第六章　常微分方程初值问题的数值解法

微分方程是模拟自然、生物、工程等现象的重要数学工具。

包含自变量、未知函数的导数或微分的方程称为微分方程。在求解微分方程时，须附加某种条件，即定解条件。微分方程和定解条件一起组成**定解问题**。

- **定解条件通常有两种给法：**

（1）初值问题：给出积分曲线初始时刻的性态；

（2）边值问题：给出积分曲线首末两端的性态。

未知函数为一元函数的微分方程叫**常微分方程**；未知函数为多元函数，从而有多元函数偏导数的方程叫**偏微分方程**。微分方程中各阶导数的最高阶数叫**微分方程的阶。**

本章着重讨论一阶常微分方程初值问题：

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

的数值解法。

微分方程组和高阶方程的数值解法的基本思想与一阶常微分方程是类似的。

初值问题简介

一阶常微方程初值问题：

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x, y),\ x \in [a, b] & (6.1) \\ y(a) = y_0 & (6.2) \end{cases}$$

- **解的存在唯一性问题**

设 $x_0 \in [a,b], f(x,y)$ 对 x 连续且关于 y 满足利普希茨（Lipschitz）条件：存在常数 L，使 $\forall x \in [a,b]$ 及任何实数 y_1, y_2，有

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

则初值问题**(6.1)**、**(6.2)**在$[a,b]$上存在唯一解。

- **解的适定性问题：解对初始数据及函数 $f(x,y)$ 的依赖关系。**

定义　称初值问题**(6.1)**、**(6.2)**对初始值 y_0 和函数 $f(x,y)$ 是**适定的**，如果存在常数 $K>0, \eta>0$，对任意 $0<\varepsilon<\eta$，当

$$|y_0 - \tilde{y}_0| < \varepsilon$$

$$|f(x,y) - \tilde{f}(x,y)| < \varepsilon,\quad \forall (x,y) \in [x_0,b] \times (-\infty,+\infty)$$

时，初值问题

$$\begin{cases} z' = \tilde{f}(x,z), & x_0 \le x \le b \\ z(x_0) = \tilde{y}_0 \end{cases}$$

的解存在，且和**(6.1)**、**(6.2)**的解 $y(x)$ 之间满足：

$$\left| y(x) - z(x) \right| \le K\varepsilon$$

适定性刻画：初始值 y_0 和函数 $f(x,y)$ 小的扰动对解的影响。

定理　假设 $f(x,y)$ 在$[x_0,b] \times (-\infty,+\infty)$上对 y 满足利普希茨条件，则初值问题**(6.1)**、**(6.2)**是适定的。

虽然求解常微分方程有各种各样的解析方法，但解析方法只能解一些特殊类型的方程，在实际中**微分方程求解主要靠数值解。甚至用解析方法得到的解析解，也常常需用数值方法得到数**

值解。例如方程：

$$\begin{cases} y' = 1 - 2xy \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

其解为 $y = e^{-x^2}\int_0^x e^{t^2}dt,$ 为了具体计算函数值 y，还需要用数值积分的方法，如果需要计算许多点处的 y 值，则其计算量也可能很大。

- **离散变量法**：求初值问题近似解的一类数值方法是**离散变量法**，即采用**步进的方式**求出方程的解析解 $y(x)$ 在存在区间 $[a,b]$ **离散点列** $x_n = x_{n-1} + h_n, n = 1,2,\cdots,N$ 上**近似值** y_n，即数值方法给出解在一些离散点上的近似值，这里 h_n 是 x_{n-1} 到 x_n 的**步长**，均为正数。一般说来，在计算过程中可以改变，通常选取 h_n 不变，记为 h。
- **常微分方程初值问题的数值解法一般分为两大类**：一步法和多步法。

一步法：在计算 y_{n+1} 时，只用 x_{n+1}, x_n 和 y_n 就行了，其代表是**欧拉法**。

多步法：在计算 y_{n+1} 时，除用到 x_{n+1}, x_n 和 y_n 以外，还要用到 $x_{n-p}, y_{n-p}(p = 1,2,\cdots,k)$，即前面 k 步的值，其代表是**亚当斯法**。

