第五章　常微分方程数值解法

武艳云

重庆邮电大学

2023年7月

目录

常微分方程课程中对一些典型的常微分方程给出了求其解析解的方法，然而在科学研究和工程技术领域中的常微分方程往往都比较复杂，难以求其解析解。在此介绍求解一阶常微分方程初值问题的数值解法。

一阶常微分方程初值问题：

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x,y), \quad a \le x \le b \\ y(a) = y_0,. \end{cases} \tag{1}$$

其中 $f(x,y)$ 为已知函数，$y(a) = y_0$ 称为初值条件。

定理1.1

设$f(x,y)$在区域$D=\{(x,y)|a\le x\le b,-\infty<y<+\infty\}$上连续，且关于y满足Lipschitz条件，即对$\forall x\in[a,b]$以及$\forall y_1,y_2$,存在常数$L>0$,使得

$$|f(x,y_1)-f(x,y_2)|\le L|y_1-y_2| \tag{2}$$

都成立，则初值问题(1)在[a,b]上存在唯一的连续可微解$y=y(x)$.

- 常微分方程数值解法

就是求初值问题(1)的解$y(x)$ 在一系列离散节点x_i : $a=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_{n-1}<x_n=b$ 处的解$y(x_i)$ 的近似值$y_i(i=0,1,2,\cdots,n)$的方法.其中$[a,b]$称为求解区间，$h_i=x_{i+1}-x_i$称为步长.下面列举3种将常微分方程离散化的方法：

1. 差商代替导数法

在问题(1)中，若用向前差商$\frac{y(x_{i+1})-y(x_i)}{h}$代替$y'(x_i)$,则得

$$\frac{y(x_{i+1})-y(x_i)}{h} \approx f(x_i, y_i(x_i)) \quad (i=0,1,2,\cdots,n-1)$$

$y(x_i)$用其近似值y_i代替，得到数值格式

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad (i=0,1,2,\cdots,n-1) \\ y_0 = y(x_0), \end{cases} \tag{3}$$

由初值y_0经过n步迭代，可逐次算出$y_1, y_2, \cdots, y_n$.

2. 数值积分法

对微分方程在区间$[x_i, x_{i+1}]$上积分，可得

$$y(x_{i+1}) - y(x_i) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx \quad (i = 0, 1, 2, \cdots, n-1)$$

若对右端积分使用数值积分公式，则可得到解初值问题(1)的数值方法。如利用左矩形公式得$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx \approx hf(x_i, y_i)$,在用$y_{i+1}, y_i$分别代替$y(x_{i+1}), y(x_i)$, 则同样可得到如下数值格式:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad (i = 0, 1, 2, \cdots, n-1) \\ y_0 = y(x_0), \end{cases}$$

3. 泰勒展开法

设初值问题(1)满足定理1.1的条件,且函数$f(x,y)$是足够次可微的.由泰勒公式有

$$y(x+h)=y(x)+h\Phi(x,y,h)+\frac{1}{(p+1)!}h^{p+1}y^{(p+1)}(\xi),\quad x<\xi<x+h \tag{4}$$

其中$\Phi(x,y,h)=f(x,y(x))+\frac{1}{2!}hf'(x,y(x))+\cdots+\frac{1}{p!}h^{p-1}f^{(p-1)}(x,y(x))$,取$x=x_i$,并截去最后一项，得到离散化公式

$$y_{i+1}=y_i+h\Phi(x_i,y_i,h) \tag{5}$$

定义1.1

假设$y_i = y(x_i)$为准确值，考虑计算下一步所产生的误差，即用某种数值算法计算$y(x_{i+1})$所产生的误差$R_{i+1} = y(x_{i+1}) - y_{i+1}$，称为该数值算法的局部截断误差。

定义1.2

考虑某种数值算法计算时，因前面的计算不准确而引起的准确解$y(x_i)$与数值解y_i 的误差$e_i = y(x_i) - y_i$, 称为该数值算法在节点x_i处的整体截断误差。

定义1.3

如果某个数值解法的局部截断误差为$O(h^{p+1})$,则称该算法为p阶算法(p阶精度). 当步长$h < 1$时，p越大，则局部截断误差越小，计算精度就越高。

1. 欧拉法原理

对初值问题(1),把区间$[a,b]$作n等分：$a=x_0<x_1<\cdots<x_{n-1}<b$,则分点为$x_i=a+ih$,$h=\frac{b-a}{n}(i=0,1,2,\cdots,n)$,得到数值算法：

$$\begin{cases} y_{i+1}=y_i+hf(x_i,y_i), & (i=0,1,2,\cdots,n-1) \\ y_0=y(x_0), \end{cases}$$

称其为欧拉法。局部截断误差为$R_{i+1}=y(x_{i+1})-y_{i+1}=\frac{1}{2}h^2y''(\xi_i)=O(h^2)$

2. 隐式欧拉法

在微分方程离散化时，用向后差商代替导数，即

$$y'(x_{i+1}) \approx \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h}$$

得到差分方程：

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}), \quad (i = 0, 1, 2, \cdots, n-1) \\ y_0 = y(x_0), \end{cases} \tag{6}$$

称其为隐式欧拉法，其局部截断误差为$R_{i+1} = y(x_{i+1}) - y_{i+1} = O(h^2)$

3. 梯形公式

离散化时，若用梯形公式计算右端积分，即

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y(x))dx = \frac{h}{2}[f(x_i,y(x_i)) + f(x_{i+1},y(x_{i+1}))]$$

