第七章

常微分方程初值问题的数值解法

§7.1 引言

§7.2 欧拉法与梯形法

§7.3 泰勒展开法与龙格–库塔（Runge–Kutta）方法

§7.4 线性多步法

§7.5 数值算例

§7.1 引言

本章着重讨论一阶常微分方程初值问题

$$\begin{cases} y' = \dfrac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

在区间[a,b]上的数值解法。

这些问题多数情况下求不出解析解，只能用近似的方法求解。常用的近似方法有两类。一类称为近似解析法，如级数解法，逐次逼近法等。另一类称为数值解法，它可以给出解在一些离散点上的近似值。

若$f(x,y)$在区域$D=\{a \le x \le b, \ y \in R\}$上连续，且关于$y$满足 李普希兹（Lipschitz）条件, 即存在常数L, 使

$$|f(x,y_1)-f(x,y_2)| \le L|y_1-y_2|,$$

对G内任两个y_1, y_2均成立，其中L是与x，y无 关的常数，则上面的初值问题存在唯一解，且解是连续可微的。

Remark：在$f(x,y)$对y可微的情况下，若偏导数有界，则可取 $L=\max\limits_{(x,y)\in D}\left|\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right|$ ，此时有

$$|f(x,y_1)-f(x,y_2)| = \left|\frac{\partial f(x,\xi)}{\partial y}(y_1-y_2)\right| \le L|y_1-y_2|, \xi\text{介于}y_1\text{与}y_2\text{之间。}$$

此时Lipschitz连续条件显然成立。这是验证该条件的最简便的方法。

引言（续）

常微分方程初值问题的数值解是求上述初值问题的解$y(x)$在区间$[a,b]$中的点列$x_i = x_{i-1} + h_i$（$i = 1, 2, \cdots, n$）上的近似值y_i。以下设h_i不变，记为h-步长 。

初值问题的解析解（理论解）用$y(x_n)$表示,数值解法的精确解用 y_n 表示，并记$f_n=f(x_n,y_n)$,
而 $y'(x_n) = f(x_n, y(x_n))$。

求初值问题的数值解一般是逐步进行的，即计算出y_n之后计算y_{n+1}。

数值解法一般分为：

（1）单步法：在计算y_{n+1}时，只用到x_{n+1} ,x_n和 y_n，即前一步的值。

（2）多步法：计算 y_{n+1} 时，除用到 x_{n+1}, x_n 和 y_n以外，还要用x_{n-p}和 $y_{n-p}(p=1,2,\cdots,k;k>0)$，即前$k$步的值。

单步法和多步法都有显式和隐式方法之分。显式和隐式的单步法可以分别写成：

$$y_{n+1}=y_n+h\phi(x_n,y_n,h) \qquad y_{n+1}=y_n+h\phi(x_n,y_n,y_{n+1},h)$$

对多步法来说，显式和隐式方法具有相同的意义。

§7.2 Euler方法及其改进

重点精讲7.1
显式Euler公式

一、显式Euler公式

设节点为 $x_n = x_0 + nh(n=0,1,2,\cdots)$，欧拉方法的计算公式

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)\ (n=0,1,2,\cdots)$$

这是一种最简单的显式单步方法，该方法可以通过不同的途径获得。

1、差商法

用两点差商公式 $\dfrac{y(x_{n+1})-y(x_n)}{x_{n+1}-x_n}$ 代替导数 $y'(x_n)$，再用 y_n 表示 $y(x_n)$ 的近似值，则得到

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{h} = f(x_n, y_n)(n=0,1,2,\cdots)$$

显式Euler公式（续）

2、Taylor展开法

假设在x_n附近把$y(x)$展成Taylor级数

$$y(x_n+h)=y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2}y''(x_n)+\cdots$$

取h的线性部分,并用y_n表示$y(x_n)$的近似值,得

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)(n=0,1,2,\cdots)$$

3、数值积分法

对微分方程两端从x_n到x_{n+1}积分，得等价的积分方程

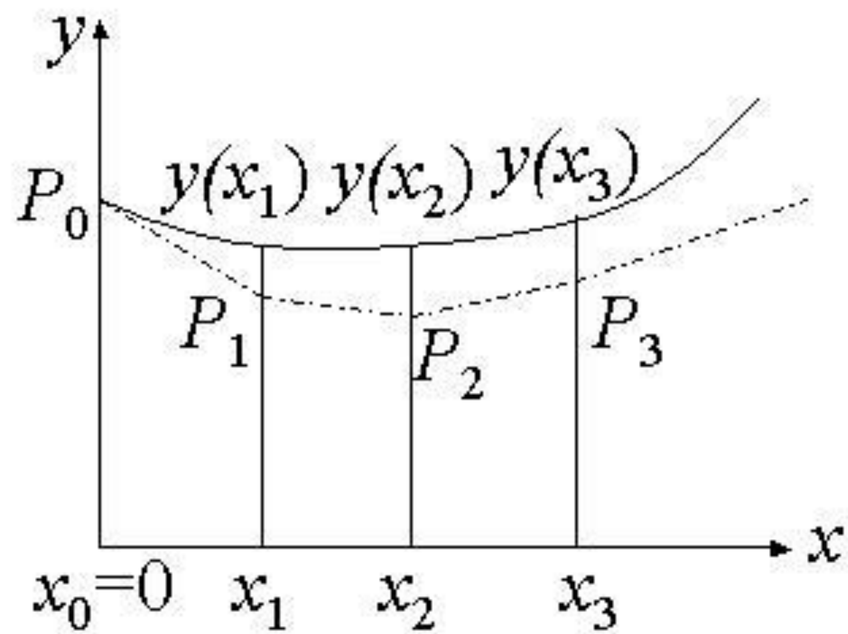
$$y(x_{n+1})=y(x_n)+\int_{x_n}^{x_{n+1}}f(t,y(t))dt$$

对右端的积分部分采用左矩形公式近似即得Euler公式。

Remark：Taylor展开法与数值积分法是构造微分方程数值解的两类主要的方法。

Euler方法的几何意义

Euler方法有明显的几何意义。如右图所示，一阶常微分方程初值问题的解曲线$y(x)$过点$P_0(x_0,y_0)$。从P_0出发以$f(x_0,y_0)$为斜率作一直线段，与$x=x_1$相交于点$P_1(x_1,y_1)$，显然有$y_1=y_0+hf(x_0,y_0)$。



同理，再由P_1出发以$f(x_1,y_1)$为斜率作一直线段，与$x=x_2$相交于点$P_2(x_2,y_2)$，显然有$y_2=y_1+hf(x_1,y_1)$。这样一直做下去，得到一条折线$P_0P_1P_2$……，作为$y(x)$的近似曲线。因此，显式Euler公式又称为Euler折线法。

例题

求解常微分方程初值问题 $\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = y - \dfrac{2x}{y} \\ y(0) = 1 \end{cases}$

