与 $y(t_n)$ 之间的截断误差, 但是还需 $|\bar{y}_n - y_n|$ 充分小, 才能有实际计算精度足够高.

令 $e_n = \bar{y}_n - y_n$, 有

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j e_{n+j} = h[\phi_f(t_n; \bar{y}_n, \cdots, \bar{y}_{n+k}; h) - \phi_f(t_n; y_n, \cdots, y_{n+k}; h)] + \delta_{n+k}.$$

若 f 是一个比较复杂的函数, 显然不好估计舍入误差的增长情况. 因此一般我们只在假设 $f(t, y)$ 仅是 y 的线性函数情况下讨论. 即以下假设

$$f(t, y) = \mu y, \quad \mu \in \mathbb{C} \text{ 为一个常数.} \tag{1.21}$$

可以将 μ 看成 $\frac{\partial f}{\partial y}(t, y)$ 的近似.

舍入误差的影响

自然，若 $f \equiv \mu y$, 问题 $\begin{cases} y'(t) = \mu y, \\ y(0) = y_0; \end{cases}$ 的解为 $y(t) = y_0 e^{\mu t}$.

用多步法 (1.11) 来求解 (单步法(1.2)可看成 $k = 1$ 的特例):

(1.22) $$\sum_{j=0}^{k} (\alpha_j - \bar{h}\beta_j) y_{n+j} = 0,$$

其中 $\bar{h} = \mu h$. 若令 $\gamma_j(\bar{h}) = \alpha_j - \bar{h}\beta_j$, 有

(1.23) $$\sum_{j=0}^{k} \gamma_j e_{n+j} = \delta_{n+k}.$$

引入向量形式记号 (假设 $\gamma_k = \alpha_k - \bar{h}\beta_k \neq 0$)

$$\vec{E}_n = (e_{n+k-1}, e_{n+k-2}, \cdots, e_n)^T, \quad \vec{\eta}_n = (\gamma_k^{-1}\delta_{n+k}, 0, \cdots, 0)^T \in \mathbb{R}^k,$$

舍入误差的影响

再令矩阵 $A = \begin{pmatrix} -\gamma_k^{-1}\gamma_{k-1} & -\gamma_k^{-1}\gamma_{k-2} & \cdots & -\gamma_k^{-1}\gamma_0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & & \ddots & 0 \end{pmatrix}$, 得到以下矩阵形式的误差传递式:

(1.24) $$\vec{E}_{n+1} = A\,\vec{E}_n + \vec{\eta}_n\ .$$

这样其解为

(1.25) $$\vec{E}_{n+1} = A^n\,\vec{E}_0 + \sum_{j=0}^{n-1} A^{n-j-1}\,\vec{\eta}_j, \quad n = 1, 2, \cdots$$

一般可以假设 $\|\vec{E}_0\|$, $\|\vec{\eta}_j\|$ 可以充分小 (取决于计算机字长).

绝对稳定性

但要想保证 $\| \vec{E}_n \|$ 有界 (注意 $h \to 0$ 时, $nh \le T$ 会有 $n \to +\infty$), 需要 $\|A^n\| \to 0$ 才行. 即需要 A 的谱半径 < 1. 由矩阵 A 的表达式易得其特征方程为

(1.26) $$\rho(\lambda) - \bar{h}\sigma(\lambda) = 0.$$

这样，要保证 $\| \vec{E} \|$ 有界, 即需要上面方程的根的模均小于 1.

定义 1.6 (绝对稳定性)

称线性多步法(1.11)关于 $\bar{h} = \mu h$ 是**绝对稳定的**，是指上述特征方程(1.26) 的根均在单位圆周内, 即 $\lambda_j(\bar{h}) < 1$, $j = 1, \cdots, k$.

如果在复平面上存在区域 D s.t. $\forall \bar{h} \in D$, 多步法 (1.11) 都关于该 $\bar{h}$ 绝对稳定, 则称 D 为该方法的**绝对稳定域**.

由于 e_n 与 y_n 满足同样形式的差分方程, 故而有以下定理.

绝对稳定性

定理 1.2 (绝对稳定的必要条件)

若 (1.11) 是相容且对初值稳定的格式, 且当 $h \to 0$ 时关于 $\bar{h} = \mu h$ 绝对稳定, 则必有 $Re(\mu) < 0$ (即 $y(t)$ 本身是指数衰减的).

$\lhd$ 如果格式相容且对初值稳定, 那么 $y_n \to y(t_n)$, 当 $h \to 0$. 而 y_n 与 e_n 满足的差分方程相同, 如果格式关于 $\bar{h} = \mu h$ 绝对稳定, 那么特征值方程的根模都小于 1. 由前面差分方程解的表达式知, (参看定理 1.1 中的公式 (1.17)-(1.18)) 应该有 $y_n, e_n \to 0$, 当 $n \to +\infty$. 再由 $y(t) = y(0)e^{\mu t}$, 立刻有 $Re(\mu) < 0$. $\rhd$

对单步法可类似定义绝对稳定性: 也设 $f(t, y) = \mu y$, 这样有

$$y_{n+1} = y_n + h\phi_f(t_n, y_n; h) \equiv E(\bar{h})y_n.$$

即特征方程就是 $\lambda - E(\bar{h}) = 0$. 故绝对稳定条件就是 $|E(\bar{h})| < 1$.

显式 R-K 方法的绝对稳定性

例 1.5 (考虑二阶显式 R-K 格式)

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2), \\ K_1 = f_n, \quad K_2 = f(t_{n+1}, y_n + hK_1). \end{cases}$$

应用于试验方程 $f \equiv \mu y$, 得到 (令$\bar{h} = \mu h$):

$$y_{n+1} = y_n + \bar{h}\left(1 + \frac{\bar{h}}{2}\right) y_n \equiv \left(1 + \bar{h} + \frac{\bar{h}^2}{2}\right) y_n.$$

特征方程: $\lambda - \left(1 + \bar{h} + \frac{\bar{h}^2}{2}\right) = 0$, 稳定性条件为: $|1 + \bar{h} + \frac{\bar{h}^2}{2}| < 1$. 可以用边界轨迹法来确定稳定区域 $D \subset \mathbb{C}$:

令 $\lambda = e^{i\theta}$ 代入上面特征方程 (D 的边界点对应模为 1 的根):

$$1 + \bar{h} + \frac{\bar{h}^2}{2} - e^{i\theta} = 0 \Longrightarrow \bar{h} = -1 \pm \sqrt{2e^{i\theta} - 1}.$$

隐式 R-K 方法的绝对稳定性

例 1.6 (类似地考虑二阶隐式 R-K 格式)

$$y_{n+1} = y_n + hf\left(t_n + \frac{h}{2}, \frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right),$$

令 $f \equiv \mu y$, 得到 (令$\bar{h} = \mu h$):

$$y_{n+1} = y_n + \bar{h}\frac{y_n + y_{n+1}}{2} \Longrightarrow y_{n+1} = \frac{1 + \bar{h}/2}{1 - \bar{h}/2} y_n.$$

特征方程为: $\lambda - \frac{1 + \bar{h}/2}{1 - \bar{h}/2} = 0$, 即要求: $\left|\frac{1 + \bar{h}/2}{1 - \bar{h}/2}\right| < 1.$

易见其等价于 $Re(\bar{h}) < 0.$

即隐式二阶 *R-K* 方法的绝对稳定域包含了整个左半复平面!

可类似地证明其他各阶隐式 *R-K* 方法的绝对稳定域都包含了左半复平面！我们称这样的格式为*A-稳定方法*.