并用y_i, y_{i+1}分别代替$y(x_i)$和$y(x_{i+1})$，则可得到

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i,y_i) + f(x_{i+1},y_{i+1})], \quad i = 0,1,2,\cdots,n-1 \tag{7}$$

梯形公式也是隐式公式，它的局部截断误差为

$$R_{i+1} = y(x_{i+1}) - y_{i+1} = -\frac{1}{12}h^3 y'''(\xi) = O(h^3)$$

隐式公式一般采用迭代法计算，向后欧拉法的迭代格式为

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(0)} = y_i + hf(x_i, y_i), & (k = 0, 1, 2, \cdots) \\ y_{i+1}^{(k+1)} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k)}), \end{cases}$$

梯形法的迭代格式为

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(0)} = y_i + hf(x_i, y_i), & (k = 0, 1, 2, \cdots) \\ y_{i+1}^{(k+1)} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k)})], \end{cases}$$

例1.1 用欧拉法，向后欧拉法和梯形法求解初值问题：

$$\begin{cases} y' = -\frac{0.9y}{1+2x}, 0 \le x \le 0.1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

取步长$h = 0.02$,并与精确解$y = (1 + 2x)^{-0.45}$作比较。

解　依题意，$x_n = 0.02n(n = 0, 1, \cdots, 5), y_0 = 1$. 由欧拉法，有

$$y_{n+1} = y_n - 0.9h\frac{y_n}{1+2x_n} = y_n - \frac{0.018y_n}{1+2x_n}$$

由向后欧拉法，有

$$y_{n+1} = y_n - 0.9h\frac{y_{n+1}}{1+2x_{n+1}}$$

解得

$$y_{n+1} = y_n/(1 + \frac{0.9h}{1+2x_{n+1}}) = y_n/(1 + \frac{0.018}{1+2x_{n+1}})$$

由梯形法，有$y_{n+1} = y_n - \frac{0.9h}{2}(\frac{y_n}{1+2x_n} + \frac{y_{n+1}}{1+2x_{n+1}})$,解得

$$y_{n+1} = y_n[1 - \frac{0.9h}{2(1+2x_n)}]/[1 + \frac{0.9h}{2(1+2x_{n+1})}].$$

4. 改进欧拉法

先用欧拉法求得一个初步的近似值$\bar{y}_{i+1}$，称之为预测值。预测值$\bar{y}_{i+1}$的精度可能很差，再用梯形公式将它校正一次得y_{i+1},称之为校正值。这样的预测-校正系统通常称为改进的欧拉法。

改进的欧拉法：

$$\begin{cases} \bar{y}_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), & (i = 0, 1, 2, \cdots) \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \bar{y}_{i+1})], & \end{cases} \tag{8}$$

例1.2 用欧拉法和改进的欧拉法求解初值问题：

$$\begin{cases} y' = y - \frac{x}{y}, \quad 0 \le x \le 1 \\ y(0) = 1, \end{cases} \tag{9}$$

解 取$h = 0.1$计算，由欧拉法得数值计算公式$y_{i+1} = y_i + 0.1(y_i - \frac{x_i}{y_i})$ 由改进欧拉法，得数值计算公式

$$\begin{cases} \bar{y}_{i+1} = y_i + 0.1(y_i - \frac{x_i}{y_i}), \\ y_{i+1} = y_i + 0.05[(y_i - \frac{x_i}{y_i}) + (\bar{y}_{i+1} - \frac{x_{i+1}}{\bar{y}_{i+1}})], \end{cases}$$

练习题：证明改进欧拉法是二阶方法。

设初值问题(1)满足定理1.2的条件，则解$y = y \in C^1[a,b]$.由微分中值定理可知，必存在$\xi \in (x_i, x_{i+1})$，使得

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(\xi) = y(x_i) + hf(\xi, y(\xi))$$

设$y_i = y(x_i)$,并记$K^* = f(\xi, y(\xi))$,则

$$y(x_{i+1}) - y_i = hK^* \tag{10}$$

其中，K^*称为$y(x)$在$[x_i, x_{i+1}]$上的平均斜率。只要对平均斜率K^*提供一种算法，式(10)就给出一个数值公式。如果在$[x_i, x_{i+1}]$ 上多预测几个点的斜率值，用他们的加权平均值代替K^*, 就有望得到具有较高精度的数值解公式。

龙格-库塔法的一般形式:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h\sum_{n=1}^{r} c_n K_n, \\ K_1 = f(x_i, y_i), \\ K_n = f(x_i + \lambda_n h, y_i + h\mu_{nj} K_j), \quad (n = 2, 3, \cdots, r) \end{cases}$$

其中，K_n是$y = y(x)$在点$x_i + \lambda_n h (0 \le \lambda \le 1)$的斜率预测值。$c_n, \lambda_n, \mu_{nj}$均为常数。二级龙格-库塔公式为

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h(c_1 K_1 + c_2 K_2), \\ K_1 = f(x_i, y_i), \\ K_2 = f(x_i + \lambda_2 h, y_i + h\mu_{21} K_1), \end{cases}$$

这里$c_1, c_2, \lambda_2, \mu_{21}$均为待定常数。

由于

$$f(x+\lambda_2 h, y+\mu_{21}hK_1) = f(x,y) + \lambda_2 h f_x(x,y) + \mu_{21}hf(x,y)f_y(x,y) + O(h^2)$$