在[0,1]上的解，取步长h=0.1。

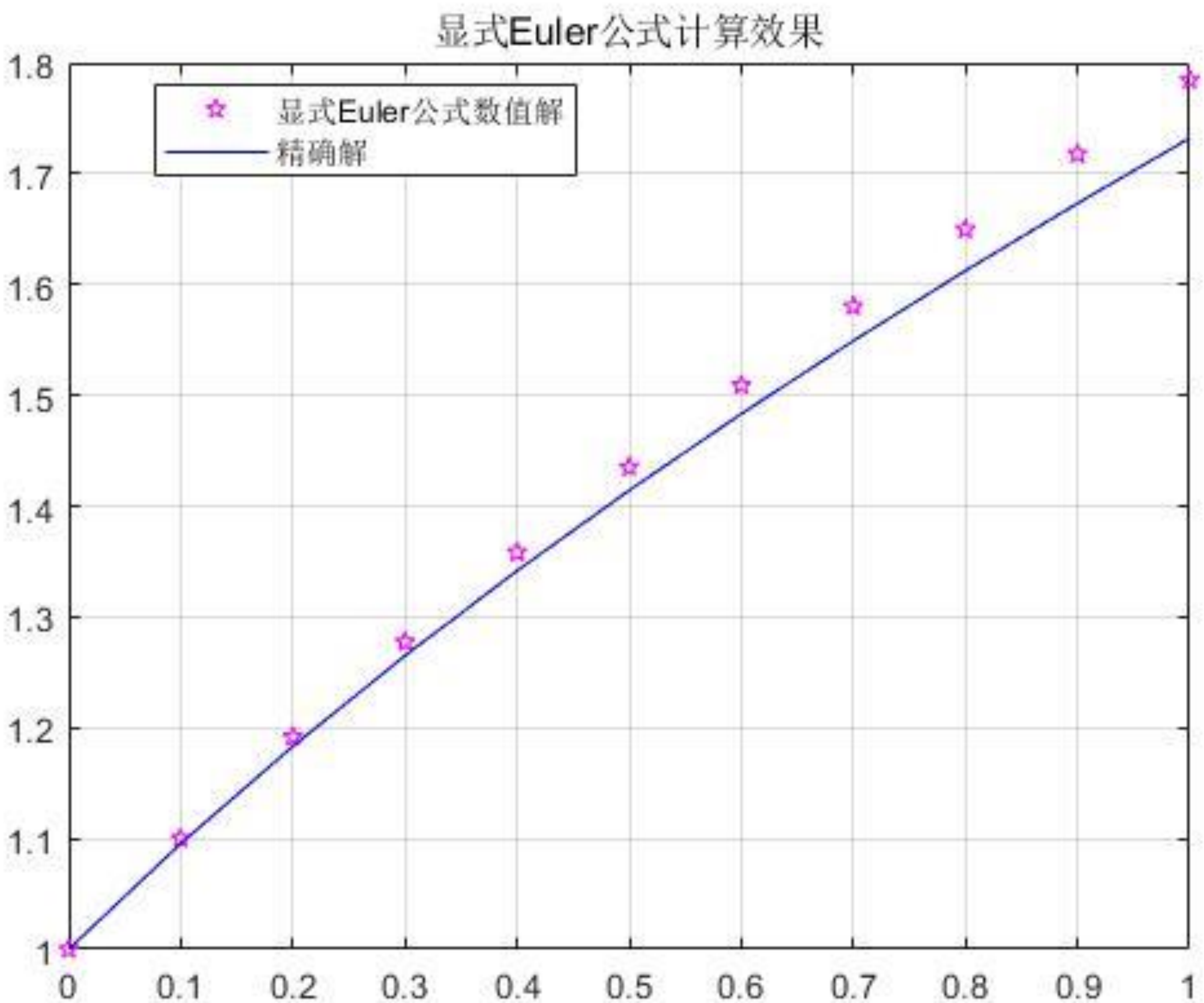
该问题的理论解为：$y(x) = \sqrt{1+2x}$

$$f(x,y) = y - \frac{2x}{y}, x_0 = 0, y_0 = 1, h = 0.1$$

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) = 1 + 0.1(1 - \frac{2*0}{1}) = 1.1$$

$$y_2 = 1.1 + 0.1(1.1 - \frac{2*0.1}{1.1}) \approx 1.1918182$$

显式Euler公式计算效果



二、Euler公式的改进

重点精讲7.2
Euler公式的改进

若在等价积分方程

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t, y(t))dt$$

中将积分用右矩形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\ f(b) - \frac{f'(\eta)}{2}(b-a)^2 \qquad ,(\eta \in (a,b))$$

代入，有

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + hf(x_{n+1}, y(x_{n+1})), n = 0,1,2,\ldots$$

从而得到 $y_{n+1} \approx y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}), n = 0,1,2,\ldots$

上式是一个隐式的单步方法，称为隐式Euler公式或后退的Euler公式。利用此公式，每一步都要把上式作为y_{n+1}的一个方程来求解。从数值积分的误差分析，很难期望隐式Euler公式比显式Euler公式更精确。

隐式Euler公式（续）

通常情况下，隐式Euler公式很难直接求出y_{n+1}的值，故常用迭代法求解。在实际计算时，该公式通常与显式Euler公式结合使用，并由显式Euler公式的结果作为迭代的初始值，从而有如下数值格式

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{(s+1)} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}^{(s)}) \\ n = 1,2,\cdots,N-1 \end{cases}$$

对 $s = 0,1,2,\cdots$ 循环计算，若 $\left|y_{n+1}^{(s+1)} - y_{n+1}^{(s)}\right| < \varepsilon$ （ε为给定的误差限)，则取$y_{n+1}^{(s+1)}$作为y_{n+1}的近似值.

隐式Euler公式（续）

由于$f(x,y)$关于y满足Lipschitz条件，故有

$$\left|y_{n+1}^{(s+1)}-y_{n+1}\right|=h\left|f(x_{n+1},y_{n+1}^{(s)})-f(x_{n+1},y_{n+1})\right|$$
$$\le hL\left|y_{n+1}^{(s)}-y_{n+1}\right|$$

故当 $hL<1$ 时该迭代法收敛到隐式Euler公式的解y_{n+1}，其中L为Lipschitz常数。

梯形公式

为了得到更精确的方法，在等价的积分方程中用梯形公式

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] - \frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \eta \in (a,b)$$

近似积分项，再分别用y_n，y_{n+1}代替$y(x_n)$和$y(x_{n+1})$，即可得到梯形公式：

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})], n = 0,1,2,\cdots$$

该方法也是一种隐式的单步方法。对该方法，

从n＝0开始计算，每步都要求解y_{n+1}的一个方程。一般来说，这是一非线性方程，可迭代计算如下：

$$\begin{cases} y_{n+1}^{[0]} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{[s+1]} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[s]})] \end{cases}, s = 0,1,2,\cdots$$

使用上式时，先用第一式计算出y_{n+1}的近似值 $y_{n+1}^{[0]}$，再用第二式反复进行迭代，得到数列$\left\{y_{n+1}^{[s]}\right\}_{s=0}^{\infty}$，用$\left|y_{n+1}^{[s+1]} - y_{n+1}^{[s]}\right| \le \varepsilon$来控制是否继续进行迭代，其中$\varepsilon$为允许误差。把满足要求的$y_{n+1}^{[s+1]}$作为$y(x_{n+1})$的近似值$y_{n+1}$，类似地可得出$y_{n+2}$，$y_{n+3}$，…。

当$f(x,y)$关于y满足Lipschitz条件时，且步长h满足$\frac{1}{2}hL<1$时，上述迭代过程是收敛的。这是因为：

$$\left|y_{n+1}-y_{n+1}^{[s+1]}\right|=\frac{h}{2}\left|f(x_{n+1},y_{n+1})-f(x_{n+1},y_{n+1}^{[s]})\right|$$

$$\leq\frac{hL}{2}\left|y_{n+1}-y_{n+1}^{[s]}\right|<\left|y_{n+1}-y_{n+1}^{[s]}\right|<\cdots<\left|y_{n+1}-y_{n+1}^{[0]}\right|$$

$$\left|y_{n+1}-y_{n+1}^{[s+1]}\right|\leq\cdots\leq(\frac{hL}{2})^{s+1}\left|y_{n+1}-y_{n+1}^{[0]}\right|\to 0(s\to\infty)$$

即为s趋于∞, $y_{n+1}^{[s]}\to y_{n+1}$。

Euler-梯形预估校正公式

实用中，h 取得较小时, 为了简化计算，梯形公式第二式只迭代一次就结束，得到Euler-梯形预估校正公式：

$$\begin{cases} y_{n+1}^{[0]} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[0]})] \end{cases}$$

其中第一式称为预估算式，第二式称为校正算式。

Euler-梯形预估校正公式（续）

若将Euler-梯形预估校正公式中的第一式带入第二式，得

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n))]$$

Remark：这是一种显式的单步方法。有时为了计算方便，常将上式改写成：

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}(K_1 + K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1) \end{cases}$$

Euler-梯形预估校正公式（续）

例题：用欧拉预—校方法求解初值问题（要求取步长h=0.2，计算$y(1.2)$和$y(1.4)$的近似值：

$$\begin{cases} y' + y + y^2 \sin x = 0 \\ y(1) = 1 \end{cases}$$

解:欧拉预—校格式为:

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)})](n = 0,1,2,\cdots) \end{cases}$$

Euler-梯形预估校正公式（续）

于是有:

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n - 0.2(y_n + y_n^2 \sin x_n) \\ y_{n+1} = y_n - 0.1(y_n + y_n^2 \sin x_n + y_{n+1}^{(0)} + {y_{n+1}^{(0)}}^2 \sin x_{n+1}) \end{cases}$$