§1　欧拉（Euler）方法与改进欧拉方法

欧拉方法是求解初值问题**(6.1)**、**(6.2)**的最简单的数值方法，通过欧拉方法，可以很好地理解数值格式的构造、求解、

误差估计和稳定性分析等。

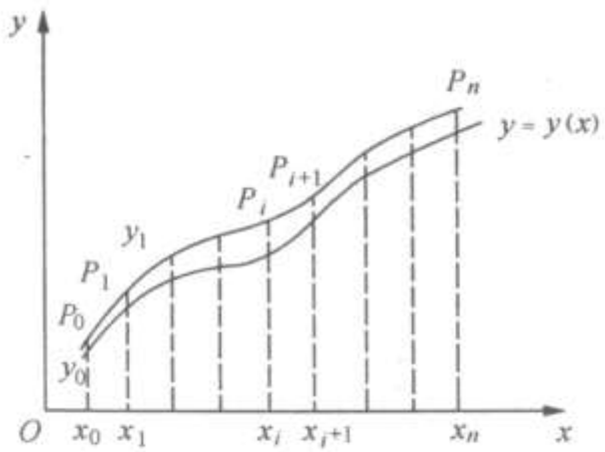
1.1 欧拉方法

初值问题：

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

的解 $y = y(x)$ 代表通过点 (x_0, y_0) 的一条曲线，称为**微分方程的积分曲线**。积分曲线上每一点 (x, y) 的切线的斜率 $y'(x)$ 等于函数 $f(x, y)$ 在这点的值。

- **欧拉法**是过点 (x_0, y_0) 作曲线的切线与 x_1 交于点 (x_1, y_1)，用 y_1 作为曲线 $y(x)$ 上的点 $(x_1, y(x_1))$ 的纵坐标 $y(x_1)$ 的近似值。如下图所示。



过点 (x_0, y_0) 以 $f(x_0, y_0)$ 为斜率的切线方程：

$$y = y_0 + f(x_0, y_0)(x - x_0)$$

当 $x = x_1$ 时，得

$$y_1 = y_0 + f(x_0, y_0)(x_1 - x_0)$$

取 y_1 作为解 $y(x_1)$ 的近似值 $y(x_1) \approx y_1$。然后，再过点 (x_1, y_1) 以 $f(x_1, y_1)$ 为斜率的直线

$$y = y_1 + f(x_1, y_1)(x - x_1)$$

当 $x=x_2$ 时，得

$$y_2=y_1+f(x_1,y_1)(x_2-x_1)$$

同样取 $y(x_2)\approx y_2$。

一般地，已求得点 (x_i,y_i)，以 $f(x_i,y_i)$ 为斜率作直线

$$y=y_i+f(x_i,y_i)(x-x_i)$$

当 $x=x_{i+1}$ 时，得

$$y_{i+1}=y_i+f(x_i,y_i)(x_{i+1}-x_i)$$

取 $y(x_{i+1})\approx y_{i+1}$。

这样，从 x_0 逐个算出 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 对应的数值解

$$y_1,y_2,\cdots y_n$$

- **欧拉法的几何意义：**用一条初始点重合的折线来来近似表示曲线 $y=y(x)$ 。
- **欧拉法的计算格式**（通常取 $x_{i+1}-x_i=h_i=h$）：

$$\begin{cases} \boldsymbol{y_{i+1}=y_i+hf(x_i,y_i)} \\ \boldsymbol{x_i=x_0+ih,\ i=0,1,2,\cdots} \end{cases} \tag{6.4}$$

- **从数值微分和数值积分等的角度讨论欧拉格式**

对微分方程，数值解法的第一步就是设法消除其导数项，这项工作称为**离散化**。由于差分是微分的近似运算，实现离散化的基本途径是**用差商代替导数（数值微分方法）**。

在 x_i 点微分方程：

$$y'(x_i)=f(x_i,y(x_i)) \tag{6.3}$$

用差商 $\dfrac{y(x_{i+1})-y(x_i)}{h}$ 代替其中的导数项 $y'(x_i)$，即

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

于是有

$$y(x_{i+1}) \approx y(x_i) + hf(x_i, y(x_i))$$

用 $y = y(x_i)$ 的近似值 y_i 代入上式右端，记所得结果为 y_{i+1}，就有：

$$\boldsymbol{y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)},\ i = 0,1,\cdots,n-1 \qquad \textbf{(6.4)}$$