则

$$c_1 f(x,y) + c_2 f(x+\lambda_2 h, y+\mu_{21}hK_1) = (c_1+c_2)f(x,y)$$

$$+ c_2 h[\lambda_2 f_x(x,y) + \mu_{21} f(x,y)f_y(x,y)] + O(h^2)$$

所以

$$\begin{aligned} y_{i+1} =& y_i + h(c_1K_1 + c_2K_2) \\ =& y_i + h[(c_1+c_2)f(x_i,y_i) + c_2 h(\lambda_2 f_x(x_i,y_i) + \mu_{21} f(x_i,y_i)f_y(x_i,y_i))] \\ &+ O(h^3) \end{aligned} \tag{11}$$

在$y(x+h)$的Taylor展开式中

$$\begin{aligned}y(x+h)=&y(x)+hf(x,y(x))+\frac{1}{2!}h^2f^{'}(x,y(x))+O(h^3)\\=&y(x)+h\Phi(x,y,h)+O(h^3),\end{aligned}$$

其中，

$$\Phi(x,y,h)=f(x,y(x))+\frac{1}{2}hf^{'}(x,y(x))$$

根据复合函数求导法则

$$f^{'}(x,y(x))=\frac{d}{dx}f(x,y)=f_x(x,y)+f_y(x,y)y^{'}(x)$$

所以

$$\begin{aligned}&y(x_{i+1})=y(x_i+h)=y(x_i)\\&+h[f(x_i,y_i)+\frac{1}{2!}h(f_x(x_i,y_i)+f_y(x_i,y_i)f(x_i,y_i))]+O(h^3)\end{aligned}\tag{12}$$

式(12)-式(11)，得

$$
\begin{aligned}
R[y] =& y(x_{i+1}) - y_{i+1} \\
=& (1 - c_1 - c_2)hf(x_i, y_i) + (\frac{1}{2} - c_2\lambda_2)hf_x(x_i, y_i) \\
&+ (\frac{1}{2} - c_2\mu_{21})hf(x_i, y_i)f_y(x_i, y_i) + O(h^3)
\end{aligned}
$$

令$c_2 = a \neq 0$,则得$c_1 = 1 - a$,$\lambda = \mu_{21} = \frac{1}{2a}$,这样确定参数$a$ 得到的公式统称为二阶龙格-库塔方法。

例如取$a=\frac{1}{2}$, 则$c_1=c_2=\frac{1}{2}$,$\lambda_2=\mu_{21}=1$,则得改进的欧拉法:

$$\begin{cases} y_{i+1}=y_i+\frac{h}{2}(K_1+K_2), \\ K_1=f(x_i,y_i), \\ K_2=f(x_{i+1},y_i+hK_1), \end{cases}$$

取$a=1$,则$c_1=0, c_2=1, \lambda_2=\mu_{21}=\frac{1}{2}$,则得中点方法:

$$\begin{cases} y_{i+1}=y_i+hK_2, \\ K_1=f(x_i,y_i), \\ K_2=f(x_i+\frac{h}{2},y_i+\frac{h}{2}K_1), \end{cases}$$

二阶龙格-库塔公式得局部截断误差为$O(h^3)$.

四阶龙格-库塔公式：

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_1) \\ K_3 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_2) \\ K_4 = f(x_i + h, y_i + hK_3) \end{cases}$$

注： 每一步需要计算四次函数值f，其截断误差为$O(h^5)$。

例1.3 取步长$h = 0.2$,用经典龙格-库塔公式求解初值问题：

$$\begin{cases} y' = 8 - 3y, \quad 0 \leq x \leq 1 \\ y(0) = 2 \end{cases}$$

计算$y(0.4)$ 的近似值，小数点后保留4位。

解　经典龙格-库塔公式为

$$
\begin{cases}
y_{i+1} = y_i + \frac{0.2}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\
K_1 = f(x_i, y_i) = 8 - 3y_i \\
K_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_1) = 5.6 - 2.1y_i \\
K_3 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_2) = 6.32 - 2.37y_i \\
K_4 = f(x_i + h, y_i + hK_3) = 4.208 - 1.578y_i
\end{cases}
$$

1. 收敛性与稳定性

常微分方程初值问题(1) 的数值解$y_i(i=1,2,\cdots,n)$是通过逐步计算得到的，在每一步计算中都存在局部截断误差和舍入误差，下面讨论单步法的收敛性。

求解问题(1)的显示单步法的一般形式为

$$\begin{cases} y_{i+1}=y_i+h\Phi(x_i,y_i,h) \\ y_0=y(a) \end{cases} \tag{13}$$

其中$h=\frac{b-a}{n}$,$x_i=a+ih$.假设该方法是p阶方法，即局部截断误差$R[y]=y(x_{i+1})-y_{i+1}=O(h^{p+1})$.

则

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + h\Phi(x_i, y_i, h) + R[y] \tag{14}$$

假设$\max_{a\leq x\leq b}|y^{(p+1)}(x)| \leq M_{p+1}$,则$|R[y]| \leq CM_{p+1}h^{p+1}$.