多步法的绝对稳定性

例 1.7 (考虑以下隐式格式–Milne 方法)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{3}\left(f_{n+2} + 4f_{n+1} + f_n\right).$$

可以证明这是精度最高的二步法，为二步四阶隐式格式. 同样考虑 $f = \mu y$, 其特征方程为

$$\begin{aligned} 0 &= \rho(\lambda) - \bar{h}\sigma(\lambda) = \lambda^2 - 1 - \frac{\bar{h}}{3}(\lambda^2 + 4\lambda + 1) \\ &= \left(1 - \frac{\bar{h}}{3}\right)\lambda^2 - \frac{4\bar{h}}{3}\lambda - \left(1 + \frac{\bar{h}}{3}\right). \end{aligned}$$

自然有两个根 $\lambda_\pm = \frac{2\bar{h} \pm \sqrt{3\bar{h}^2+9}}{3-\bar{h}}$. 当 $h \to 0$ 时,

$$\lambda_\pm(\bar{h}) = \frac{2\bar{h}}{3} + \frac{2\bar{h}^2}{9} + \mathcal{O}(\bar{h}^3) \pm \left(1 + \frac{\bar{h}}{3} + \frac{5\bar{h}^2}{18} + \mathcal{O}(\bar{h}^3)\right).$$

当 $Re(\mu) < 0$, $h \ll 1$ 时, 就有 $Re(\lambda_-) < -1$, 即 $|\lambda_-| > 1$.

这说明无论 h 多小, 总有 $|\lambda_-| > 1$. 即 *Milne* 方法为 “绝对不稳定”.

相对稳定性

前面我们已经说过 (*cf.* 定理 1.2), 只能在 $Re(\mu) < 0$ 时考虑格式的绝对稳定性. 那么如果 $Re(\mu) \geq 0$, 此时什么样的算法是可以接受的呢? 仍考虑试验方程:

$$\begin{cases} y'(t) = \mu y, \\ y(0) = y_0; \end{cases} \Longrightarrow y(t) = y_0 e^{\mu t}.$$

及多步法 $\displaystyle\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f_{n+j}$. 设其为相容、对初值稳定的. 也就是说, $\rho(1) = 0$, $\rho'(1) = \sigma(1)$, 且 $\rho(\lambda) = 0$ 的根均在单位圆内, 且单位圆周上为单根. 由此也说明 $\lambda_1 = 1$ 是 $\rho(\lambda) = 0$ 的单根.

假设该方法为 p 阶, 即局部截断误差为 $c_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(\xi_n)$.

也就是有 $L[y(t_n); h] = \sum_{j=0}^{k} (\alpha_j - \bar{h}\beta_j) y(t_{n+j}) = \mathcal{O}(h^{p+1})$.

相对稳定性

由 $y(t_j)=y_0e^{\mu jh}=y_0(e^{\bar h})^j \Longrightarrow y_0e^{n\bar h}\sum_{j=0}^{k}(\alpha_j-\bar h\beta_j)\,(e^{\bar h})^j = \mathcal{O}(h^{p+1})$. 结合其特征方程: $\rho(\lambda)-\bar h\sigma(\lambda)=0$, 我们知道特征方程必有一根

$$\lambda_1(\bar h)=e^{\bar h}+\mathcal{O}(h^{p+1}).$$

$h\to 0$ 时, 即有 $\lambda_1(\bar h)\to\lambda_1=1$.

再考虑舍入误差的方程 $\sum_{j=0}^{k}(\alpha_j-\bar h\beta_j)e_{n+j}=\delta_{n+k}$. 结合差分方程解的表达式我们知道, e_n 的表达式中必有一项

$$C\cdot\lambda_1^n(\bar h)=C\cdot e^{n\bar h}+\mathcal{O}(h^{p+1})=C\cdot e^{\mu t_n}+\mathcal{O}(h^{p+1}).$$

也就是说 $e_n=C\cdot e^{\mu t_n}+\mathcal{O}(h^{p+1})+\cdots$

对比 $y(t)$ 的表达式我们知道, e_n 的增长性至少与 $y(t_n)$ 相同.

相对稳定性

假设上面解 e_n 的表达式中 $\lambda_1^n(\bar{h})$ 为主项, 其他项为该项的高阶小量 (当 $h \to 0$), 即 $|\lambda_1(\bar{h})| > |\lambda_j(\bar{h})|$, $j = 2, \cdots, k$. 这时可以认为舍入误差带来的影响的增长率至多与真实解同阶. 此时可以认为计算结果是可接受的. 这样引入了另一种稳定性概念:

定义 1.7 (相对稳定性)

称多步法(1.11)对给定的 $\bar{h}$ 是相对稳定的, 是指若特征方程 (1.26) 的根满足 $\lambda_1(\bar{h}) = e^{\bar{h}} + \mathcal{O}(h^{p+1})$ (自然有$\lambda_1(0) = 1$), 且

$$|\lambda_1(\bar{h})| > |\lambda_j(\bar{h})|, \ j = 2, \cdots, k.$$

否则就称该方法对于 $\bar{h}$ 不是相对稳定的.

如果在复平面上存在区域 D s.t. $\forall \bar{h} \in D$, 多步法 (1.11) 都关于该 $\bar{h}$ 相对稳定, 则称 D 为该方法的相对稳定域.

相对稳定性

例 1.8 (考虑以下两步法)

$$y_{n+2}-(1+a)y_{n+1}+ay_n=\frac{h}{12}[(5+a)f_{n+2}+8(1-a)f_{n+1}-(1+5a)f_n]$$

假设 $-1\le a\le 1$. 显然，当 $a\neq -1$ 时，上式为三阶方法; $a=-1$ 时为*Milne*方法. 其特征多项式为

$$\rho(\lambda)-\bar{h}\sigma(\lambda)=[1-\frac{\bar{h}(5+a)}{12}]\lambda^2-[(1+a)+\frac{2\bar{h}}{3}(1-a)]\lambda+a+\frac{\bar{h}}{12}(1+5a)$$

简单起见，仅考虑 $\mu\in\mathbb{R}$ 情形. 可得

其绝对稳定域为 $\left(6\frac{a+1}{a-1},0\right)$. 其相对稳定域为 $\left(\frac{3(a+1)}{2(a-1)},+\infty\right)$.

例如取 $a=0$, 来求解 $\begin{cases} y'=-100y,\ 0\le t\le 1, \\ y(0)=1; \end{cases}\Longrightarrow y(t)=e^{-100t}.$

相对稳定性

要使方法绝对稳定, 需要 $-6 < -100h < 0$, 即 $h < 0.06$.

要使方法相对稳定, 需要 $-\frac{3}{2} < -100h < +\infty$, 即 $h < 0.015$.

取 $h = 0.01, 0.02, 0.1$ 分别计算:

$h=0.01$	$y_2=0.1454$	$y_3=0.0558$	$y_4=0.0217$	$y_5=8.39E-3$	$\cdots$
$y(t_n)$	0.1353	0.0498	0.0183	$6.74E-3$	$\cdots$

$h=0.02$	$y_2=0.0663$	$y_3=2.48E-4$	$y_4=5.98E-3$	$y_5=-1.07E-3$	$\cdots$
$y(t_n)$	0.0183	$2.48E-3$	$3.35E-4$	$4.54E-5$	$\cdots$

$h=0.1$	$y_2=0.1612$	$y_3=-0.1768$	$y_4=0.2200$	$y_5=-0.2698$	$\cdots$
$y(t_n)$	$2.06E-9$	0	0	0	$\cdots$

从上面可以看出 $h < 0.015$ 时, 相对误差会减少; $h < 0.06$ 时, 绝对误差会减少; $h \geq 0.06$ 后绝对误差会扩大.