——由数值微分导出的欧拉格式，若初值 y_0 已知，就可逐步算出 $y_1, y_2, \cdots$。

若将方程 $y' = f(x, y)$ 的两端从 x_n 到 x_{n+1} 求积分

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

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

选用不同的数值方法计算积分项 $\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx$，就会得出不同的差分格式。

用左矩形方法计算积分项：

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx \approx hf(x_n, y(x_n))$$

代入上式，得：

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))$$

据此离散化，**从数值积分可导出欧拉格式**。**由于数值积分的矩形方法精度很低，欧拉方法当然很粗糙。**

对 $y(x_{n+1})$ 在 x_n 处按二阶泰勒展开有

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

其中 $x_n \le \varepsilon_n \le x_{n+1}$

略去余项得：

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + hy'(x_n) = y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))$$

用近似值 y_n 代替 $y(x_n)$，把上式右端所得值记为 y_{n+1}，有

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

——用泰勒展开法推出的欧拉格式

以上用 4 种方法：几何方法、数值微分法、数值积分法和泰勒法展开法推导了欧拉格式。泰勒展开法和数值积分法是两种常用的方法，可以用泰勒展开法导出单步法的**龙格−库塔格式**，用泰勒展开法和数值积分法推导线性多步法的**亚当斯格式**。

例 求解初值问题 $\begin{cases} y' = y - \frac{2x}{y},\ 0 < x < 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$

解 欧拉格式的具体形式

$$y_{i+1} = y_i + h(y_i - \frac{2x_i}{y_i})$$

取步长 $h = 0.1$，计算结果见下表。

表 计算结果

x_i	y_i	$y(x_i)$	x_i	y_i	$y(x_i)$

0．1	1.1000	1.0954	0．6	1.5090	1.4832
0．2	1.1918	1.1832	0．7	1.5803	1.5492
0．3	1.2774	1.2649	0．8	1.6498	1.6125
0．4	1.3582	1.3416	0．9	1.7178	1.6733
0．5	1.4351	1.4142	1．0	1.7848	1.7321

该初值问题解析解 $y=\sqrt{1+2x}$，将解析解 $y(x_i)$ 同近似值 y_i 进行比较可以看出**欧拉法的精度较低**。

例 1 （见教材 p.149）。

1.2　欧拉公式的局部截断误差与精度分析

为了衡量差分格式的精度，引入局部截断误差和阶数概念。

定义 1　在 y_i 准确的前提下，即 $y_j = y(x_j)$ $(j \le i)$ 时，用数值方法计算 y_{i+1} 的误差

$$\boldsymbol{R_{i+1} = y(x_{i+1}) - y_{i+1}}$$

（对欧拉法：$R_{i+1} = y(x_{i+1}) - y(x_i) - hf(x_i, y(x_i))$ ）

称为该数值方法计算 y_{i+1} 时的**局部截断误差**。

定义 2　若一个数值方法的局部截断误差为 $O(h^{p+1})$，则称这种**数值方法的阶数是** p。

显然，步长 $h(<1)$ 越小，p 值越高，则局部截断误差越小，计算精度越高。

- **欧拉法的局部截断误差**

对于**欧拉公式**，假定 $y_i = y(x_i)$，则有

$$y_{i+1} = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) = y(x_i) + hy'(x_i)$$

而按二阶泰勒公式

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(\zeta_i),\ x_i < \zeta_i < x_{i+1} \quad \textbf{(6.5)}$$

因此有

$$R_{i+1}=y(x_{i+1})-y_{i+1}=\frac{h^2}{2}y''(\zeta_i) \qquad \textbf{(6.6)}$$

若 $y(x)$ 具有三阶导数，则欧拉公式局部截断误差可表示成：

$$R_{i+1}=y(x_{i+1})-y_{i+1}=\frac{h^2}{2}y''(x_i)+\frac{h^3}{6}y'''(\zeta_i) \qquad \textbf{(6.7)}$$