在实际问题中，由于存在舍入误差，按式(13)算出的$\tilde{y}_{i+1}$不是理论上的数值解y_{i+1}，而是y_{i+1}的近似值，它满足

$$\tilde{y}_{i+1} = \tilde{y}_i + h\Phi(x_i, y_i, h) + \eta_i \tag{15}$$

其中η_i步计算所产生的舍入误差。下面给出单步法的整体误差估计式。

定理1.2

设求解常微分方程初值问题(1)的显示单步法如式(13)所示，其中$\Phi(x_i, y_i, h)$在区域$D = (x, y)|a \le x \le b, -\infty \le y \le \infty$上关于$y$满足利普希茨条件，即存在常数$L$,使得

$$|\Phi(x, y, h) - \Phi(x, \bar{y}, h)| \le |\frac{\partial \Phi}{\partial y}(y - \bar{y})| \le L|y - \bar{y}| \quad (16)$$

对任意的$x \in [a, b]$及任意的$y, \bar{y}$都成立，则显示单步法(16)的整体误差$e_i = y(x_i) - \tilde{y}_i$ 的估计式如下：

$$|e_i| \le \begin{cases} |e_0| + (x_i - a)(CM_{p+1}h^p + \frac{\eta}{h}), L = 0 \\ |e_0|e^{L(x_i - a)} + (e^{L(x_i - a) - 1})(\frac{CM_{p+1}h^p}{L} + \frac{\eta}{hL}), L \ne 0 \end{cases}$$

其中η 为η_i 的上界。

由上述定理可以得到下面的结论：

(1)由于局部截断误差为$R[y]=y(x_{i+1})-y_{i+1}=O(h^{p+1})$.其值随$h$的减小而减小。因此，为减少计算解$\tilde{y}_i$ 的误差，h既不能取太大也不能取太小。

(2)整体误差与解法的阶数p，真解的$p+1$阶导数$y^{(p+1)}(x)$有关，为保证计算解的精度，一般应选取阶数p较大的解法，但是对于一些真解不够光滑，即$p+1$阶导数不存在或者虽然存在但上界很大的问题，则应采用低阶解法。

推论 设单步法具有$p(p\geq 1)$ 的精度，增量函数$\Phi(x,y,h)$在区域$G: a\leq x\leq b, -\infty<y<+\infty, 0\leq h\leq h_0$上连续，且关于$y$满足里普利茨条件，则单步法是收敛的。

2. 稳定域

收敛性是在假定数值计算过程中的每一步计算都是准确的，即无舍入误差的前提下讨论的。但在实际计算时，由于计算机字长有限等原因，每一步计算不可避免地存在舍入误差。如果每一步计算中的舍入误差不能得到控制，则必然会形成舍入误差的积累。所以必须研究舍入误差的控制问题，若在某个算法中，计算的每一步产生的舍入误差在以后各部计算中都能逐步削弱，则称这个算法为绝对稳定的方法。

定义1.6

设用某数值方法计算y_i时，所得实际结果为y_i^*,且由误差$\delta_i = y_i - y_i^*$引起以后各节点处$y_j(j > i)$ 的误差为δ_j. 如果总有$|\delta_j| \le |\delta_i|$,则称该算法是绝对稳定的。

常用模型方程

$$y' = \lambda y \tag{17}$$

来定义其绝对稳定性，其中λ为复常数。并且把能使某一数值方法绝对稳定的λh 的允许取值范围称为该方法的绝对稳定域，它与实轴的交称为绝对稳定区间。

欧拉法用于方程(17),可得

$$y_{i+1} = (1 + h\lambda)y_i$$

由于舍入误差，实际得到的不是y_i,而是$\bar{y}_i = y_i + \delta_i$,其中$\delta_i$是误差。记$\delta_{i+1} = \bar{y}_{i+1} - y_{i+1}$，则

$$\begin{aligned}\delta_{i+1} =& \bar{y}_i - y_i + h\lambda[\bar{y}_i - y_i] \\ =& [1 + h\lambda]\delta_i\end{aligned}$$

由$|\delta_{i+1}| \leq |\delta_i|$得绝对稳定条件是$|1 + h\lambda| \leq 1$。绝对稳定区间为$-2 < \lambda h < 0$.由于$\lambda h$可以是复数，则绝对稳定域是以$(-1, 0)$为中心，以1为半径的圆形区域。

绝对稳定域如图所示:

思考：隐式欧拉法的稳定域。

用隐式欧拉法求解方程(17)，得

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}) = y_i + \lambda h y_{i+1}$$

与欧拉法同理可得

$$\delta_{i+1} = \delta_i + \lambda h \delta_{i+1}$$

由此可得$\delta_{i+1} = \frac{\delta_i}{1-\lambda h}$,其绝对稳定域为$|\frac{1}{1-\lambda h}| < 1$,即

$$|1 - \lambda h| > 1.$$

这是复平面上以实轴上点1为圆心，半径为1的单位圆的外部。

用Euler法计算节点$x_n = x_0 + nh(x_0 = 0)$的近似值y_n只用到前一节点的值y_{n-1},所以从初值y_0出发可算以后各点的值，这种方法称为多步法，多步法的一般形式为：

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f_{n+j} \tag{18}$$

其中$f_{n+j} = f(x_{n+j}, y_{n+j})$,$\alpha_j$和$\beta_j$是常数，且$\alpha_k \neq 0$,$\alpha_0$和$\beta_0$不同时为0,按(18)计算$y_{n+k}$ 时要用到前面k个节点的值$y_n, y_{n+1}, \cdots, y_{n+k-1}$,因此称(18) 为多步法或k-步法。又因(18)关于f_{n+j}是线性的，所以称为线性多步法。若$\beta_k = 0$,称方法(18)是显示的。若$\beta_k \neq 0$,则称方法(18)是隐式的。