目录

刚性常微分方程

许多物理、化学或生物过程都可以用常微分方程来描述. 它们往往包含不同的子过程. 有的表现为快过程，有的为慢过程. 变化速度可以相差很大的数量级. 相应的描述这些过程的常微方程的解也包含快变分量和慢变分量. 如果这些分量变化速度相差很大, 通常称这种常微方程(组) 为刚性方程 (组).

例 1.9

考虑问题:
$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} &= -2000u + 999.75v + 1000.25 \\ \dfrac{dv}{dt} &= u - v \\ u(0) &= 0, \quad v(0) = -2. \end{cases}$$

其解为
$$\begin{cases} u(t) = -1.499875e^{-\frac{t}{2}} + 0.499875e^{-2000.5t} + 1, \\ v(t) = -2.99975e^{-\frac{t}{2}} - 0.00025e^{-2000.5t} + 1. \end{cases}$$

刚性常微分方程

从上面解的表达式中看到 $e^{-0.5t}$ 为慢变分量, $e^{-2000.5t}$ 为快变分量. 我们称这两部分的线性组合为渐态解, 常数项部分称为稳态解 ($t \to +\infty$ 的解). 显然上述两项趋于零的速度差别太大. 如 $t = 0.005$ 时, 已有 $e^{-2000.5t} \approx 0$, 而此时 $e^{-0.5t} \approx 1$. 要到 $t = 20$ 才会有 $e^{-0.5t} \approx 0$. 其变化速度差异可用 $\frac{-2000.5}{-0.5} = 4001 \gg 1$ 来描述.

一般来说我们需要计算到接近稳态解的时间, 即 $T \approx 20$. 若使用显式 R-K 格式 (如四级四阶 R-K 方法), 步长需要满足绝对稳定性条件:

$$-2000.5h > -2.78 \Longrightarrow h < 0.0013\cdots$$

计算到 $T = 20$ 需要很多步, 计算量大且会带来较大舍入误差.

因此我们需要用稳定性更好的方法来计算此类刚性问题.

刚性常微分方程

考虑如下常微分方程组:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{y}(t)}{dt} = A\mathbf{y}(t) + \mathbf{f}(t), \quad t \in [0, T], \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0. \end{cases} \tag{1.27}$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $\mathbf{y}, \mathbf{y}_0, \mathbf{f} \in \mathbb{R}^m$. 假设 A 的特征值为 $\lambda_j = \alpha_j + i\beta_j$, 对应的特征向量为 $\xi_j \in \mathbb{C}^m$, $j = 1, \cdots, m$. 则(1.27)的通解可写成

$$\mathbf{y}(t) = \underbrace{\sum_{j=1}^{m} c_j e^{\lambda_j t}\xi_j}_{\text{齐次方程通解}} + \underbrace{\psi(t)}_{\text{非齐次方程特解}}.$$

常数 $c_j \in \mathbb{C}$ 可以由初值定出. 称 $\tau_j = -\frac{1}{\alpha_j}$ 为(松弛) 时间常数. 我们这里考虑稳态情形, 即 $Re(\lambda_j) < 0$, 这样 $t \to \infty$, $\mathbf{y}(t) \to \psi(t)$.

刚性常微分方程

定义 1.8 (刚性方程组及刚性比)

若 (1.27) 中 A 的特征值 λ_j 满足

1. $Re(\lambda_j) < 0,\ j = 1, \cdots, m;$
2. $s = \dfrac{\max\limits_{1 \le j \le m} |\alpha_j|}{\min\limits_{1 \le j \le m} |\alpha_j|} \gg 1.$

则称 (1.27) 为刚性方程组, s 称为刚性比.

通常 $s \sim \mathcal{O}(10^p),\ p \ge 1$ 就称为刚性问题. s 越大病态性越严重.

对于非线性问题

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0. \tag{1.28}$$

可对 $\mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ 关于 $\mathbf{y}$ 的 Jacobian 矩阵 $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(t, \mathbf{y}(t))$ 来做类似定义和讨论

刚性常微分方程-A 稳定

鉴于前面的分析，如果用绝对稳定域 D 是有限区域的方法来计算上述刚性问题时，由于要求 $\bar{h}_j = \lambda_j h \in D$，必然有步长 h 要受到最小 (松弛) 时间常数 τ_j 的限制. 由于计算时间又需要超过最大时间常数的某个倍数 (以接近稳态解)，这样计算步骤必然会很多. 为克服此困难，我们引入新的稳定性要求.

定义 1.9 (A-稳定性)

称一种差分方法是 A 稳定的，若它的绝对稳定域 D 包含整个左半复平面，即 $D \supset \{\bar{h} \in \mathbb{C} \mid Re(\bar{h}) < 0\}$.

关于 A 稳定的差分方法有以下定理:

刚性常微分方程

定理 1.3

1. 任何显式格式（包括单步法和多步法）不可能是 A 稳定的;
2. A 稳定的线性多步法的阶不超过 2;
3. 具有最小误差常数的 2 阶 A 稳定线性多步法为梯形法.

从此定理可以看出，具有 A 稳定性的方法不多. 我们一方面需要放宽 “A 稳定” 要求, 另一方面还需构造一些新格式.

定义 1.10 ($A(\alpha)$ 稳定)

称一种差分方法是 $A(\alpha)$稳定的, 如果该方法的绝对稳定域 D 中包含一个无限大楔形区域:

$$W_\alpha = \{\bar{h} \in \mathbb{C} \mid -\alpha < \pi - \arg(\bar{h}) < \alpha,\ \alpha \in (0, \tfrac{\pi}{2})\}.$$

刚性常微分方程-刚性稳定

如果存在 α 充分小, *s.t.* 该方法是 $A(\alpha)$ 稳定的, 则称该方法是 $A(0)$ 稳定的;

若 $\forall\alpha \in (0, \frac{\pi}{2})$ 该方法都是 $A(\alpha)$ 稳定的, 则称该方法是 $A(\frac{\pi}{2})$ 稳定的, 即 A 稳定的.

另外若绝对稳定域包含整个负实轴, 则称方法是 A_0 稳定的.

如果再考虑方法的精度问题, 我们引入以下刚性稳定的概念:

定义 1.11 (刚性稳定)

一种方法称为刚性稳定的, 若它是收敛的, 且存在正常数 α, β, γ *s.t.* 在区域 $D_1 = \{\bar{h} \in \mathbb{C} \,|\, Re(\bar{h}) \leq -\alpha\}$ 上是绝对稳定的;

在区域 $D_2 = \{\bar{h} \in \mathbb{C} \,|\, -\alpha < Re(\bar{h}) < \beta, |Im(\bar{h})| < \gamma\}$ 上该方法是绝对（或相对）稳定的，且具有高精度.

刚性常微分方程

另一方面会发现，具有无限大绝对稳定域不一定就很好了：

例 1.10 (梯形法 $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1})$)

求解试验方程 $y' = \mu y \Longrightarrow y_{n+1} = E(\bar{h})y_n$，其中 $E(\bar{h}) = \dfrac{1+\frac{\bar{h}}{2}}{1-\frac{\bar{h}}{2}}$.