注：也可由数值积分公式得到上述估计。

欧拉法的局部截断误差为$O(h^2)$，欧拉方法为一阶方法。

1.3　改进欧拉方法

设改用向后差商 $\frac{1}{h}\big(y(x_{i+1})-y(x_i)\big)$ 替代方程 $y'(x_{i+1})=f\big(x_{i+1},y(x_{i+1})\big)$ 中的导数项 $y'(x_{i+1})$，再离散化，即可导出下列格式：

$$\boldsymbol{y_{i+1}=y_i+hf(x_{i+1},y_{i+1})} \qquad \textbf{(6.8)}$$

称为**向后欧拉公式**（又称**隐式欧拉公式**）。**(6.4)**也称为**向前欧拉公式**（又称**显式欧拉公式**）。

- **向后欧拉公式的显式化：**

$$y_{i+1}^{(k+1)}=y_i+hf\left(x_{i+1},y_{i+1}^{(k)}\right)\ \ (k=0,1,2,\cdots)$$

- **隐式欧拉公式的局部截断误差**

$$R_{i+1}=-\frac{h^2}{2}y''(x_i)+O(h^3) \qquad \textbf{(6.9)}$$

- **(*) 两步欧拉格式**

为了改善精度，改用中心差商 $\frac{1}{2h}\big(y(x_{i+1})-y(x_{i-1})\big)$ 替代方程 $y'(x_i)=f\big(x_i,y(x_i)\big)$ 中的导数项，并取离散化得出

$$\boldsymbol{y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i)}$$

无论是显式欧拉格式，还是隐式欧拉格式都是单步法，其特点是计算 y_{i+1} 时只用到前一步的信息 y_i，然而上面推导出的格式，除了 y_i 以外，还用到更前一步的信息 y_{i-1}，即调到了前面两步的信息，因此该格式称为**两步欧拉格式**。

两步欧拉格式比显式或隐式欧拉格式具有更高的精度。设 $y_i = y(x_i)$，$y_{i-1} = y(x_{i-1})$，前两步准确，则对两步欧拉格式，有

$$y_{i+1} = y(x_{i-1}) + 2hf(x_i, y(x_i))$$

将 $y(x_{i+1})$ 进行泰勒展开

$$y(x_{i+1}) = y(x_{i-1}) + 2hy'(x_i) + \frac{h^3}{3}y'''(\zeta_i),\ x_{i-1} < \zeta_i < x_{i+1}$$

上二式相比较得：

$$y(x_{i+1}) - y_{i+1} = O(h^3)$$

因此这是一种**二阶方法**。

- **梯形公式和改进的欧拉方法**

将方程 $y' = f(x, y)$ 的两端从 x_i 到 x_{i+1}，求积分得

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f\big(x, y(x)\big)dx$$

为了提高精度，改用梯形方法代替矩形方法计算积分项：

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

再代入上式，有

$$y(x_{i+1}) \approx y(x_i) + \frac{h}{2}\left[f\big(x_i, y(x_i)\big) + f\big(x_{i+1}, y(x_{i+1})\big)\right]$$

设将式中的 $y(x_i), y(x_{i+1})$ 分别用 y_i, y_{i+1} 代替，作为离散

化的结果导出如下的**梯形公式**：

$$\boldsymbol{y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})]} \qquad \textbf{(6.10)}$$

欧拉公式是一种显式算法，计算量小，但精度低，梯形公式虽提高了精度，但它是一种隐式算法，需要迭代求解，计算量大。

梯形公式实际上是显式欧拉公式与隐式欧拉公式的算术平均。因此梯形公式是隐式方式不易求解，一般构成如下计算公式（**梯形公式显式化**）：

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

即：先用欧拉方法算出 x_{i+1} 处 y_{i+1} 的初始值 $y_{i+1}^{(0)}$，然后进行迭代，得到 $y_{i+1}^{(1)}, y_{i+1}^{(2)}, \cdots$，用 $\left|y_{i+1}^{(k+1)} - y_{i+1}^{(k)}\right| \le \varepsilon$ 控制迭代次数，其中 ε 为允许误差。把满足误差要求的 $y_{i+1}^{(k+1)}$ 作为 $y(x_{i+1})$ 的近似值 y_{i+1}，类似地可得 $y_{i+2}, y_{i+3}, \cdots$。

在实用上，当 h 取值较小，先用欧拉格式得一个初步近似值 $y_{i+1}^{(0)}$，称之为**预估值**，预报值的精度不高，用它替代梯形法右端的 y_{i+1}，再直接计算出 y_{i+1}，并称之为**校正值**，得到：