1. 数值积分法

将方程$y' = f(x,y)$写成积分形式，比如在$[x_n, x_{n+1}]$上积分，得

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx \tag{19}$$

适当取$k+1$个节点，以被积函数$f(x,y(x))$的k次Lagrange插值多项式$L_{n,k}(x)$近似代替$f(x,y(x))$，就可得形如(19)的线性多步法。

(1). Adams外插法

取$x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-k}$为节点，构造$f$的Langrange插值多项式$L_{n,k}(x)$，则

$$f(x, y(x)) = L_{n,k}(x) + r_{n,k}(x) \tag{20}$$

其中$r_{n,k}(x)$是插值余项，代到(19)中，得

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} L_{n,k}(x)dx + \int_{x_n}^{x_{n+1}} r_{n,k}(x)dx$$

舍去余项$R_{n,k} = \int_{x_n}^{x_{n+1}} r_{n,k}(x)dx$ (局部截断误差)，用y_j代替$y(x_j)$,得

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} L_{n,k}(x)dx \tag{21}$$

因为插值节点等距，被插值点$x \in [x_n, x_{n+1}]$靠近最后一个节点x_n，所以将$L_{n,k}(x)$表示成牛顿向后插值公式更方便，记$x = x_n + \tau h, \tau \in [0,1]$，由于$\begin{pmatrix} -\tau \\ j \end{pmatrix} = \frac{-\tau(-\tau-1)\cdots(-\tau-j+1)}{j!} = (-1)^j \frac{\tau(\tau+1)\cdots(\tau+j-1)}{j}$.
则牛顿向后插值公式为

$$
\begin{aligned}
L_{n,k}(x) =& L_{n,k}(x_n+\tau h) = f_n + \frac{\tau}{1!}\Delta_+ f_{n+1} + \frac{\tau(\tau+1)}{2!}\Delta_+^2 f_{n-2} \\
&+\cdots+\frac{\tau(\tau+1)\cdots(\tau+k+1)}{k!}\Delta_+^k f_{n-k} \\
=&\sum_{j=0}^{k}(-1)^j \begin{pmatrix} -\tau \\ j \end{pmatrix} \Delta_+^j f_{n-j}
\end{aligned}
\tag{22}
$$

由于$\int_{x_n}^{x_{n+1}} L_{n,k}(x)dx = h\int_0^1 L_{n,k}(x_n+\tau h)d\tau$,将(22)代入到(21)，得

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} =& y_n + h\int_0^1 \sum_{j=0}^{k}(-1)^j \begin{pmatrix} \tau \\ j \end{pmatrix} \Delta_+^j f_{n-j} d\tau \\
=& y_n + h\sum_{j=0}^{k}\int_0^1 (-1)^j \begin{pmatrix} \tau \\ j \end{pmatrix} d\tau \Delta_+^j f_{n-j} \\
=& y_n + h\sum_{j=0}^{k} a_j \Delta_+^j f_{n-j}
\end{aligned}
\tag{23}
$$

其中$a_j = (-1)^j \int_0^1 \begin{pmatrix} -\tau \\ j \end{pmatrix} d\tau, j = 0, 1, \cdots, k$, 这就是Adams外插公式，显然$k = 0$就是Euler法。插值余项

$$r_{n,k}(x) = r_{n,k}(x_n + \tau h) = (-1)^{k+1} \begin{pmatrix} -\tau \\ k+1 \end{pmatrix} h^{k+1} y^{(k+2)}(\bar{\xi}),$$

其中$x_{n-k} \leq \bar{\xi} \leq x_{n+1}$.由

$$\begin{aligned} R_{n,k} =& h^{k+2} \int_0^1 (-1)^{k+1} \begin{pmatrix} -\tau \\ k+1 \end{pmatrix} y^{(k+2)}(\bar{\xi}) d\tau \\ =& a_{k+1} h^{k+2} y^{(k+2)}(\bar{\xi}), \quad x_{n-k} \leq \bar{\xi} \leq x_{n+1}, \end{aligned}$$

由(36)知Adams外插法的局部截断误差的阶为$O(h^{k+2})$,利用

$$\Delta_+^j f_{n-j} = \sum_{l=0}^{j} (-1)^j \begin{pmatrix} j \\ l \end{pmatrix} f_{n-l}$$

则(23)化为

$$\begin{aligned} y_{n+1} = & y_n + h \sum_{j=0}^{k} a_j \sum_{l=0}^{j} (-1)^l \begin{pmatrix} j \\ l \end{pmatrix} f_{n-l} \\ = & y_n + h \sum_{l=0}^{k} b_{kl} f_{n-l} \end{aligned}$$

其中$b_{kl} = \sum_{l=0}^{j} (-1)^l a_j \begin{pmatrix} j \\ l \end{pmatrix}$.由于$a_j$的值给出$b_{kl}$的值:

l	0	1	2	3	4	5
b_{0l}	1					
$2b_{1l}$	3	-1				
$12b_{2l}$	23	-16	5			
$24b_{3l}$	55	-59	37	-9		
$720b_{4l}$	1901	-2774	2616	-1274	251	
$1440b_{5l}$	4277	-7239	9982	-7298	2877	-475

例如　$k=0,1,2,3$ 的外插公式为

$$k=0: \quad y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)$$

$$k=1: \quad y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}(3f_n-f_{n-1})$$

$$k=2: \quad y_{n+1}=y_n+\frac{h}{12}(23f_n-16f_{n-1}+5f_{n-2})$$

$$k=3: \quad y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}(55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3})$$