由$y(1)=y_0=1$计算得:

$$\begin{cases} y_1^{(0)} = 0.63171 \\ y(1.2) \approx y_1 = 0.715488 \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_2^{(0)} = 0.47696 \\ y(1.4) \approx y_2 = 0.52611 \end{cases}$$

三、单步法的局部截断误差和阶

重点精讲7.3 单步法的局部截断误差和阶

设一般的单步法为：

显式公式： $y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n, y_n, h)$

隐式公式： $y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n, y_n, y_{n+1}, h)$

设y_n为数值方法的精确值，$y(x_n)$为微分方程的精确解。

定义1：$e_n = y(x_n) - y_n$为某一数值方法在x_n处的整体截断误差。

Remark：整体截断误差不仅与x_n这步的计算有关，而且与前面所有点的计算的误差累计有关。为了简化误差分析，我们着重分析计算中的某一步。对一般的显式单步法，有如下定义：

单步法的局部截断误差和阶 （续）

定义2：对单步法，在$y_n = y(x_n)$的假设下，称
$R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\phi(x_n, y(x_n), h)$ 为在x_{n+1}处的局部截断误差。

若设$y_n = y(x_n)$，即第n步及以前各步都没有误差，
则由显式单步法计算一步所得之y_{n+1}与$y(x_{n+1})$之差为：

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = y(x_{n+1}) - [y_n + h\phi(x_n, y_n, h)]$$
$$= y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\phi(x_n, y(x_n), h)$$

即在$y_n = y(x_n)$的假设下，$R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$。

这就是上面定义中称R_{n+1}为“局部”的含义，我们一般用该式作为定义。这里应该注意，R_{n+1}和整体截断误差e_{n+1}是不同的。

单步法的局部截断误差和阶 （续）

定义3：若一个单步方法的局部截断误差为$O(h^{p+1})$，即

$$R_{n+1}=y(x_{n+1})-y(x_n)-h\phi(x,y(x_n),h)=O(h^{p+1})$$

则称该方法为p阶方法（其中p为正整数）。

Remark：由前面的定义可知，若某个单步方法是一种p阶方法，则有$R_{n+1}=O(h^{p+1})$，即p阶方法的局部截断误差为h的p＋1阶。我们往往比较关心R_{n+1}按h展开式的第一项。

定义4：若一个单步方法是一种p阶方法，其局部截断误差可以写成：

$$R_{n+1}=\psi(x_n,y(x_n))h^{p+1}+O(h^{p+2})$$

则$\Psi(x_n,y(x_n))h^{p+1}$称为方法的主局部截断误差，或局部截断误差的主项。

单步法的局部截断误差和阶 （续）

例1：求显式Euler公式的局部截断误差。

$$
\begin{aligned}
R_{n+1} &= y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\phi(x_n, y(x_n), h) \\
&= y(x_{n+1}) - y(x_n) - hf(x_n, y(x_n)) \\
&= y(x_{n+1}) - y(x_n) - hy'(x_n) \\
&= \frac{1}{2}h^2 y''(x_n) + \frac{1}{3!}h^3 y'''(x_n) + \cdots = O(h^2)
\end{aligned}
$$

故显式Euler公式是一阶方法, 局部截断误差为:

$$R_{n+1} = \frac{h^2}{2}y''(x_n) + O(h^3)$$

主局部截断误差为： $\dfrac{h^2}{2}y''(x_n)$ 。

单步法的局部截断误差和阶 （续）

例2：求Euler-梯形预估校正公式

$$\begin{cases} y_{n+1}^{[0]} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[0]})] \end{cases}$$

的局部截断误差。

$$\begin{aligned} R_{n+1} &= y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\phi(x_n, y(x_n), h) \\ &= y(x_{n+1}) - y(x_n) - \frac{h}{2}\left[f(x_n, y(x_n)) + f\left(x_{n+1}, y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))\right)\right] \\ &= y(x_{n+1}) - y\left(x_n\right) - \frac{h}{2}y'(x_n) - \frac{h}{2}f\left(x_n + h, y(x_n) + hy'(x_n)\right) \end{aligned}$$

单步法的局部截断误差和阶 （续）

$$= y(x_{n+1}) - y\left(x_n\right) - \frac{h}{2} y'(x_n)$$

$$- \frac{h}{2}[f(x_n, y(x_n)) + h\frac{\partial f(x_n, y(x_n))}{\partial x} + hy'(x_n)\frac{\partial f(x_n, y(x_n))}{\partial y} + O(h^2)]$$

又由 $y'(x) = f(x, y(x))$ $\quad y''(x) = \frac{\partial f(x, y(x))}{\partial x} + y'(x)\frac{\partial f(x, y(x))}{\partial y}$

故

$$R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y\left(x_n\right) - hy'(x_n) - \frac{h^2}{2} y''(x_n) + O(h^3) = O(h^3)$$

故Euler-梯形预估校正方法为二阶方法。

单步法的局部截断误差和阶 （续）

例3：求隐式Euler公式的局部截断误差。

$$\begin{aligned} R_{n+1} &= y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\phi(x_n, y(x_n), y(x_{n+1}), h) \\ &= y(x_{n+1}) - y(x_n) - hf(x_{n+1}, y(x_{n+1})) \\ &= y(x_{n+1}) - y\left(x_n\right) - hy'(x_{n+1}) \end{aligned}$$

将上式中$y(x_{n+1})$、$y'(x_{n+1})$均在x_n处做Taylor展开，整理得

$$R_{n+1} = -\frac{h^2}{2} y''(x_n) + O(h^3)$$

故隐式Euler公式是一阶方法。

单步法的局部截断误差和阶 （续）

例4：求梯形公式的局部截断误差。

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})]$$

$$R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - \frac{h}{2} f(x_n, y(x_n)) - \frac{h}{2} f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$$

$$= \left(y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{1}{2!} h^2 y''(x_n) + \frac{1}{3!} h^3 y'''(x_n) + O(h^4) \right) - y(x_n)$$

$$- \frac{h}{2} y'(x_n) - \frac{h}{2} \left(y'(x_n) + hy''(x_n) + \frac{1}{2!} h^2 y'''(x_n) + O(h^3) \right)$$

$$= -\frac{h^3}{12} y'''(x_n) + O(h^4)$$

即梯形公式为二阶方法。

§7.3 Runge–Kutta方法

- 问题：利用Taylor级数展开法推导高阶单步的求解常微分方程初值问题的数值方法。

- 从提高截断误差阶的阶数入手。

一、Taylor级数展开法

假定初值问题的解$y(x)$及函数$f(x,y)$是足够充分光滑的，则

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \cdots + \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x_n) + O(h^{p+1})$$

$$= y(x_n) + hf(x_n, y(x_n)) + \frac{h^2}{2!}f'(x_n, y(x_n)) + \cdots + \frac{h^p}{p!}f^{(p-1)}(x_n, y(x_n)) + O(h^{p+1})$$

当n充分小时，略去余项$O(h^{p+1})$，则有p阶计算公式

Taylor 方法（续）

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \dfrac{h^2}{2} f'(x_n, y_n) + \cdots + \dfrac{h^p}{p!} f^{(p-1)}(x_n, y(x_n)) \\ y_0 = \alpha \end{cases}$$

其中，

$$y_n' = f(x_n, y_n)$$

$$y_n'' = f_x(x_n, y_n) + f(x_n, y_n) f_y(x_n, y_n)$$

$$y_n''' = [f_{xx} + 2 f_{xy} f + f^2 f_{yy} + f_y^2 f + f_x f_y](x_n, y_n)$$

$$\vdots$$

上式称为p阶Taylor方法。特别地，当p＝1时，就是Euler公式。当p＝2时，得二阶Taylor方法：

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2}y''_n = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2}[f'_x + ff'_y]_{(x_n, y_n)}$$

当Taylor方法的阶数p取的较大时，需计算$f(x,y)$的高阶导数值，计算量较大。特别当$f(x,y)$较复杂时，$y(x)$的高阶导数会很复杂。因此Taylor方法很少单独使用，但可以用它来启发思路。

例题:用二阶泰勒展开法求初值问题:

$$\begin{cases} y' = x^2 + y^2 \\ y(1) = 1 \end{cases}$$

解:二阶泰勒展开为:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!} y''(x_n) + o(h^3)$$