- **改进的欧拉方法（预估−校正公式）：**

$$\begin{cases} \textbf{预估：} \boldsymbol{y_{i+1}^{(0)} = y_i + hf(x_i, y_i)} \\ \textbf{校正：} \boldsymbol{y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f\left(x_{i+1}, y_{i+1}^{(0)}\right)]} \end{cases} \qquad \textbf{(6.11)}$$

称为**改进的欧拉方法**。这是一种一步显式格式，它可以表示为**嵌套形式：**

$$\boldsymbol{y_{i+1}=y_i+\frac{h}{2}\left[f(x_i,y_i)+f\big(x_{i+1},y_i+hf(x_i,y_i)\big)\right]} \quad \textbf{(6.12)}$$

或者表示成下列**平均化形式：**

$$\begin{cases} \boldsymbol{y_p=y_i+hf(x_i,\ y_i)} \\ \boldsymbol{y_c=y_i+hf\big(x_{i+1},y_p\big)} \\ \boldsymbol{y_{i+1}=\frac{1}{2}(\ y_p+y_c\ )} \end{cases} \quad \textbf{(6.13)}$$

改进的欧拉方法是一个二阶方法。

例 2　见教材 p.153 。

例　用向前欧拉方法、向后欧拉方法和改进的欧拉方法求解以下初值问题：

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

解　准确解为：$y(x)=x^2+2x+2-2(x+1)\ln(x+1)$

分别取 $h=0.2,\ 0.1,\ 0.05$，得到三种方法的结果如**表 1**、**表 2** 和**表 3** 所示。

改进的欧拉格式的具体形式：

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(0)}=y_i+h\dfrac{y_i+x_i^2-2}{x_i+1} \\ y_{i+1}=y_i+\dfrac{h}{2}\left[\dfrac{y_i+x_i^2-2}{x_i+1}+\dfrac{y_{i+1}^{(0)}+x_{i+1}^2-2}{x_{i+1}+1}\right] \end{cases}$$

表 1　向前欧拉法求解

h	x_i	$y(x_i)$	误差	相对误差
0.2	1.0	2.1592	6.82E-2	0.0306
	2.0	3.1697	2.39E-1	0.0701

	3.0	5.4332	4.76E-1	0.0805
	4.0	9.1411	7.65E-1	0.0129
	5.0	14.406	1.09	0.0703
0.1	1.0	2.1912	3.63E-2	0.0163
	2.0	3.2841	1.24E-1	0.0364
	3.0	5.6636	2.46E-1	0.0416
	4.0	9.5125	3.93E-1	0.0665
	5.0	14.939	5.60E-1	0.0361
0.05	1.0	2.2087	1.87E-2	0.0084
	2.0	3.3449	6.34E-1	0.0186
	3.0	5.7845	1.25E-1	0.0212
	4.0	9.7061	1.99E-1	0.0337
	5.0	15.214	2.84E-1	0.0183

表 2　向后欧拉法求解

h	x_i	$y(x_i)$	误差	相对误差
0.2	1.0	2.3157	8.83E-2	0.0396
	2.0	3.6916	2.83E-1	0.0831
	3.0	6.4563	5.46E-1	0.0925
	4.0	10.7664	8.61E-1	0.0869
	5.0	16.7141	1.22	0.0784
0.1	1.0	2.2687	4.13E-2	0.0185
	2.0	3.5437	1.35E-1	0.0397
	3.0	6.1732	2.64E-1	0.0446
	4.0	10.3227	4.17E-1	0.0421
	5.0	16.0897	5.91E-1	0.0381
0.05	1.0	2.2474	2.00E-2	0.0090
	2.0	3.4745	6.62E-1	0.0194
	3.0	6.0391	1.29E-1	0.0219
	4.0	10.1110	2.05E-1	0.0217
	5.0	15.7903	2.91E-1	0.0188

表 3　改进欧拉法求解

h	x_i	$y(x_i)$	误差	相对误差
0.2	1.0	2.2324	5.01E-3	0.0022
	2.0	3.4171	8.80E-3	0.0026
	3.0	5.9221	1.24E-2	0.0021
	4.0	9.9215	1.59E-2	0.0016
	5.0	15.5182	1.93E-2	0.0012