(2). Adams内插法

取插值点为$x_{n-k}, x_{n-k+1}, \cdots, x_n, x_{n+1}$（比外插法多取一点$x_{n+1}$），构造$y'(x)$或$f(x, y(x)) = L_{n,k}^{(1)}(x) + r_{n,k}^{(1)}(x)$,代入(19)得

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} L_{n,k}^{(1)}(x)dx + \int_{x_n}^{x_{n+1}} r_{n,k}^{(1)}(x)dx \tag{24}$$

舍去余项$R_{n,k}^{(1)} = \int_{x_n}^{x_{n+1}} r_{n,k}^{(1)}(x)dx$,并用$y_j$ 代替$y(x_j)$,得到Adams内插法

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} L_{n,k}^{(1)}(x)dx \tag{25}$$

当$k = 0$时，就是改进得Euler法，余项$R_{n,k}^{(1)}$是内插法得局部截断误差。

由牛顿向后插值公式

$$L_{n,k}^{(1)}(x)=L_{n,k}^{(1)}(x_{n+1}+\tau h)=\sum_{j=0}^{k+1}(-1)^j\begin{pmatrix}-\tau\\ j\end{pmatrix}\Delta_+^j f_{n-j+1} \tag{26}$$

由于$\int_{x_n}^{x_{n+1}}L_{n,k}^{(1)}(x)dx=h\int_{-1}^{0}L_{n,k}(x_{n+1}+\tau h)d\tau$,将(26)代入(25)得

$$y_{n+1}=y_n+h\sum_{j=0}^{k}a_j^*\Delta_+^j f_{n-j} \tag{27}$$

其中$a_j^*=(-1)^j\int_{-1}^{0}\begin{pmatrix}-\tau\\ j\end{pmatrix}d\tau, j=0,1,\cdots,k+1$,下表给出系数$a_j^*$的值。

j	0	1	2	3	4	5	6
a_j^*	1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{24}$	$-\frac{19}{720}$	$-\frac{3}{160}$	$-\frac{863}{60480}$

利用插值余项公式得

$$r_{n,k}^{(1)}(x) = r_{n,k}^{(1)}(x_{n+1}+\tau h) = (-1)^k \begin{pmatrix} -\tau \\ k+2 \end{pmatrix} h^{k+2} u^{(k+2)}(\bar{\xi}), \ \ x_{n-k} \le \bar{\xi} \le x_{n+1} \tag{28}$$

则得$R_{n,k}^{(1)} = a_{k+2}^* h^{k+3} u^{(k+3)}(\xi), x_{n-k} \le \bar{\xi} \le x_{n+1}$.

由此可见Adams内插法的局部截断误差的阶为$O(h^{k+3})$.利用(36)代入(27) 得

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{l=0}^{k+1} b_{l+1,l}^* f_{n-l+1}$$

其中$b^*_{l+1,l} = (-1)^l \sum_{j=l}^{k+1} a^*_j \begin{pmatrix} j \\ l \end{pmatrix}$，下表列出$b^*_{l+1,l}$的值。

l	0	1	2	3	4	5
b^*_{0l}	1					
$2b^*_{1l}$	1	1				
$12b^*_{2l}$	5	8	-1			
$24b^*_{3l}$	9	19	-5	1		
$720b^*_{4l}$	251	646	-264	106	-19	
$1440b^*_{5l}$	475	1427	-798	-7298	482	27

Adams外插法与内插法的区别

(1)$|a_j^*| < |a_j|$,$|b_{k+1}^*| < |b_{kl}|$, 则内插法的舍入误差影响比外插法小。

(2)内插法比外插法的局部截断误差的阶高一阶，为达到相同的误差阶，内插比外插少用一个初始已知量。

(3)外插法是显示，内插法是隐式。

由于内插法与外插法的式子可知，用数值积分法只能构造一类特殊的多步法，其系数

$$\alpha_k = 1, \alpha_{k-m} = -1, \alpha_l = 0, \text{当} \, l \neq k-m, k$$

令$L[y(x);h]=\sum_{j=0}^{k}[\alpha_j y(x+jh)-h\beta_j y'(x+jh)]$,将$y(x+jh)$ 与$y'(x+jh)$在点x用Taylor公式展开，按h的同次幂合并同类项，得

$$L[y(x);h]=c_0y(x)+c_1y'(x)+\cdots+c_qy^{(q)}(x)+\cdots,$$

其中

$$\begin{cases} c_0=\alpha_0+\alpha_1+\cdots+\alpha_k \\ c_1=\alpha_1+2\alpha_2+\cdots+k\alpha_k-(\beta_0+\beta_1+\cdots+\beta_k) \\ \cdots \\ c_q=\frac{1}{q!}(\alpha_1+2^q\alpha_2+\cdots+k^q\alpha_k)- \\ \frac{1}{(q-1)!}\cdots(\beta_1+2^{q-1}\beta_2+\cdots+k^{q-1}\beta_k),q=2,3,\cdots \end{cases}$$

若$y(x)$有$p+2$次连续微商，则可选取适当的k和α_j，β_j，使$c_0=c_1=\cdots=c_p=0$，而$c_{p+1}\neq 0$, 即选α_j，β_j，满足

$$\begin{cases}\alpha_0+\alpha_1+\cdots+\alpha_k=0\\ \alpha_1+2\alpha_2+\cdots+k\alpha_k-(\beta_0+\beta_1+\cdots+\beta_k)=0\\ \cdots\\ \frac{1}{q!}(\alpha_1+2^q\alpha_2+\cdots+k^q\alpha_k)-\\ \frac{1}{(q-1)!}\cdots(\beta_1+2^{q-1}\beta_2+\cdots+k^{q-1}\beta_k)=0,\ q=2,3,\cdots\end{cases}$$