易见 $|\frac{y_{n+1}}{y_n}| = |E(\bar{h})| = \sqrt{\frac{1+hRe(\mu)+\frac{1}{4}h^2|\mu|^2}{1-hRe(\mu)+\frac{1}{4}h^2|\mu|^2}}$
当 $|Re(\mu)| \gg 1$ 且固定某个步长 $h > 0$ 时，有 $|\frac{y_{n+1}}{y_n}| \approx 1$. 说明梯形法计算出来的 y_n 是衰减很慢的一种振荡行为，这显然不对.

如果用后退 (隐式) *Euler* 法来计算，有 $y_{n+1} = \frac{1}{1-h\mu}y_n$，即 $E(\bar{h}) = \dfrac{1}{1-\bar{h}}$. 这时显然有当 $Re(\mu) \to -\infty$ 时，$E(\bar{h}) \to 0$.
这是与实际相符的结果.

刚性常微分方程-L 稳定性

为区分上述两种情形，我们引入 L-稳定概念:

定义 1.12

称数值方法为 L-稳定的, 若它是 A 稳定的, 且用于试验方程 $y' = \mu y$ 得到的解序列 $y_{n+1} = E(\bar{h})y_n$, 这里 $\bar{h} = h\mu$,
当 $Re(h\mu) \to -\infty$ 时, 有 $|E(h\mu)| \to 0$.

显然有下述关系:

$$L\text{稳定} \Longrightarrow A\text{稳定} \Longrightarrow A(\alpha)\text{稳定} \Longrightarrow A(0)\text{稳定} \Longrightarrow A_0\text{稳定}$$

解刚性常微分方程的线性多步法

我们先给出几个线性多步法的各种稳定性条件，再给出几种常用多步法的构造办法.

考虑 (1.11) 形式的 k 步法:

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

其中取 $\alpha_k = 1$, $\alpha_0^2 + \beta_0^2 \neq 0$ (以说明是 k 步法). $\alpha_j, \beta_j \in \mathbb{R}$, $h > 0$.

用于试验方程 $y' = \mu y$ 得其特征方程为 (1.26) 形式:

$$\rho(z) - \bar{h}\sigma(z) = 0.$$

这里 $\bar{h} = \mu h$, $\rho(z) = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j z^j$, $\sigma(z) = \sum_{j=0}^{k} \beta_j z^j$.

A 稳定的线性多步法

设上面特征方程 (1.26) 的 k 个根为 $z_j(\bar{h})$, 则方法 (1.11) 的绝对稳定域为 $D=\left\{\bar{h}=\mu h\in\mathbb{C}\middle|\,|z_j(\bar{h})|<1,\ j=1,\cdots,k\right\}$

我们有以下多步法为 A-稳定的充要条件:

定理 1.4

k 步法 (1.11) 为 A 稳定的充要条件是: 对 $|z|>1$, $\frac{\rho(z)}{\sigma(z)}$ 为正则 (即$\sigma(z)\neq 0$) 的且有非负实部.

$\triangleleft$ 证明思路: "$\Longrightarrow$" 若多步法 (1.11) 为 A 稳定的, 即

$\forall\bar{h}\in\mathbb{C}$, 若 $Re(\bar{h})<0$, 则有 (1.26) 的根 $\left|z_j(\bar{h})\right|<1$.

这样若 $|z|>1$ 为 (1.11) 的根, 那么 $Re(\bar{h})=Re\left(\frac{\rho(z)}{\sigma(z)}\right)\geq 0$.

设 $|z_1|>1$ 为 $\sigma(z)=0$ 的根, 由 $\rho(z)$ 与 $\sigma(z)$ 无公因子, 即 $\rho(z_1)\neq 0$. 否则 z_1 为(1.26)的根, $\{y_n=z_1^n\}$ 为解 (不依赖于 h), 自然无相容性

A 稳定的线性多步法

这样在 z_1 的一个邻域 $\Delta = \{|z| > 1, |z - z_1| < \delta\}$ 内有 $m \in \mathbb{N}$ *s.t.* : (Laurent 展开)$\frac{\rho(z)}{\sigma(z)} \sim C(z - z_1)^{-m}$.

必有 $\xi \in \Delta$, 使得 $Re(\frac{\rho(\xi)}{\sigma(\xi)}) < 0$, 令 $\bar{h} = \frac{\rho(\xi)}{\sigma(\xi)}$, 那么 ξ 就是 (1.26) 的根，就与前面蓝色字体矛盾了.

因此 $|z| > 1$, $\frac{\rho(z)}{\sigma(z)}$ 为正则 (即$\sigma(z) \neq 0$) 的且有非负实部.

"$\Longleftarrow$" 反过来, 设 $|z| > 1$, $\frac{\rho(z)}{\sigma(z)}$ 为正则 (即$\sigma(z) \neq 0$) 的且有非负实部. 那么 $Re(\bar{h}) < 0$ 时, 相应的根 $|z_j(\bar{h})| \leq 1$.

同样由 $\rho(z)$ 与 $\sigma(z)$ 无公因子, 有此时 $\sigma(z_j) \neq 0$ (否则也有 $\rho(z_j) = 0$, 矛盾) 即在这些 z_j 上, $\rho(z)/\sigma(z)$ 是正则的. 若 $|z_j(\bar{h})| = 1$, 由正则性也有 $Re(\frac{\rho(z_j)}{\sigma(z_j)}) \geq 0$. 因此当 $Re(\bar{h}) < 0$ 时, 都有 $\left|z_j(\bar{h})\right| < 1$. 即方法 A 稳定. $\triangleright$

A 稳定的线性多步法

注 1.1

由上面定理可知，若 k 步法 (1.11) 是 A 稳定的，则 $\sigma(z)$ 的根 σ_j 均满足 $|\sigma_j| \leq 1,\ j=1,\cdots,k$. 若令 $\varphi(z) = Re\left(\frac{\rho(z)}{\sigma(z)}\right)$，则

(1.29) $$\forall\theta \in \mathbb{R}, \quad \varphi(e^{i\theta}) \geq 0.$$

注 1.2

由此可得：显式格式 (包括多步法和单步法) 不可能是 A 稳定的.
因为此时 $\beta_k = 0$，必然有 $k \geq m \geq 1$ s.t.

当 $|z| \to +\infty$ 时，$\sigma(z) \sim az^{k-m}$，且 $a \neq 0$.

而 $|z| \to +\infty$ 时，$\rho(z) \sim \alpha_k z^k$. 这样有 $\frac{\rho(z)}{\sigma(z)} \sim bz^m$，当 $|z| \to +\infty$.

这自然与 $|z| > 1$ 时，$Re\left(\frac{\rho(z)}{\sigma(z)}\right) \geq 0$ 矛盾。

A 稳定的线性多步法

设 $\sigma(z)=0$ 的根 σ_j 满足

(1.30) $$|\sigma_j|<1,\quad j=1,\cdots,k.$$

定理 1.5

若 (1.29)–(1.30) 成立，则多步法 (1.11) 是 A-稳定的.

定理 1.6 (关于 $A(\alpha)$ 稳定有以下结论)

- 显式格式不可能是 $A(0)$ 稳定的 (自然也不可能是 $A(\alpha)$ 稳定的)
- 只有一种 $p=k+1$ 阶 $A(0)$ 稳定的 k 步法, 即梯形法;
- $\forall\alpha\in[0,\frac{\pi}{2})$ 及 $k\leq 4$, 存在 $A(\alpha)$ 稳定的 k 步 k 阶线性多步法.