因为: $y' = x^2 + y^2, y'' = 2x + 2yy' = 2x + 2y(x^2 + y^2),$

代入上式并略去高阶项$O(h^3)$，则得求解公式为:

$$y_{n+1} = y_n + h(x_n^2 + y_n^2) + \frac{h^2}{2}[2x_n + 2y_n(x_n^2 + y_n^2)]$$

由$y(1)=y_0=1$计算得:

$$y(1.25) \approx y_1 = 1.68750$$

$$y(1.50) \approx y_2 = 3.333298$$

二、Runge—Kutta方法

重点精讲7.4
Runge-Kutta方法

Euler公式：$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hk_1 \\ k_1 = f(x_n, y_n) \end{cases}$ $\qquad R_{n+1} = O(h^2)$

Euler-梯形预估校正格式：$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_n + h, y_n + hk_1) \end{cases}$ $\qquad R_{n+1} = O(h^3)$

基本思想：用不同点的函数值作线性组合，构造高阶单步的近似公式，把近似公式和解的Taylor展开式比较，使前面尽可能多的项完全相同。这种方法间接应用Taylor展开的思想，避免了高阶导数计算的困难。

Runge—Kutta方法（续）

一般的Runge-Kutta方法的形式为

$$
\begin{cases}
y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n, y_n, h) \\
\phi(x_n, y_n, h) = \sum_{i=1}^{r} c_i K_i \\
k_1 = f(x_n, y_n) \\
k_i = f\left(x_n + \alpha_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} K_j \right), i = 2, 3, \cdots, r
\end{cases}
$$

其中，α_i，β_{ij}，C_i为常数。选取这些常数的原则是使其截断误差阶尽可能高。

Runge—Kutta方法（续）

下面以二级**Runge—Kutta**公式为例进行具体推导。

对
$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n, y_n, h) \\ \phi(x_n, y_n, h) = c_1K_1 + c_2K_2 \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \alpha_2 h, y_n + h\beta_{21}K_1) \end{cases}$$

要求适当选取系数$c_1, c_2, \alpha_2, \beta_{21}$，使当$y_n = y(x_n)$时，上式的局部截断误差为$O(h^3)$，即成为二阶方法。

Runge—Kutta方法（续）

按照局部截断误差的定义，有

$$
\begin{aligned}
&y(x_{n+1})-y(x_n)-h\phi(x_n,y(x_n),h) \\
&= y(x_{n+1})-y(x_n)-h\left[c_1 y'(x_n)+c_2 f\left(x_n+\alpha_2 h, y(x_n)+h\beta_{21}y'(x_n)\right)\right] \\
&= \left\{y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{1}{2!}h^2 y''(x_n)+\frac{1}{3!}h^3 y'''(x_n)+\cdots\right\}-y(x_n)-c_1 hy'(x_n) \\
&-c_2 h\left\{f(x,y)+\alpha_2 hf_x(x,y)+h\beta_{21}y'(x)f_y(x,y)+\frac{1}{2}(\alpha_2 h)^2 f_{xx}(x,y)\right. \\
&\left.+\alpha_2 h^2\beta_{21}y'(x)f_{xy}(x,y)+\frac{1}{2}\left(h\beta_{21}y'(x)\right)^2 f_{yy}(x,y)+O(h^3)\right\}\Bigg|_{(x_n,y(x_n))}
\end{aligned}
$$

Runge—Kutta方法（续）

$$= (1-c_1-c_2)hy'(x_n)+h^2\left[\frac{1}{2}y''(x)-c_2\alpha_2 f_x(x,y)-c_2\beta_{21}y'(x)f_y(x,y)\right]\Bigg|_{(x_n,y(x_n))}$$

$$+h^3\left[\frac{1}{3!}y'''(x)-c_2\alpha_2^2 f_{xx}(x,y)-c_2\alpha_2\beta_{21}y'(x)f_{xy}(x,y)\right.$$

$$\left.-\frac{1}{2}c_2\beta_{21}^2\left(y'(x)\right)^2 f_{yy}(x,y)\right]\Bigg|_{(x_n,y(x_n))}+O(h^4)$$

$$= (1-c_1-c_2)hy'(x_n)+h^2\left[\left(\frac{1}{2}-c_2\alpha_2\right)f_x+\left(\frac{1}{2}-c_2\beta_{21}\right)ff_y\right]\Bigg|_{(x_n,y(x_n))}$$

$$+h^3\left[\left(\frac{1}{6}-\frac{1}{2}c_2\alpha_2^2\right)f_{xx}+\left(\frac{1}{3}-c_2\alpha_2\beta_{21}\right)ff_{xy}+\left(\frac{1}{6}-\frac{1}{2}c_2\beta_{21}^2\right)f^2 f_{yy}\right.$$

$$\left.+\frac{1}{6}f_y(f_x+ff_y)\right]\Bigg|_{(x_n,y(x_n))}+O(h^4)$$

Runge—Kutta方法（续）

要使上式等于$O(h^3)$，只需满足

$$\begin{cases} 1-c_1-c_2=0 \\ \dfrac{1}{2}-c_2\alpha_2=0 \\ \dfrac{1}{2}-c_2\beta_{21}=0 \end{cases}$$

在上式中有四个未知量，三个方程，故可以得到无穷多组解，也就是可以得到无穷多个二级二阶Runge-Kutta公式。由于是二级方法，从而有$c_2\neq 0$，此时上式可以改写为

$$\begin{cases} c_1=1-c_2 \\ \alpha_2=\beta_{21}=\dfrac{1}{2c_2} \end{cases}$$

在上述方程中，选取不同的c_2，即可获得不同的二级二阶Runge-Kutta方法。常用的二阶Runge-Kutta方法有：

Runge—Kutta方法（续）

① $c_1 = c_2 = \frac{1}{2}, \alpha_2 = \beta_{21} = 1$

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

Euler-梯形预估校正格式

② $c_1 = 0, c_2 = 1, \alpha_2 = \beta_{21} = \frac{1}{2}$

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hK_2 \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) \end{cases}$$

中（间）点公式

Runge—Kutta方法（续）

③ $c_1=\dfrac{1}{4}, c_2=\dfrac{3}{4}, \alpha_2=\beta_{21}=\dfrac{2}{3}$

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+\dfrac{h}{4}(K_1+3K_2) \\ K_1=f(x_n,y_n) \\ K_2=f(x_n+\dfrac{2}{3}h, y_n+\dfrac{2}{3}hK_1) \end{cases}$$

二阶Heun（休恩）方法

此时可以论证：$\dfrac{1}{6}-\dfrac{1}{2}\alpha_2^2c_2=0,\ \dfrac{1}{3}-\alpha_2\beta_{21}c_2=0$

此时 $R_{n,h}=\dfrac{h^3}{6}f_y(f_x+ff_y)\Big|_{(x_n,y_n)}+O(h^4)$ ，即二阶Heun方法是局部截断误差项数最少的方法且二级Runge-Kutta方法不可能达到三阶。

Runge—Kutta方法（续）

用类似的方法可以研究其它级的Runge-Kutta方法。常用的其它级的Runge-Kutta方法有：

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{4}(K_1 + 3K_3) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \dfrac{h}{3}, y_n + \dfrac{1}{3}hK_1) \\ K_3 = f(x_n + \dfrac{2h}{3}, y_n + \dfrac{2}{3}hK_2) \end{cases}$$

三阶Heun（休恩）公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \dfrac{h}{2}, y_n + \dfrac{1}{2}hK_1) \\ K_3 = f(x_n + h, y_n - hK_1 + 2hK_2) \end{cases}$$

三阶Kutta公式

Runge—Kutta方法（续）

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}hK_1) \\ K_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}hK_2) \\ K_4 = f(x_n + h, y_n + hK_3) \end{cases}$$

标准（经典）四阶Runge-Kutta公式

基尔（Gill）公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}[K_1 + (2-\sqrt{2})K_2 + (2+\sqrt{2})K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}hK_1) \\ K_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{\sqrt{2}-1}{2}hK_1 + \frac{2-\sqrt{2}}{2}hK_2) \\ K_4 = f(x_n + h, y_n - \frac{\sqrt{2}}{2}hK_2 + (1+\frac{\sqrt{2}}{2})hK_3) \end{cases}$$

Runge-Kutta 方法(续)