此时$L[y(x);h]=c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x)+O(h^{p+2})$,由于$y'(x)=f(x,y(x))$,则

$$\sum_{j=0}^{k}[\alpha_j y(x_n+jh)-h\beta_j f(x_n+jh,y(x_n+jh))]=R_{n,k}$$

其中$R_{n,k}=c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n)+O(h^{p+2})$.略去余项$R_{n,k}$,并用y_{n+j} 代替$y(x_n+jh)$,用f_{n+j}记$f(x_{n+j},y_{n+j})$,就得到线性多步法(18).其局部截断误差为$R_{n,k}=O(h^{p+1})$,此方程为p 阶k 步法.

假设在(18)中设$\alpha_k=1$,当$\beta_k=0$,u_{n+k} 可用$u_{n+k-1},\cdots,u_n$ 表示，此为显方法，反之当$\beta_k\neq 0$ 时，求y_{n+k} 需要解方程，此为隐式法。用待定系数法构造多步法的一个基本要求，是选取α_j,β_j，使局部截断误差的阶尽可能高.

例1 确定如下求解公式的系数和局部截断误差：

$$y_{i+1}=\alpha_0 y_i+\alpha_1 y_{i-1}+\alpha_2 y_{i-2}+h(\beta_{-1}f_{i+1}+\beta_0 f_i+\beta_1 f_{i-1}).$$

解

$$\begin{aligned}R[y]=&y(x_{i+1})-y_{i+1}\\=&y(x_i+h)-\alpha_0 y(x_i)-\alpha_1 y(x_i-h)-\alpha_2 y(x_i-2h)\\&-h[\beta_{-1}y^{'}(x_i+h)+\beta_0 y^{'}(x_i)+\beta_1 y^{'}(x_i-h)].\end{aligned}$$

取$x_i = 0$,令$R[x^k] = 0 (k = 0, 1, 2, 3, 4)$，得

$$\begin{cases} 1 - \alpha_0 - \alpha_1 - \alpha_2 = 0, \\ h[1 + \alpha_1 + 2\alpha_2 - (\beta_{-1} + \beta_0 + \beta_1)] = 0, \\ h^2[1 - \alpha_1 - 4\alpha_2 - 2(\beta_{-1} - \beta_1)] = 0, \\ h^3[1 + \alpha_1 + 8\alpha_2 - 3[\beta_{-1} + \beta_1]] = 0, \\ h^4[1 - \alpha_1 - 16\alpha_2 - 4(\beta_{-1} - \beta_1)] = 0. \end{cases}$$

方程组含有5个方程，6个未知量，设α_1任意，则解得

$$\alpha_0 = \frac{9}{8}(1 - \alpha_1), \qquad \alpha_2 = -\frac{1}{8}(1 - \alpha_1), \qquad \beta_{-1} = \frac{1}{24}(9 - \alpha_1),$$

$$\beta_0 = \frac{1}{12}(9 + 7\alpha_1), \qquad \beta_2 = \frac{1}{24}(-9 + 17\alpha_1).$$

(1)取$\alpha_1 = 1$, 则

$$\alpha_0 = 0, \alpha_2 = 0, \quad \beta_{-1} = \frac{1}{3}, \quad \beta_0 = \frac{4}{3}, \quad \beta_1 = \frac{1}{3},$$

从而得辛普森公式

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3}(f_{i+1} + 4f_i + f_{i-1}).$$

(2)取$\alpha_1 = 0$, 则

$$\alpha_0 = \frac{9}{8}, \alpha_2 = -\frac{1}{8}, \quad \beta_{-1} = \frac{3}{8}, \quad \beta_0 = \frac{6}{8}, \quad \beta_1 = -\frac{3}{8},$$

得到Hamming公式$y_{i+1} = \frac{1}{8}[9y_i - y_{i-2} + 3h(f_{i+1}) + 2f_i - f_{i-1}]$.

1. 一阶方程组的数值解法

下式为常微分方程组的初值问题：

$$
\begin{cases}
y_1' = f_1(x, y_1, y_2, \cdots, y_n), & y_1(x_0) = y_{10} \\
y_2' = f_2(x, y_1, y_2, \cdots, y_n), & y_2(x_0) = y_{20} \\
\cdots \\
y_n' = f_n(x, y_1, y_2, \cdots, y_n), & y_n(x_0) = y_{n0}
\end{cases}
\tag{29}
$$

(29)式具有n个未知函数，令

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, F(x, Y) = \begin{pmatrix} f_1(x, Y) \\ f_2(x, Y) \\ \vdots \\ f_n(x, Y) \end{pmatrix},$$

$$Y_0 = Y(x_0) = \begin{pmatrix} y_1(x_0) \\ y_2(x_0) \\ \vdots \\ y_n(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_{10} \\ y_{20} \\ \vdots \\ y_{n0} \end{pmatrix},$$

则(29)式化为矩阵形式

$$\begin{cases} Y' = F(x, Y) \\ Y(x_0) = Y_0 \end{cases} \tag{30}$$

若$F(x, Y)$关于满足Lipschitz条件,则问题(30)有唯一解.微分方恒组初值问题(30) 在形式上与单个微分方程初值问题(1)完全相同,只是数量函数在此变成了向量函数. 因此,这一章前面几节学过的求解单个一阶微分方程初值问题的解,都可以用到求解一阶微分方程组中, 只不过是将单个方程中的函数转换为向量函数即可.