$A(\alpha)$ 稳定的线性多步法

定理 1.7 ($A(\alpha)$ 稳定的充分条件)

k 步法 (1.11)是 $A(\alpha)$ 稳定的，如果下列条件成立

1. 多步法公式 (1.11) 满足根条件;
2. $\beta_k \neq 0$ (即隐式格式), $\alpha_k/\beta_k > 0$;
3. $\sigma(z) = 0$ 的根 $|\sigma_j| < 1$, $j = 1, \cdots, k$;
4. $\mathrm{Im}(\psi(e^{i\theta})) \geq 0$, $\forall\theta \in [0, \pi]$, 其中 $\psi(z) = \frac{\rho(z)}{\sigma(z)}$;
5. $\mathrm{Im}\left(\psi(e^{i\theta})\right) + \tan\alpha\,\mathrm{Re}\left(\psi(e^{i\theta})\right) \geq 0$, $\forall\theta \in [0, \pi]$;

刚性稳定的线性多步法

定理 1.8 (刚性稳定的充要条件)

收敛的线性多步法 (1.11) 是刚性稳定的充要条件为

1. 该方法是 A_0 稳定的 *(绝对稳定域包含负实轴);*
2. 多项式 $\rho(z)/(z-1)$ 的根模都小于 *1;*
3. $\sigma(z)$ 的模为 *1* 的根均为单根*;*
4. 若 $\sigma(z_1)=0$ 且 $|z_1|=1$, 则 $\dfrac{\rho(z_1)}{z_1\sigma'(z_1)}$ 为正实数*.*

下面我们介绍常用的用于求解刚性方程的多步法.

向后差分线性多步法

事实上，解初值问题(1.1)的向后差分格式

$$\sum_{j=1}^{k}\frac{1}{j}\nabla^j y_{n+k}=hf_{n+k},\quad \text{其中}\quad \nabla y_n=y_n-y_{n-1}, \tag{1.31}$$

很早就有人使用, 但由于其只是 k 阶精度, 故后来不常用.

但近年来人们发现其适用于刚性方程组, 于是又重新启用.

我们也可将其改写成常用形式:

$$\sum_{j=0}^{k}\alpha_j y_{n+j}=h\beta_k f_{n+k},\quad \text{取}\alpha_k=1,\ \beta_k\neq 0. \tag{1.32}$$

向后差分线性多步法

可以用 Taylor 展开的办法定出系数 $\alpha_0, \cdots, \alpha_{k-1}$ 及 β_k:

$$
(1.33) \quad \begin{cases} \alpha_0 + \alpha_1 + \cdots + \alpha_{k-1} + 1 = 0 \\ \alpha_1 + 2\alpha_2 + \cdots + (k-1)\alpha_{k-1} + k = \beta_k \\ \vdots \\ \frac{1}{k!}[\alpha_1 + 2^k\alpha_2 + \cdots + (k-1)^k\alpha_{k-1} + k^k] = \frac{k^{k-1}}{(k-1)!}\beta_k \end{cases}
$$

解以上方程组可得到所需系数. 如

$k=1$ 时即为后退 Euler 法: $y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1})$.

$k=2$ 时可得 $\alpha_1 = -\frac{4}{3}$, $\alpha_0 = \frac{1}{3}$, $\beta_2 = \frac{2}{3}$, 即格式为

$$
y_{n+2} = \frac{4}{3}y_{n+1} - \frac{1}{3}y_n + \frac{2}{3}hf_{n+2}.
$$

向后差分线性多步法

可以证明 $k \le 2$ 时，上面 (1.31) 给出的向后差分法为 A-稳定的;
$3 \le k \le 6$ 时，(1.31) 给出的多步法为 $A(\alpha)$-稳定和刚性稳定的;

$7 \le k$ 时，$\rho(z)$ 不再满足根条件，因此不能用.

对于 $k \ge 2$ 时，还可以将 (1.32) 改进为

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n+j} = h\left(\beta_k f_{n+k} + \beta_{k-1} f_{n+k-1} + \beta_{k-2} f_{n+k-2}\right). \tag{1.34}$$

其中 $\alpha_k = 1$. 一般我们还要求

1. 当 $h\mu \to -\infty$ 时，(1.34) 是绝对稳定的;
2. 选取 α_j, β_j 使得(1.34) 是k 阶相容且刚性稳定的.

向后差分线性多步法

显然上面的 (1.34) 有更多参数, 所以它可比 (1.32) 具有更大绝对稳定域.

例 1.11

对于 $k=2$ 的 (1.34) 式, 有

$$\alpha_2=1,\ \alpha_1=-\frac{1}{2},\ \alpha_0=-\frac{1}{2},\ \beta_2=\frac{5}{4},\ \beta_1=-\frac{3}{4},\ \beta_0=1.$$

此时它为 A 稳定的.

$3\le k\le 7$ 时, 它也是 $A(\alpha)$ 稳定和刚性稳定的, 且稳定域比 (1.32) 更好.

求解刚性问题的隐式 Runge-Kutta 法

前面已经引入了基于 Gauss-Legendre 积分法推导出来的 m 级 $2m$ 阶的隐式 R-K 格式. 当然我们也可以基于其他的 Gauss 型求积公式得到其他一些差分格式. 这里我们主要来分析一下隐式 R-K 格式是否适于求解刚性问题.

回顾一下隐式 R-K 方法

$$(1.35)\quad \begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\sum_{j=1}^{m} c_j K_j, \\ K_j = f(t_n + a_j h, y_n + h\sum_{l=1}^{m} b_{jl} K_l), \quad j = 1, \cdots, m \end{cases}$$

若将之用于试验方程 $y' = \mu y,\ \mathrm{Re}(\mu) < 0$, 有

$$K_j = \mu y_n + h\mu \sum_{l=1}^{k} b_{jl} K_l.$$

解刚性问题的隐式 Runge-Kutta 法

令 $\bar{h}=h\mu$, 引入矩阵记号:

$\vec{c}=(c_1,\cdots,c_m)^T$, $\vec{K}=(K_1,\cdots,K_m)^T$, $\vec{e}=(1,\cdots,1)^T\in\mathbb{R}^m$,

$B=(b_{ij})\in\mathbb{R}^{m\times m}$, 并假设 $(I-\bar{h}B)$ 可逆, 得

$$(1.36)\qquad \begin{cases} y_{n+1}-\bar{h}\,\vec{c}^{\,T}\vec{K} = y_n \\ (I-\bar{h}B)\,\vec{K} = y_n\,\vec{e} \end{cases}$$

$$(1.37)\qquad y_{n+1}=[1+\bar{h}\,\vec{c}^{\,T}(I-\bar{h}B)^{-1}\,\vec{e}]y_n\equiv R(\bar{h})y_n.$$

在方程组 (1.36) 中将 $y_{n+1},\vec{K}$ 看成未知, 由 Cramer's 法则可得

$$y_{n+1}=y_n\begin{vmatrix}1 & -\bar{h}\,\vec{c}^{\,T}\\ \vec{e} & I-\bar{h}B\end{vmatrix}\Bigg/\begin{vmatrix}1 & -\bar{h}\,\vec{c}^{\,T}\\ 0 & I-\bar{h}B\end{vmatrix}=y_n\frac{\det(I-\bar{h}B+\bar{h}\,\vec{e}\,\vec{c}^{\,T})}{\det(I-\bar{h}B)}$$

解刚性问题的隐式 Runge-Kutta 法

即 m 级 $2m$ 阶隐式 R-K 方法的稳定性函数 (增长因子)为

$$R(z) = \frac{\det(I - \bar{h}B + \bar{h}\,\vec{e}\,\vec{c}^{\,T})}{\det(I - \bar{h}B)}.$$

另一方面, 令 $R_{m,n}(z) = \dfrac{P_m(z)}{Q_n(z)}$ 为 e^z 的 (m, n) Padé 逼近, 即

$$e^z - R_{m,n}(z) = \mathcal{O}(|z|^{m+n+1}), \quad 当 |z| \to 0.$$

可以证明: m 级 $2m$ 阶隐式 R-K 方法的稳定性函数 $R(z) = R_{m,m}(z)$, 即 (m, m) 阶 Padé 逼近.