0.1	1.0	2.2287	1.20E-3	0.0006
	2.0	3.4105	2.20E-3	0.0007
	3.0	5.9128	3.10E-3	0.0005
	4.0	9.9096	4.01E-3	0.0004
	5.0	15.5037	4.91E-3	0.0003
0.05	1.0	2.2277	3.00E-4	0.0001
	2.0	3.4089	5.50E-4	0.0002
	3.0	5.9104	7.71E-4	0.0001
	4.0	9.9066	1.00E-3	0.0001
	5.0	15.5001	1.23E-3	0.0001

向前欧拉方法和向后欧拉方法是一阶收敛，改进的欧拉方法是二阶收敛。

§2　龙格−库塔(Runge-Kutta)法

龙格−库塔法是一种应用较广的高精度的单步法。

2.1　龙格−库塔法的构造原理

在**泰勒展开**推导欧拉方法中，若取更多高阶项则可以得到更高局部截断误差阶的格式。

设 $y_i = y(x_i)$，将 $y(x_{i+1})$在 x_i 处展开

$$\boldsymbol{y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_i) + \cdots}$$

若取右端前有限项为 $y(x_{i+1})$的近似值，就可得到计算 $y(x_{i+1})$ 的各种不同截断误差的数值公式。

若取前两项时

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

即有　$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$

这就是**局部截断误差为$O(h^2)$的欧拉格式**。

若取前三项时，可得**局部截断误差为$O(h^3)$的公式：**

$$
\begin{aligned}
y(x_{i+1}) &\approx y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2} y''(x_i) \\
&= y(x_i) + hf\big(x_i, y(x_i)\big) + \frac{h^2}{2}\big[f_x\big(x_i, y(x_i)\big) + f\big(x_i, y(x_i)\big) \\
&\qquad \cdot f_y\big(x_i, y(x_i)\big)\big]
\end{aligned}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
y'(x_i) &= f\big(x_i, y(x_i)\big) \\
y''(x_i) &= f_x\big(x_i, y(x_i)\big) + f_y\big(x_i, y(x_i)\big) \cdot y'(x_i) \\
&= f_x\big(x_i, y(x_i)\big) + f\big(x_i, y(x_i)\big) \cdot f_y\big(x_i, y(x_i)\big)
\end{aligned}
$$

可以构造：

$$
\boldsymbol{y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) + \frac{h^2}{2}[f_x(x_i, y_i) + f(x_i, y_i) f_y(x_i, y_i)]}
$$

类似地，**若取前$p+1$项作为$y(x_{n+1})$的近似值，可得到局部截断误差为$O(h^{p+1})$的数值计算公式。**这些公式的计算必须依赖于求$y(x_i)$的p阶导数，除非$f(x,y)$足够简单，否则直接用泰勒展开法求解将很复杂。但是**泰勒级数展开法的基本思想是很多数值方法的基础。**

- **龙格–库塔法的基本思路**

用复合函数的计算来代替各阶偏导数，通过不同点的函数值组合（$y = y(x)$平均斜率（6.14）的近似）**间接使用泰勒展开来达到高阶局部截断误差的目的。**龙格–库塔法保留了泰勒展开法所具有的高阶局部截断误差，同时避免了计算函数

$f(x,y)$ 的高阶导数。

设 m 是一个正整数，称方程

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h(\alpha_1 K_1 + \alpha_2 K_2 + \cdots + \alpha_m K_m) \\ K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f(x_i + \lambda_2 h, y_i + \mu_2 h K_1) \\ \cdots\cdots\cdots \\ K_m = f(x_i + \lambda_m h, y_i + \mu_m h K_{m-1}) \end{cases} \tag{6.17}$$

为 m **级龙格–库塔法**。其中 $0 \le \lambda_j \le 1$, α_j, μ_j 是待定常数，由局部截断误差阶等来确定。

- **基本选取原则：**y_{n+1} 的展开表达式：

$$y_{i+1} = y_i + a_1 h + \frac{1}{2!} a_2 h^2 + \frac{1}{3!} a_3 h^3 + \cdots$$

与 $y(x_{i+1})$ 在 (x_i, y_i) 处的泰勒展开式：

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + h y'(x_i) + \frac{1}{2!} h^2 y''(x_i) + \frac{1}{3!} h^3 y'''(x_i) + \cdots$$