- Remark1：我们可以构造无穷多个二级R-K方法，这些方法的截断误差均为$O(h^3)$,即都是二阶方法。其中二阶Heun方法是截断误差项数最少，且允许f任意变化的情况下截断误差最小的二阶方法。
- Remark2：二级R-K方法不可能达到三阶。
- Remark3：同样可构造其他阶的R-K方法，它们都有无穷多组解，且三级R-K方法阶数不超过3，四级R-K方法阶数不超过4。
- Remark4：更高阶的方法由于计算量较大，一般不再采用。

Runge-Kutta 方法(续)

关于R-K方法计算量的讨论

二阶R-K方法需计算两个函数值，四阶R-K方法需计算四个函数值，但精度要比二阶方法高出两阶。因此，要达到同样的精度，用低阶方法需步长取得比较小，但若用高阶方法则可以将步长取得大一些，从而降低计算量。

三、单步法的收敛性与稳定性

定义：对于初值问题，如果一个单步显式方法产生近似解对于任一固定的 $x\in[x_0,b], x=x_0+nh$,均有 $\lim\limits_{h\to 0} y_n=y(x)$ 则称该单步法是收敛的。

Remark：该定义可类似地应用于单步隐式方法以及后面的线性多步法。从定义可知，若格式收敛，整体截断误差$e_n=y(x_n)-y_n$必然趋于零。

定理（整体截断误差与局部截断误差的关系）：若初值问题的一个单步方法之局部截断误差为 $R_{n+1}=O(h^{p+1}), (p\geq 1)$ 且单步法中函数 $\phi(x,y,h)$ 关于y满足lipschitz条件，则

$$e_{n+1}=y(x_{n+1})-y_{n+1}=O(h^p)$$

稳定性

关于单步法收敛性的概念和收敛性定理都是在计算过程中无任何舍入误差的前提条件下建立的。但实际计算时通常会有舍入误差及其累积。数值求解微分方程的过程是一个递推公式，必须考虑误差积累是否得到控制。

定义1 * 用一个数值方法求解微分方程初值问题时，对给定的步长$h>0$，若在计算y_n时引入误差δ_n（也称扰动），由此引起计算后面的 $y_{n+k}(k=1,2,\cdots)$时的误差按绝对值均不增加，则称这个数值方法是**绝对稳定的**。

设$f(x,y)$关于y满足Lipschitz条件，我们总是针对模型方程 $y'=\lambda y$进行讨论，其中λ为复常数。

为保证微分方程本身的稳定性，这里假定 $\mathrm{Re}(\lambda)<0$ 。

稳定性（续）

定义1 设步长为$h>0$的单步法用于求解 $y' = \lambda y$ 时，若在计算 y_n时有误差 δ_n，但在计算后面的 $y_m(m>n)$ 中由 δ_n 引起的误差δ_m 满足$|\delta_m|<|\delta_n|(m>n)$，则称单步法对于所用步长$h$和复数 λ 是绝对稳定的。

Remark1：在上面的定义中，可以取小于或等于关系符。取小于号是为了和线性多步法相一致。

Remark2：从上面的定义可知，单步法是否稳定，与模型方程中的复数λ以及所用步长h有关。若对复平面上的某个区域G，当 $\lambda h \in G$ 时，单步法绝对稳定，则称G为单步法的绝对稳定区域，G与实轴的交集为绝对稳定区间。

稳定性（续）

下面考察几个常用公式的稳定性。

①Euler显式公式

将Euler显式公式用于模型方程$y' = \lambda y$，则有

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n = (1+h\lambda)y_n$$

设y_n 有误差 δ_n ，参与运算的量为$\tilde{y}_n = y_n + \delta_n$ ，由此引起的y_{n+1}误差为δ_{n+1}，则实际得到近似y_{n+1}的量为$\tilde{y}_{n+1} = y_{n+1} + \delta_{n+1}$，即 $y_{n+1} + \delta_{n+1} = (1+h\lambda)(y_n + \delta_n)$ 。与前面公式相减，有 $\delta_{n+1} = (1+h\lambda)\delta_n$。要求误差不增加，即 $|\delta_{n+1}| < |\delta_n|$，必须 $\left|\dfrac{\delta_{n+1}}{\delta_n}\right| = |1+h\lambda| < 1$ 。$|1+h\lambda| < 1$ 是保证绝对稳定性对步长h加的限制。当λ为实数时，可以得到用$h\lambda$表示的绝对稳定的区间(–2,0)。

稳定性（续）

②隐式Euler公式

后退的Euler公式用到$y' = \lambda y$ 上，有$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1}$，

故 $\delta_{n+1} = \delta_n + \lambda h \delta_{n+1}$

即 $$\delta_{n+1} = \frac{1}{1-h\lambda}\delta_n$$

令 $$\left|\frac{\delta_{n+1}}{\delta_n}\right| = \frac{1}{|1-h\lambda|} < 1$$

得绝对稳定区域为 $|1-h\lambda| > 1$。

可见，若取λ为实数，则对于任意的h都是绝对稳定的。

③梯形公式

梯形公式用到 $y' = \lambda y$ 上，有 $y_{n+1} = y_n + \frac{h\lambda}{2}(y_n + y_{n+1})$

故 $\delta_{n+1} = \delta_n + \frac{h\lambda}{2}(\delta_n + \delta_{n+1})$

即 $$\delta_{n+1} = \left(\frac{1 + \frac{h\lambda}{2}}{1 - \frac{h\lambda}{2}} \right) \delta_n$$

设 $h\lambda = x + iy$

稳定性（续）

由于 $$\left|\frac{\delta_{n+1}}{\delta_n}\right| = \left|\frac{1+\frac{h\lambda}{2}}{1-\frac{h\lambda}{2}}\right| = \left|\frac{2+x+iy}{2-x-iy}\right|$$

$$= \{\frac{(2+x)^2+y^2}{(2-x)^2+y^2}\}^{1/2}$$

$$= \{\frac{4+4x+x^2+y^2}{4-4x+x^2+y^2}\}^{1/2}$$

当x=Re(λh)<0,上式右端总小于1，故梯形法的绝对稳定区域为Re(λh)<0，即左半平面。

④四阶经典R-K方法

四阶经典R-K方法用到 $y'=\lambda y$ 上，有

$$k_1=\lambda y_n \qquad k_2=\lambda(y_n+\frac{1}{2}hk_1)=y_n(\lambda+\frac{1}{2}h\lambda^2)$$

$$k_3=\lambda(y_n+\frac{1}{2}hk_2)=y_n[\lambda+\frac{1}{2}\lambda h(\lambda+\frac{1}{2}\lambda h^2)]$$

$$k_4=\lambda(y_n+hk_3)=y_n[\lambda+\lambda h(\lambda+\frac{1}{2}\lambda h^2+\frac{1}{4}h^2\lambda^3)]$$

因此 $$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4)\ =y_n+\frac{h}{6}y_n\{\lambda+2(\lambda+\frac{1}{2}h\lambda^2)$$

$$+2(\lambda+\frac{1}{2}h\lambda^2+\frac{1}{4}h^2\lambda^3)+(\lambda+h\lambda^2+\frac{1}{2}h^2\lambda^3+\frac{1}{4}h^3\lambda^4)\}$$

$$=y_n\{1+h\lambda+\frac{1}{2}(h\lambda)^2+\frac{1}{6}(h\lambda)^3+\frac{1}{24}(h\lambda)^4\}$$

稳定性（续）

扰动满足 $\delta_{n+1} = \delta_n \{1 + h\lambda + \frac{1}{2}(h\lambda)^2 + \frac{1}{6}(h\lambda)^3 + \frac{1}{24}(h\lambda)^4\}$

令 $\left|\frac{\delta_{n+1}}{\delta_n}\right| < 1$，得四阶经典R－K方法的

绝对稳定区域为

$$\left|1 + h\lambda + \frac{1}{2}(h\lambda)^2 + \frac{1}{6}(h\lambda)^3 + \frac{1}{24}(h\lambda)^4\right| < 1$$

§7.4 线性多步法

线性多步法的**基本思想**：如果充分利用前面多步的信息来预测y_{n+k}，则可以期望获得较高的精度。

前面的R-K方法是增加一些非节点处的函数值的计算来提高单步法的精度的，这样使计算量增加了许多。本节介绍多步法，是在不过分增加计算量的情况下取得较高的计算精度。

线性多步法公式的构造一般用两种方法，即Taylor展开法与数值积分法。

线性多步法的一般形式

$$y_{n+1}=\alpha_0 y_n+\alpha_1 y_{n-1}+\cdots+\alpha_r y_{n-r}+ \\ h(\beta_{-1} f_{n+1}+\beta_0 f_n+\beta_1 f_{n-1}+\cdots+\beta_r f_{n-r})$$