Ehle 1973 年证明了对于 e^z 的 (m, n) 阶 Padé 逼近 $R_{m,n}(z)$, 当 $n - 2 \le m \le n$ 时, 在 $Re(z) < 0$ 时都有 $|R_{m,n}(z)| < 1$.
即证明了基于 Gauss 求积公式导出的隐式 R-K 格式是 A 稳定的!

对角隐式、半隐式 Runge-Kutta 法

为了避免求解高维非线性方程组 (注意：假如原来就是 r 维方程组，用 m 级的 R-K 方法求解，计算 K_j 就需要求解 mr 维的非线性方程组) 人们又发展了一些对角隐式和半隐式的 R-K 方法:

所谓对角隐式 R-K 方法，也就是矩阵 B 为下三角阵，这样每一个积分步计算 K_j 只需要解 m 个 r 维的方程组:

$$K_j = f(t_n + a_j h, y_n + h\sum_{l=1}^{j} b_{jl}K_l), \quad j = 1, \cdots, m.$$

Norsett 给出了一种 2 级 3 阶的 A 稳定的 R-K 方法 ($\gamma = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{6}$):

$$\vec{a} = (\gamma, 1-\gamma)^T, \quad B = \begin{pmatrix} \gamma & 0 \\ 1-2\gamma & \gamma \end{pmatrix}, \quad \vec{c} = (\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2})^T.$$

该方法为 2 级 3 阶 A 稳定格式，因为 $R(z) = \frac{1+(1-2\gamma)z+(1/2-2\gamma+\gamma^2)z^2}{(1-\gamma z)^2}$.

对角隐式、半隐式 Runge-Kutta 法

Rosenbrok, Haines 提出了一种半隐式 R-K 方法:

对 $y' = f(y),\ y, f \in \mathbb{R}^r$, 构造方法如下:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^{m} c_j K_j,$$

$$K_j = f(y_n + h \sum_{l=1}^{j-1} \alpha_{jl} K_l) + d_j h \cdot J(y_n + h \sum_{l=1}^{j-1} \beta_{jl} K_l) \cdot K_j.$$

这里 $J(y) = \frac{\partial f}{\partial y}$ 为 $f(y)$ 之 Jiacobi 矩阵. 可看到这里关于 K_j 的方程组是线性方程组, 易于求解.

$m = 2$ 时, 若要求为 $p = 2$ 阶方法, 可用 Taylor 展开定出系数

可取 $c_1 = 0, c_2 = 1, \alpha_{21} = 0, d_1 = d_2 = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}, \beta_{21} = \frac{\sqrt{2}-1}{2}$.

此时有 $R(z) = \frac{1+(\sqrt{2}-1)z}{1+(\sqrt{2}-2)z+(\frac{3}{2}-\sqrt{2})z^2}$.

可以看到此方法是 L 稳定的方法（自然也是 A 稳定的）.

目录

Hamilton 系统

从现代物理看，一切真实的、无耗散 (耗散效应可以忽略不计) 的物理过程都可以表达为 Hamilton 系统形式 (无论是经典力学还是量子力学). Hamilton 体系出现于许多学科领域，如流体力学、弹性力学、天体力学、几何光学、等离子体物理和最优控制等. 因此可以说，研究 Hamilton 系统的数值计算方法具有重要意义.

经典的常微分方程数值解法 (例如 Runge-Kutta 方法) 一般不适用于这类问题的计算. 这主要是因为这些算法都是耗散型方法, 会导致相应的哈密尔顿系统总能量随时间呈线性变化 (因为近似计算会使能量误差线性累积), 从而导致对系统长期演化性态研究的失败.

Hamilton 力学的研究基础是辛几何. 辛几何的历史可以追溯到十九世纪，英国天文学家 Hamilton 引入广义坐标和广义动量来表示系统能量，即 Hamilton 函数。

Hamilton 系统

对于 n 个自由度系统，n 个广义坐标和 n 个广义动量张成 $2n$ 维相空间，从现代观点看，这就是一种辛几何学。我国冯康院士 1984 年注意到辛几何在数值分析中的应用，并提出了辛算法，从而开创了哈密尔顿力学的新的计算方法研究.

设 $H(p_1,\cdots,p_n,q_1,\cdots,q_n)$ 是关于 $2n$ 个自变量 $\{p_j,q_j\}_{j=1}^n$ 的可微函数. 其中 $p_j=p_j(t)$, $q_j=q_j(t)$. 则 Hamilton 方程一般写成

$$(1.38)\qquad \begin{cases} \dfrac{d\mathbf{p}}{dt} = -\dfrac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p},\mathbf{q}), & \mathbf{p}(0)=\mathbf{p}_0, \\ \dfrac{d\mathbf{q}}{dt} = \dfrac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p},\mathbf{q}), & \mathbf{q}(0)=\mathbf{q}_0. \end{cases}$$

其中 $\mathbf{p}=(p_1,\cdots,p_n)^T,\mathbf{q}=(q_1,\cdots,q_n)^T\in\mathbb{R}^n$.

$H(\mathbf{p},\mathbf{q})$ 即称为系统的Hamilton 函数.

Hamilton 系统

若记 $\mathbf{z} = \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}$, $J_{2n} = \begin{pmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2n\times 2n}$.

其中 I_n 为 n 阶单位矩阵. 那么有

$$\dot{\mathbf{z}} \equiv \frac{d\mathbf{z}}{dt} = J_{2n}^{-1}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}}, \quad \mathbf{z}(0) = \mathbf{z}_0. \tag{1.39}$$

这里 $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}}$ 为所谓的 Jacobi 矩阵. 易见 J_{2n} 有如下性质:

定理 1.9

1. $J_{2n}^{-1} = J_{2n}^T = -J_{2n}$;
2. $\forall v \in \mathbb{R}^{2n}$, $v^T J_{2n} v = 0$;
3. 若 $A \in \mathbb{R}^{2n\times 2n}$ 为对称阵, $B = J_{2n}A$, 则 $B^T J_{2n} + J_{2n}B = 0$.

欧氏几何与辛几何的差别

欧氏几何是研究“长度”的几何学，辛几何则是研究“有向面积”的几何学.

我们知道欧式空间中的内积定义了长度、正交概念. 欧氏空间 $\mathbb{R}^n = \{\mathbf{x} = (x_1, \cdots, x_n)^T\}$ 的欧几里得结构取决于双线性非退化内积

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^T I_n \mathbf{y}.$$

当 $\mathbf{x} \neq 0$ 时, $(\mathbf{x}, \mathbf{x})$ 恒正, 即可引入长度的概念 $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}$. 保持内积 (即长度) 不变 $\|A\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|$, 即满足 $A^T A = I_n$ 的线性算子 A 组成一个正交群.

欧氏空间的正交基 $\{\mathbf{e}_1, \cdots, \mathbf{e}_n\}$ 满足 $(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \delta_{ij}$. 空间中任一集合 V 均有其正交补集 $V^\perp = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0, \forall \mathbf{y} \in V\}$.