例如标准的4级4阶R-K法的向量形式如下：

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = hf(x_i, y_i) \\ K_2 = hf(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}K_1) \\ K_3 = hf(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}K_2) \\ K_4 = hf(x_i + h, y_i + K_3) \end{cases} \tag{31}$$

其分量形式为

$$\begin{cases} y_{j,i+1} = y_{j,i} + \frac{1}{6}(K_{j,1} + 2K_{j,2} + 2K_{j,3} + K_{j,4}) \\ K_{j,1} = hf_j(x_i; y_{1i}, y_{2i}, \cdots, y_{ni}) \\ K_{j2} = hf_j(x_i + \frac{h}{2}, y_{1i} + \frac{1}{2}K_{11}, y_{2i} + \frac{1}{2}K_{21}, \cdots, y_{ni} + \frac{1}{2}K_{n1}), j = 1, 2, \cdots, n \\ K_{j3} = hf_j(x_i + \frac{h}{2}, y_{1i} + \frac{1}{2}K_{12}, y_{2i} + \frac{1}{2}K_{22}, \cdots, y_{ni} + \frac{1}{2}K_{n2}) \\ K_{j4} = hf_j(x_i + h, y_{1i} + K_{13}, y_{2i} + K_{23}, \cdots, y_{ni} + K_{n3}) \end{cases}$$

2. 高阶常微分方程

m阶常微分方程初值问题为

$$\begin{cases} y^{(m)} = f(x, y, y', y'', \cdots, y^{(m-1)}), a \le x \le b \\ y(a) = y_0, \quad y'(a) = y'_0, \cdots, y^{(m-1)}(a) = y_0^{m-1} \end{cases} \tag{32}$$

求解高阶微分方程初值问题是将其转化为一阶微分方程组来求解。为此，引进新的变量$y_1 = y, y_2 = y', \cdots, y_m = y^{(m-1)}$, 即可将$m$阶微分方程(32)转化为如下的一阶微分方程组：

$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ y_2' = y_3, \\ \cdots \\ y_{m-1}' = y_m \\ y_m' = f(x, y_1, y_2, \cdots, y_m) \\ y_1(a) = y_0, y_2(a) = y_0', \cdots, y_m(a) = y_0^{(m-1)}. \end{cases} \tag{33}$$

例1.4 取$h=0.1$，用标准4级4阶R,K法求解二阶初值问题

$$\begin{cases} y''-2y'+2y=e^{2x}sinx, 0\le x\le 1 \\ y(0)=-0.4, \quad y'(0)=-0.6 \end{cases} \tag{34}$$

解 令$y_1=y$,$y_2=y'$,则得

$$\begin{cases} y_1'=y_2, \\ y_2'=e^{2x}sinx-2y_1-2y_2, \\ y_1(0)=-0.4, y_2(0)=-0.6. \end{cases} \tag{35}$$

记$\mathbf{y}=\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$,$\mathbf{y}(0)=\begin{pmatrix} y_1(0) \\ y_2(0) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -0.4 \\ -0.6 \end{pmatrix}$,

$$f(x,y)=\begin{pmatrix} f_1(x,y) \\ f_2(x,y) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} y_2 \\ e^{2x}sinx-2y_1+2y_2 \end{pmatrix}$$. 则标准4级4阶R-K法计算公式为

$$\mathbf{y}_{i+1}=\mathbf{y}_i+\frac{1}{6}(K_1+2K_2+2K_3+K_4),$$

其中

$$K_1=hf(x_i,\mathbf{y}_i)=\begin{pmatrix} K_{11} \\ K_{12} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} hy_{2i} \\ h(e^{2x_i}\sin x_i-2y_{1i}+2y_{2i}) \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} K_2=&hf(x_i+\frac{h}{2},\mathbf{y}_i+\frac{K_1}{2})=\begin{pmatrix} K_{21} \\ K_{22} \end{pmatrix} \\ =&\begin{pmatrix} h(y_{2i}+\frac{K_{12}}{2}) \\ h(e^{2(x_i+\frac{h}{2})}sin(x_i+\frac{h}{2})-2(y_{1i}+\frac{K_{11}}{2})+2(y_{2i}+\frac{K_{12}}{2})) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$K_3 = hf(x_i + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_i + \frac{K_2}{2}) = \begin{pmatrix} K_{31} \\ K_{32} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} h(y_{2i} + \frac{K_{22}}{2}) \\ h(e^{2(x_i+\frac{h}{2})} sin(x_i + \frac{h}{2}) - 2(y_{1i} + \frac{K_{21}}{2}) + 2(y_{2i} + \frac{K_{22}}{2})) \end{pmatrix}$$

$$K_4 = hf(x_i + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_i + \frac{K_3}{2}) = \begin{pmatrix} K_{41} \\ K_{42} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} h(y_{2i} + \frac{K_{23}}{2}) \\ h(e^{2(x_i+\frac{h}{2})} sin(x_i + h) - 2(y_{1i} + K_{13}) + (y_{2i} + K_{23})) \end{pmatrix}$$

我们可以按上述公式算出方程在点$x_i = ih(i = 1, 2, \cdots, 10)$ 处的近似解y_i,，并与方程的解析解$y(x) = 0.2e^{2x}(sinx - 2cosx)$作比较。