式中 $f_{n-k}=f(x_{n-k},y_{n-k})(k=-1,0,1,\cdots,r),\alpha_i,\beta_j$ 都为实数，且 $|\alpha_r|+|\beta_r|\neq 0$ 。当$\beta_{-1}\neq 0$时上式为隐式方法，当$\beta_{-1}=0$时，上式为显式方法。由于求y_{n+1}用到前面$y_n,y_{n-1},\ldots,y_{n-r}$等$r+1$个值，且关于$y_{n-j}$和$f_{n-j}(j=0,1,2,\ldots,r)$都是线性的，因此称上式为线性$r+1$步方法。

一、用数值积分方法构造线性多步法

重点精讲7.5
线性多步法的数值积分法构造

将$y' = f(x, y(x))$方程两端从 x_{n-k}到x_{n+1} 积分得

$$\begin{cases} y(x_{n+1}) = y(x_{n-k}) + \int_{x_{n-k}}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \qquad (1)$$

对 $F(x) = f(x, y(x))$ 取等距插值节点 $x_{n+1}, x_n, x_{n-1} \cdots x_{n-k}$ ，对应的函数值为 $f(x_{n-k}, y(x_{n-k})), \cdots, f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$。如果$k$取

不同的值，以及$F(x)$取不同的插值多项式近似，由上式就可以推导出不同的线性多步公式。

1. 阿达姆斯(Adams)外插公式

在(1)式中取k=0，并选择x_n,x_{n-1}, x_{n-2},x_{n-3}作为插值节点，作函数$F(x)$的三次插值多项式：

$$L_3(x)=\sum_{i=0}^{3}\left(\prod_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{3}\frac{x-x_{n-j}}{x_{n-i}-x_{n-j}}\right)F(x_{n-i})$$

其插值余项为：

$$R_3(x)=\frac{1}{4!}F^{(4)}(\xi)(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})(x-x_{n-3})$$

$$x_{n-3}\le\xi\le x_n$$

阿达姆斯(Adams)外插公式（续）

把$F(x)=L_3(x)+R_3(x)$代入（1）式，有

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} L_3(x)dx + \int_{x_n}^{x_{n+1}} R_3(x)dx$$

略去上式右端第三项，得

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} L_3(x)dx (n = 3,4,5,\cdots)$$

对于上式积分部分用变量代换$x=x_n+th$，并注意到

$$x_n - x_{n-1} = x_{n-1} - x_{n-2} = x_{n-2} - x_{n-3} = h$$

阿达姆斯(Adams)外插公式（续）

则

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} L_3(x)dx = \int_0^1 [\frac{F(x_n)}{3!}(t+1)(t+2)(t+3) +$$

$$\frac{F(x_{n-1})}{-2} t(t+2)(t+3) +$$

$$\frac{F(x_{n-2})}{2} t(t+1)(t+3) +$$

$$\frac{F(x_{n-3})}{-3} t(t+1)(t+2)]hdt$$

$$= \frac{h}{24}[55F(x_n) - 59F(x_{n-1}) + 37F(x_{n-2}) - 9F(x_{n-3})]$$

阿达姆斯(Adams)外插公式（续）

从而得到线性四步Adams显式公式：

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}[55f(x_n,y_n)-59f(x_{n-1},y_{n-1})+$$

$$37f(x_{n-2},y_{n-2})-9f(x_{n-3},y_{n-3})] \qquad (n=3,4,5,\cdots)$$

其局部截断误差就是数值积分的误差

$$R_n=\int_{x_n}^{x_{n+1}}R_3(x)dx=$$

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}}\frac{1}{4!}F^{(4)}(\xi_n)(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})(x-x_{n-3})dx$$

阿达姆斯(Adams)外插公式（续）

因$(x\text{-}x_n)(x\text{-}x_{n\text{-}1})(x\text{-}x_{n\text{-}2})(x\text{-}x_{n\text{-}3})$在$[x_n,x_{n+1}]$上不变号，并设$F^{(4)}(x)$在$[x_n,x_{n+1}]$上连续，利用积分中值定理，存在$\eta_n\in[x_n,x_{n+1}]$，使得

$$R_n=\frac{1}{4!}F^{(4)}(\eta_n)\int_{x_n}^{x_{n+1}}(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})(x-x_{n-3})dx$$

$$=\frac{251}{720}h^5F^{(4)}(\eta_n)=\frac{251}{720}h^5y^{(5)}(\eta_n)$$

因为插值多项式$L_3(x)$是在$[x_{n-3},x_n]$上作出的，而积分区间为$[x_n,x_{n+1}]$，故上式称为Adams外插公式。

2. 阿达姆斯(Adams)内插公式

若在(1)式中仍取$k=0$，但选择$x_{n+1}, x_n, x_{n-1}, x_{n-2}$作为插值节点，作函数$F(x)$的三次插值多项式。类似于上面的外插公式，有

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}[9f_{n+1}+19f_n-5f_{n-1}+f_{n-2}]$$

$$R_n=-\frac{19}{720}h^5y^{(5)}(\eta_n)$$

该公式也称为Adams内插公式，为三步隐式方法。

3. 阿达姆斯(Adams)预估-校正公式

由于Adams内插公式是隐式方法，故用它做计算需使用迭代法。通常把Adams外插公式与内插公式结合起来使用，先由前者提供初值，再由后者进行修正，即

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + \dfrac{h}{24}[55 f_n - 59 f_{n-1} + 37 f_{n-2} - 9 f_{n-3}] \\ y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + \dfrac{h}{24}[9 f\left(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)}\right) + 19 f_n - 5 f_{n-1} + f_{n-2}] \end{cases}$$

$$(k = 0, 1, 2, \cdots; n = 3, 4, 5, \cdots)$$

阿达姆斯(Adams)预估-校正公式（续）

当 $\left|\frac{3}{8}hL\right| < 1$ 在求解区域内成立时，迭代收敛。

若上式中的第二式只迭代一次，便得到Adams预估-校正格式。

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + \dfrac{h}{24}[55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{24}[9f\left(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)}\right) + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}] \end{cases}$$

$$(n = 3, 4, 5, \cdots)$$

二、用Taylor展开法构造线性多步公式

重点精讲7.6
线性多步法的Taylor展开法构造

Taylor展开法更具一般性。
下面构造线性两步方法

$$y_{n+1}=\alpha_0 y_n+\alpha_1 y_{n-1}+h\left(\beta_{-1} f_{n+1}+\beta_0 f_n+\beta_1 f_{n-1}\right)$$

利用线性多步法局部截断误差的定义，有

$$R_{n+1}=y(x_{n+1})-\sum_{i=0}^{k-1}\alpha_i y(x_{n-i})-h\sum_{i=-1}^{k-1}\beta_i f(x_{n-i},y(x_{n-i}))$$

$$=y(x_{n+1})-\alpha_0 y(x_n)-\alpha_1 y(x_{n-1})-h\beta_{-1}y'(x_{n+1})-h\beta_0 y'(x_n)-h\beta_1 y'(x_{n-1})$$

将上式在x_n处作Taylor展开，并按h的升幂整理排列，得到

用Taylor展开法构造线性多步公式（续）

$$
\begin{aligned}
R_{n+1} &= (1-\alpha_0-\alpha_1)y(x_n) + h(1+\alpha_1-\beta_{-1}-\beta_0-\beta_1)y'(x_n) \\
&\quad + \left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\alpha_1-\beta_{-1}+\beta_1\right)h^2y''(x_n) + \left(\frac{1}{6}+\frac{1}{6}\alpha_1-\frac{1}{2}\beta_{-1}-\frac{1}{2}\beta_1\right)h^3y'''(x_n) \\
&\quad + \left(\frac{1}{24}-\frac{1}{24}\alpha_1-\frac{1}{6}\beta_{-1}+\frac{1}{6}\beta_1\right)h^4y^{(4)}(x_n) \\
&\quad + \left(\frac{1}{120}+\frac{1}{120}\alpha_1-\frac{1}{24}\beta_{-1}-\frac{1}{24}\beta_1\right)h^5y^{(5)}(x_n) + \cdots
\end{aligned}
$$