辛几何、辛内积与辛矩阵

辛几何时相空间中的几何学，它取决于一个双线性反对称的非退化内积——在相空间 $\mathbb{R}^{2n}$ 上定义的辛内积:

$$\forall \mathbf{x} = (x_1, \cdots, x_{2n})^T, \mathbf{y} = (y_1, \cdots, y_{2n})^T \in \mathbb{R}^{2n}$$

$$[\mathbf{x}, \mathbf{y}] = (\mathbf{x}, J_{2n}\mathbf{y}) = \mathbf{x}^T J_{2n}\mathbf{y} = \sum_{i=1}^{n} (x_i y_{n+i} - x_{n+i} y_i)\,. \tag{1.40}$$

$n = 1$ 时恰好为 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T$ 与 $\mathbf{y} = (y_1, y_2)^T$ 两个向量张成的平行四边形的有向面积.

辛内积具有反对称性: $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{2n}, [\mathbf{x}, \mathbf{x}] = 0$. 因此不能由辛内积定义长度的概念, 这是与欧氏几何的本质差别.

定义 1.13 (辛矩阵)

称一个 $2n$ 阶的实方阵 S 为辛矩阵，若 $S^T J_{2n} S = J_{2n}$.

辛几何正交基与辛变换

辛几何空间的正交基 $\{e_1, e_2, \cdots, e_n, e_{n+1}, \cdots, e_{2n}\}$ 满足

$$[e_i, e_j] = [e_{n+i}, e_{n+j}] = 0, \quad [e_i, e_{n+j}] = [e_{n+j}, e_i] = 0, \quad 1 \leq i, j \leq n.$$

此外，对于任何集合 $V \subset \mathbb{R}^{2n}$，存在斜交补集

$$V^\top = \{x \in \mathbb{R}^{2n} | [x, y] = 0, \ \forall y \in V \subset \mathbb{R}^{2n}\}.$$

定义 1.14 (对一个线性变换 $S : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}^{2n}$)

称 S 为辛变换如果它保持辛内积不变, 即 $[S\mathbf{x}, S\mathbf{y}] = [\mathbf{x}, \mathbf{y}]$.

易见 S 为辛变换当且仅当 $S^T J_{2n} S = J_{2n}$, 即 S 为辛矩阵.

由于奇数维空间不存在非退化的反对称矩阵，因此辛空间一定是偶数维空间。

辛结构与辛群

定义 1.15 (辛结构)

设 V 是定义在实数域上的线性空间，在 $V \times V$ 上定义的二元运算 $\omega : V \times V \to \mathbb{R}$ 满足以下性质

1. 双线性性: $\omega(\lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2, y) = \lambda_1 \omega(x_1, y) + \lambda_2 \omega(x_2, y)$, $\omega(x, \lambda_1 y_1 + \lambda_2 y_2) = \lambda_1 \omega(x, y_1) + \lambda_2 \omega(x, y_2)$;
2. 非退化性: $\forall x \in V$, 若 $\omega(x, y) = 0$, $\forall y \in V$, 则 $x \equiv 0$;
3. 反对称性: $\forall x, y \in V, \omega(x, y) = -\omega(y, x)$.

则称 (V, ω) 为辛空间，ω 称为一个辛映射或辛结构.

所有辛矩阵构成一个群，我们称之为辛群，用符号 $Sp(2n)$ 来表示。

定理 1.10

如果 $S \in Sp(2n)$, 则 *(i)* $\det(S) = 1$; *(ii)* $SJ_{2n}S^T = J_{2n}$; *(iii)* $S^{-1} = -J_{2n}S^TJ_{2n} = J_{2n}^{-1}S^TJ_{2n}$.

无穷小辛矩阵

定义 1.16 (无穷小辛矩阵)

称一个 $2n$ 阶的实方阵 SB 为无穷小辛矩阵，若

$$B^T J_{2n} + J_{2n} B = 0.$$

所有无穷小辛矩阵用符号 $sp(2n)$ 来表示.

引理 1.3

矩阵 B 是无穷小辛矩阵当且仅当 $B = J_{2n}A$, 其中 A 是对称矩阵.

定理 1.11

如果 $B \in sp(2n)$, 则 $\exp(B) \in Sp(2n)$.

定理 1.12

如果 $B \in sp(2n)$, 而且 $|I_{2n} + B| \neq 0$, 则有

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

此时称 F 是 B 的*Cayley* 变换.

线性 Hamilton 系统的辛格式

任何时间发展问题的差分格式，都可看成前一时刻到下一时刻的映射. 若该映射的 Jiacobi 矩阵为辛矩阵，则称该格式为辛格式. 我们先来看线性 Hamilton 系统情形，即 Hamiltonian 为二次函数

$$H(\mathbf{z}) = \frac{1}{2}\mathbf{z}^T S\mathbf{z}, \quad 其中 S^T = S. \tag{1.41}$$

这时 Hamilton 系统形式为

$$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = B\mathbf{z}, \quad B = J_{2n}^{-1}S. \tag{1.42}$$

显然该问题的解为

$$\mathbf{z}(t) = \exp(tB)\cdot\mathbf{z}(0). \tag{1.43}$$

我们考虑用一种差分方法来求解 (1.42)

$$\mathbf{z}_{n+1} = F(\mathbf{z}_n; h), \quad h \text{ 为时间步长.} \tag{1.44}$$

线性 Hamilton 系统的辛格式

如果 $\dfrac{\partial F}{\partial \mathbf{z}_n}$ 为辛矩阵, 按照前面的定义称该算法为辛算法.

从上面解的结构 (1.43) 和算法 (1.44) 的对比来看, 如果 $F(\mathbf{z}_n; h)$ 是 $\exp(hB)\mathbf{z}_n$ 的一个好的近似, 则该算法有可能是好算法, 且可保持原有的辛结构 (即为辛算法).

这样考虑 e^x 的Padé 逼近: $R_{kl}(x) = \dfrac{P_k(x)}{Q_l(x)}$, s.t.

$$e^x - R_{kl}(x) = \mathcal{O}(|x|^{k+l+1}), \quad \text{当} x \to 0 \text{ 时}.$$

这样如果令 $F(\mathbf{z}; h) = R_{kk}(hB)\mathbf{z}_n$, 容易验证

$$\mathbf{z}_{n+1} = \frac{P_k(hB)}{Q_k(hB)}\mathbf{z}_n = \frac{P_k(hB)}{P_k(-hB)}\mathbf{z}_n \quad \text{为辛格式，且具有 } 2k \text{ 阶精度}.$$

其中$P_0(x) = 1$, $P_1(x) = x + 2$, $P_n(x) = 2(2n-1)P_{n-1}(x) + x^2 P_{n-2}(x)$.

线性 Hamilton 系统的辛格式

例 1.12

$k=1$ 时即为中点格式:

$$\mathbf{z}_{n+1}=\left(I-\frac{hB}{2}\right)^{-1}\left(I+\frac{hB}{2}\right)\mathbf{z}_n \Longleftrightarrow \mathbf{z}_{n+1}=\mathbf{z}_n+\frac{hB}{2}(\mathbf{z}_n+\mathbf{z}_{n+1}).$$

此辛格式有二阶精度.

$k=2$ 时, 格式为

$$\mathbf{z}_{n+1}=\left(I-\frac{hB}{2}+\frac{h^2B^2}{12}\right)^{-1}\left(I+\frac{hB}{2}+\frac{h^2B^2}{12}\right)\mathbf{z}_n$$

$$\Longleftrightarrow \mathbf{z}_{n+1}=\mathbf{z}_n+\frac{hB}{2}(\mathbf{z}_n+\mathbf{z}_{n+1})+\frac{h^2B^2}{12}(z_n-z_{n+1}).$$

此辛格式有四阶精度.

非线性 Hamilton 系统的辛格式

推广到非线性 Hamilton 系统情形

(1.45) $$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = J_{2n}^{-1}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}}.$$

可以用上述 Padé 逼近表中对角线上的格式 $(k=l)$ 来类似构造.

例如对于 $k=1$, 有

$$\frac{\mathbf{z}_{n+1}-\mathbf{z}_n}{h} = J_{2n}^{-1}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}}\left(\frac{\mathbf{z}_n+\mathbf{z}_{n+1}}{2}\right)$$

在 h 充分小时为辛格式.

非线性 Hamilton 系统的辛格式

如果 H 是可分的, 即

$$H(\mathbf{p},\mathbf{q})=\phi(\mathbf{p})+\psi(\mathbf{q})\overset{\text{例如}}{=}\frac{1}{2}\mathbf{p}^TU\mathbf{p}+\frac{1}{2}\mathbf{q}^TV\mathbf{q}.$$

其中 $U^T=U, V^T=V$ 且正定，则可构造显式辛格式:

$$\mathbf{p}_{n+1}=\mathbf{p}_n-hV\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}},\quad \mathbf{q}_{n+\frac{3}{2}}=\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}+h\mathbf{p}_{n+1}.$$

这相当于 $\mathbf{z}_{n+1}=F_n^h\mathbf{z}_n$, 其中

$$\mathbf{z}_n=\begin{pmatrix}\mathbf{p}_n\\ \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}\end{pmatrix},\quad F_n^h=\begin{pmatrix}I_n & 0\\ -hU & I_n\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}I_n & -hV\\ 0 & I_n\end{pmatrix}.$$

显然有 F_n^h 为辛矩阵.

辛 Runge-Kutta 格式

对于一般非线性 Hamilton 系统可以构造辛 R-K 格式.

将 Hamilton 系统表示为

$$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{z}), \quad 其中\mathbf{z} = \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{z}) = \begin{pmatrix} -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \\ \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2n} \tag{1.46}$$

考虑如下 m 级 R-K 格式:

$$\begin{cases} \mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{z}_n + \sum_{j=1}^{m} c_j K_j, \\ K_j = \mathbf{f}\left(\mathbf{z}_n + h \sum_{l=1}^{m} b_{jl} K_l\right), \quad j = 1, \cdots, m \end{cases} \tag{1.47}$$

我们有如下定理.

辛 Runge-Kutta 格式

定理 1.13

隐式 *R-K* 方法(1.47)是辛格式，如果

(1.48) $$c_i b_{ij} + c_j b_{ji} = c_i c_j, \quad i, j = 1, \cdots, m$$

或者说 $M \equiv CB + B^T C - \vec{c}\,\vec{c}^T = 0$, 其中 $\vec{c} = (c_1, \cdots, c_m)^T \in \mathbb{R}^m$, $C = diag(c_1, \cdots, c_m)$, $B = (b_{ij}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$.

可以验证, 基于 Gauss 求积公式得到的隐式 R-K 格式均为辛格式!

例 1.13 ($m = 2, p = 4$, 二级四阶 R-K 格式)

$$\begin{cases} \mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{z}_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2), \\ K_1 = \mathbf{f}\big(\mathbf{z}_n + h(\frac{1}{4}K_1 + (\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6})K_2)\big) \\ K_2 = \mathbf{f}\big(\mathbf{z}_n + h((\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6})K_1) + \frac{1}{4}K_2\big) \end{cases}$$

辛 Runge-Kutta 格式

例 1.14

对角隐式 *R-K* 方法也可以是辛格式: $\begin{array}{c|cc} r & r & 0 \\ 1-r & 1-2r & r \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$

取 $r=\frac{1}{4}$ 可以验证满足 (1.48). 这是一个二级二阶格式 (相当于用了两次中点格式). 为了提高精度, 可以采用: $\begin{array}{c|ccc} \frac{r}{2} & \frac{r}{2} & & \\ \frac{3r}{2} & r & \frac{r}{2} & \\ \frac{1}{2}+r & r & r & \frac{1}{2}-r \\ \hline & r & r & 1-2r \end{array}$

其中 r 为三次方程 $6r^3-12r^2+6r-1=0$ 的唯一实根. 这是个三级三阶辛格式.

辛 Runge-Kutta 格式

如果 $H(\mathbf{p},\mathbf{q}) = U(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$ 是可分形式, 可构造显式辛 R-K 法:

例 1.15 (显式四级四阶辛 $R-K$ 格式)

记 $\phi(\mathbf{q}) = -V'(\mathbf{q})$, $\psi(\mathbf{p}) = U'(\mathbf{p})$, $\alpha = \sqrt[3]{2} + \frac{1}{\sqrt[3]{2}}$, 令

$$\begin{aligned}
\widetilde{\mathbf{p}}_1 &= \mathbf{p}_n + hc_1\phi(\mathbf{q}_n), & \widetilde{\mathbf{q}}_1 &= \mathbf{q}_m + hd_1\psi(\widetilde{\mathbf{p}}_1),\\
\widetilde{\mathbf{p}}_2 &= \widetilde{\mathbf{p}}_1 + hc_2\phi(\widetilde{\mathbf{q}}_1), & \widetilde{\mathbf{q}}_2 &= \widetilde{\mathbf{q}}_1 + hd_2\psi(\widetilde{\mathbf{p}}_2),\\
\widetilde{\mathbf{p}}_3 &= \widetilde{\mathbf{p}}_2 + hc_3\phi(\widetilde{\mathbf{q}}_2), & \widetilde{\mathbf{q}}_3 &= \widetilde{\mathbf{q}}_2 + hd_3\psi(\widetilde{\mathbf{p}}_3),\\
\mathbf{p}_{n+1} &= \widetilde{\mathbf{p}}_3 + hc_4\phi(\widetilde{\mathbf{q}}_3), & \mathbf{q}_{n+1} &= \widetilde{\mathbf{q}}_3 + hd_4\psi(\mathbf{p}_{n+1}),
\end{aligned}$$

这里系数 c_i, d_i 满足

$$c_1 = 0,\ c_2 = c_4 = \tfrac{2+\alpha}{3},\ c_3 = -\tfrac{1+2\alpha}{3},$$
$$d_1 = d_4 = \tfrac{2+\alpha}{6},\ d_2 = d_3 = \tfrac{1-\alpha}{6}.$$

辛算法小结

从前面的分析可知，一般情况下，辛格式往往是隐式格式，只有在特殊情形（如可分 Hamilton 系统），利用显、隐交替技术，可以建立本质上是显式计算的辛格式。

冯康院士等人在发展算法的同时，利用线性达布变换的框架构造了所有类型的生成函数与相应的哈密尔顿-雅可比方程。

实践证明，哈密尔顿算法（辛算法）不仅是一类新的数值方法，它们严格保持哈密尔顿系统的辛结构，有限阶辛算法的截断误差也不会导致系统能量发生线性变化，而仅仅是周期变化。这一特征正是人们期待的。特别是对像天体物理中的有关问题进行研究时，由于辛算法能保持连续系统的辛结构，会使得长期演化性态能较真实地反映天体现象。

辛算法在长期跟踪计算中发挥出传统方法无法比拟的优势。