用Taylor展开法构造线性多步公式（续）

令
$$\begin{cases} \alpha_0 + \alpha_1 = 1 \\ -\alpha_1 + \beta_{-1} + \beta_0 + \beta_1 = 1 \\ \dfrac{1}{2}\alpha_1 + \beta_{-1} - \beta_1 = \dfrac{1}{2} \\ -\dfrac{1}{6}\alpha_1 + \dfrac{1}{2}\beta_{-1} + \dfrac{1}{2}\beta_1 = \dfrac{1}{6} \\ \dfrac{1}{24}\alpha_1 + \dfrac{1}{6}\beta_{-1} - \dfrac{1}{6}\beta_1 = \dfrac{1}{24} \end{cases}$$

求解上述方程组，得出 $\alpha_0,\alpha_1,\beta_{-1},\beta_0,\beta_1$ ，所得到的公式的局部截断误差至少为$O(h^5)$。

用Taylor展开法构造线性多步公式（续）

•求解上述方程组，得出α_0，α_1，β_{-1}，β_0，β_1。所得到的算式的局部截断误差为$O(h^5)$。

上述方程组的解为：$\alpha_0=0$，$\alpha_1=1$，$\beta_{-1}=\beta_1=1/3$，$\beta_0=4/3$,于是得到计算公式为：

$$y_{n+1}=y_{n-1}+\frac{h}{3}(f_{n+1}+4f_n+f_{n-1})$$

上式的截断误差为：

$$R_n=[\frac{1}{120}-(-\frac{1}{120}\alpha_1+\frac{1}{24}\beta_{-1}+\frac{1}{24}\beta_1)]h^5y^{(5)}(x_n)+O(h^6)$$

$$=-\frac{1}{90}h^5y^{(5)}(x_n)+O(h^6)$$

称上式为辛浦生（Simpson）公式，它可由数值积分方法而得到。

用Taylor展开法构造线性多步公式（续）

可以只要求前面的几个方程成立，例如要求前面的四个方程成立时，所得公式的局部截断误差至少为$O(h^4)$。由于此时方程个数少于未知量个数，故此种情形下方程组有无穷多组解。此时方程的解可以写成

$$\alpha_1 = 1 - \alpha_0, \beta_{-1} = \frac{1}{3} + \frac{1}{12}\alpha_0, \beta_0 = \frac{4}{3} - \frac{2}{3}\alpha_0, \beta_1 = \frac{1}{3} - \frac{5}{12}\alpha_0$$

若取$\alpha_0 = -4$，则 $\alpha_1 = 5, \beta_{-1} = 0, \beta_0 = 4, \beta_1 = 2$，从而得到一个线性两步显式公式

$$y_{n+1} = -4y_n + 5y_{n-1} + 2h(2f_n + f_{n-1})$$

用Taylor展开法构造线性多步公式（续）

其局部截断误差为

$$R_{n+1} = -\frac{1}{6} h^4 y^{(4)}(x_n) + O(h^5)$$

需要指出的是，上式不能用数值积分方法得到 。

我们也可以用类似的方法构造其它的线性多步法，如前面的Adams公式等。

三、出发值的计算

使用线性k步法求解初值问题时，需要知道k个出发值$y_0,y_1,\ldots,y_{k-1}$才能进行计算。然而初值问题只提供一个y_n,还有k–1个出发值，需要通过别的方法计算出来。常用的方法是单步方法。由于初值对于确定微分方程的解有重要作用，因而在求解数值解时，对出发值的精度也必须有相应的要求。为了保证多步方法的精确度，用于计算出发值的单步方法的阶数至少不低于多步方法的阶。

出发值的计算（续）

理论上讲，可用Taylor展开法和Runge-Kutta方法，计算出发值。但由于Taylor展开法要计算高阶导数值，故最常用的方法还是选择与多步法同阶的Runge-Kutta方法。一旦出发值计算出来，线性多步法的计算量（特别是显式公式）就会很小，因为每次只须计算一次f值。

Remark：有关线性多步法的整体截断误差、收敛性及数值稳定性的讨论可参考有关文献。

§7.5数值算例

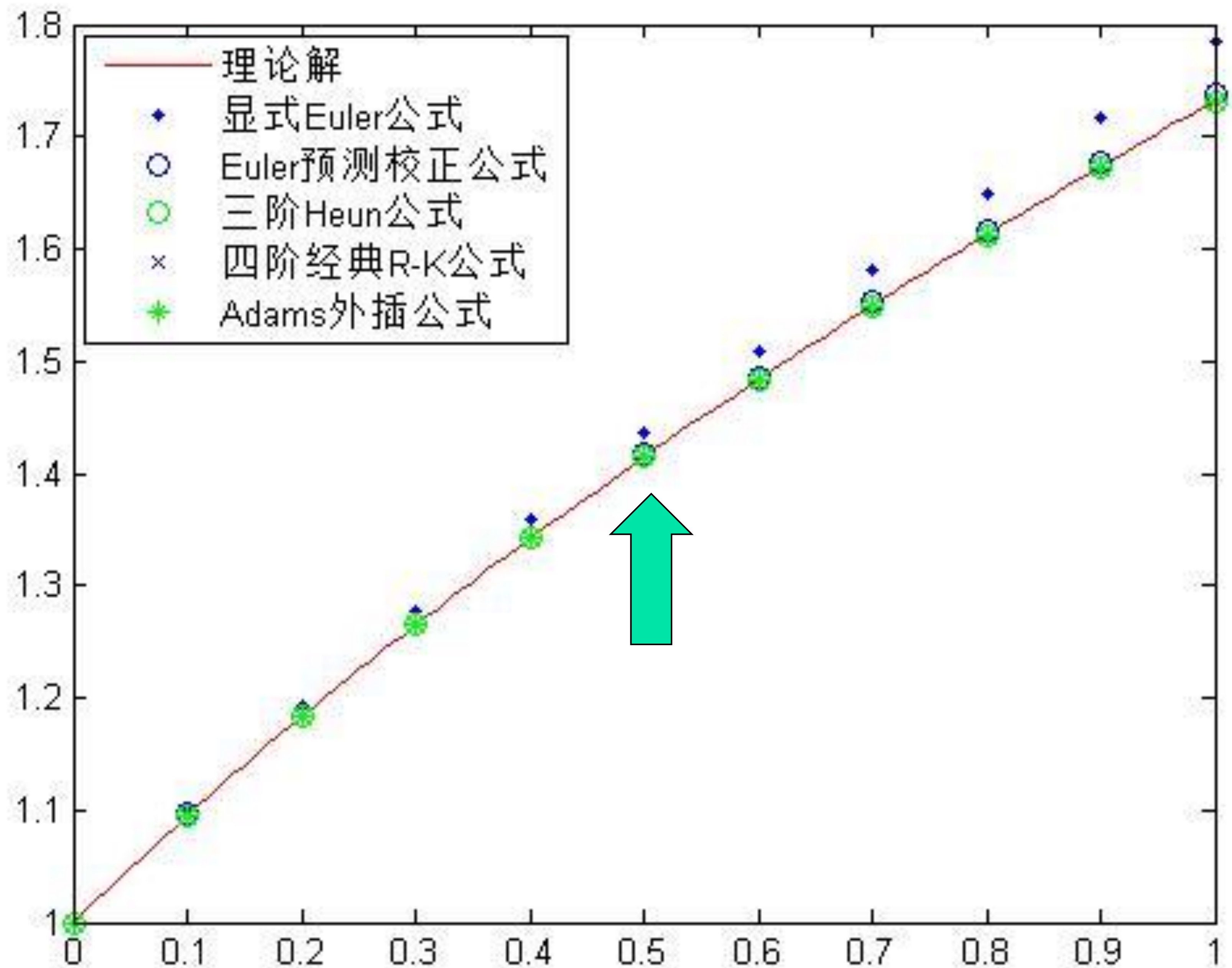
求解常微分方程初值问题

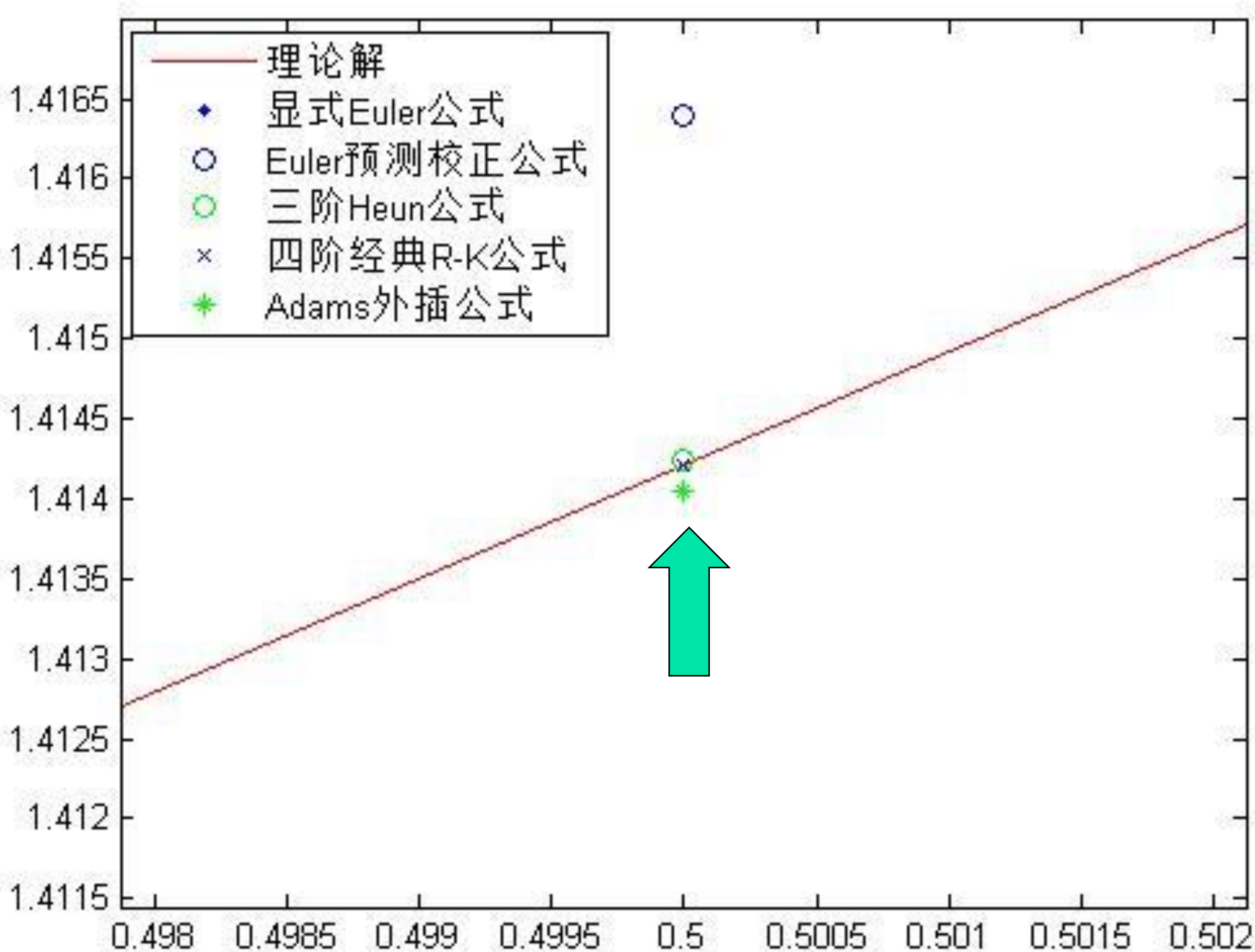
$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = y - \dfrac{2x}{y} \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

在[0,1]上的解，取步长$h=0.1$。

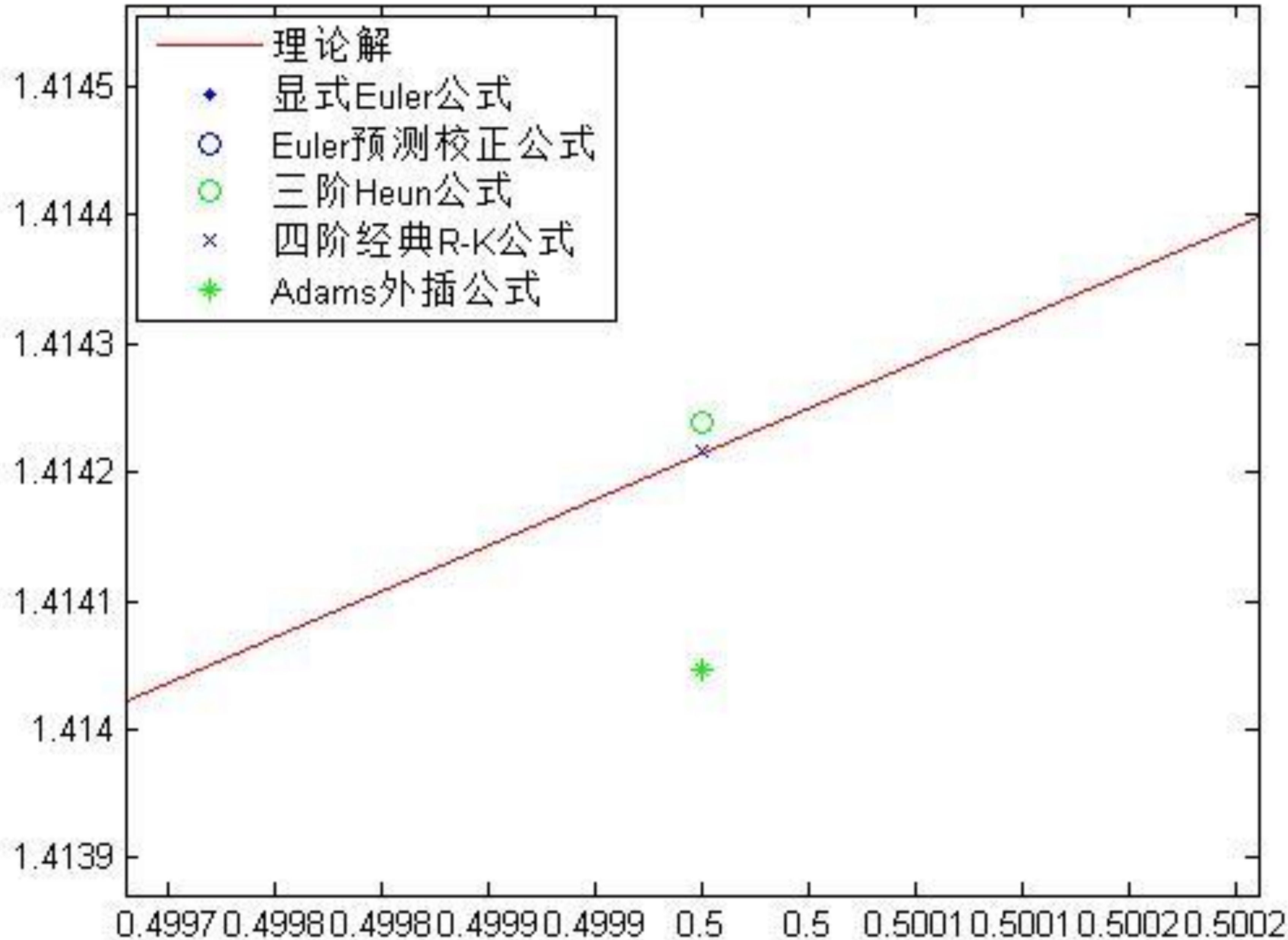
该问题的理论解为：$y(x) = \sqrt{1+2x}$

计算结果如下图所示：


理论解
显式Euler公式
Euler预测校正公式
三阶Heun公式
四阶经典R-K公式
Adams外插公式
1
1.1
1.2
1.3
1.4
1.5
1.6
1.7
1.8
0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
1



理论解
显式Euler公式
Euler预测校正公式
三阶Heun公式
四阶经典R-K公式
Adams外插公式
1.4165
1.416
1.4155
1.415
1.4145
1.414
1.4135
1.413
1.4125
1.412
1.4115
0.498
0.4985
0.499
0.4995
0.5
0.5005
0.501
0.5015
0.502



理论解
显式Euler公式
Euler预测校正公式
三阶Heun公式
四阶经典R-K公式
Adams外插公式
1.4145
1.4144
1.4143
1.4142
1.4141
1.414
1.4139
0.4997
0.4998
0.4998
0.4999
0.4999
0.5
0.5
0.5001
0.5001
0.5002
0.5002