有尽可能多的项相重合，以减小局部截断误差。

- **以 $m = 2$ 为例，来确定(6.17)中的系数：**

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h(\alpha_1 K_1 + \alpha_2 K_2) \\ K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f(x_i + \lambda_2 h, y_i + \mu_2 h K_1) \end{cases} \tag{6.18}$$

将 K_2 在 (x_i, y_i) 处泰勒展开，且 $y_i = y(x_i)$，有

$$\boldsymbol{y_{i+1}} = y_i + h(\alpha_1 K_1 + \alpha_2 K_2) = y_i + \alpha_1 h f(x_i, y_i)$$

$$+\alpha_2 h[f(x_i, y_i) + \lambda_2 h f_x(x_i, y_i) + \mu_2 h K_1 f_y(x_i, y_i) + O(h^2)]$$

$$= \boldsymbol{y_i + (\alpha_1 + \alpha_2) f(x_i, y_i) h}$$

$$+ \boldsymbol{\alpha_2 [\lambda_2 f_x(x_i, y_i) + \mu_2 f(x_i, y_i) f_y(x_i, y_i)] h^2 + O(h^3)}$$

又

$$\boldsymbol{y(x_{i+1})} = y(x_i) + y'(x_i)h + \frac{1}{2}y''(x_i)h^2 + O(h^3)$$

$$= \boldsymbol{y_i + f(x_i, y_i)h}$$

$$+ \boldsymbol{\frac{1}{2}[f_x(x_i, y_i) + f_y(x_i, y_i)f(x_i, y_i)]h^2 + O(h^3)}$$

注： $y''(x_i) = \frac{df(x_i,y_i)}{dx} = f_x(x_i, y_i) + f_y(x_i, y_i)f(x_i, y_i)$

比较 y_{i+1} 与 $y(x_{i+1})$ 的表达式，只要选取

$$\begin{cases} \boldsymbol{\alpha_1 + \alpha_2 = 1} \\ \boldsymbol{\alpha_2\lambda_2 = \frac{1}{2}} \\ \boldsymbol{\alpha_2\mu_2 = \frac{1}{2}} \end{cases} \qquad \textbf{(6.19)}$$

由此得到**一族二阶龙格-库塔法。**即对上述四个未知数三个方程的不定方程组，任一未知数可设为自由变量，求出其余三个未知数，这样**每一组合就确定了一种二阶龙格-库塔格式**。

当取 $\alpha_1 = 0, \alpha_2 = 1, \lambda_2 = \mu_2 = \frac{1}{2}$，**得到中点公式：**

$$y_{i+1} = y_i + hf\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{h}{2}f(x_i, y_i)\right) \qquad \textbf{(6.20)}$$

取 $\alpha_1 = \frac{1}{4}, \alpha_2 = \frac{3}{4}, \lambda_2 = \mu_2 = \frac{2}{3}$，**得到休恩（Heun）公式：**

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{4}h[f(x_i, y_i) + 3f\left(x_i + \frac{2}{3}h, y_i + \frac{2}{3}hf(x_i, y_i)\right)]$$

取 $\alpha_1 = \frac{1}{2}, \alpha_2 = \frac{1}{2}, \lambda_2 = \mu_2 = 1$，**得到改进欧拉公式：**

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f\big(x_{i+1}, y_i + hf(x_i, y_i)\big)]$$

2.2 经典龙格-库塔法

类似于二阶龙格-库塔公式的推导，可以得到更高价的龙格-

库塔公式。当$m = 4$时，可以得到**四阶经典龙格–库塔法：**

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_1\right) \\ K_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_2\right) \\ K_4 = f(x_i + h, y_i + hK_3) \end{cases} \tag{6.21}$$

四阶经典龙格–库塔法每一步需要 4 次计算函数值$f(x, y)$，它具有**四阶精度**，即**局部截断截断**是$O(h^5)$。

四阶经典龙格–库塔法精度较高，可满足一般工程计算的要求。

例　设步长$h = 0.2$, 从$x = 0$到$x = 1$，用**四阶经典龙格–库塔法**求解初值问题

$$\begin{cases} y' = y - \frac{2x}{y} \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

解　四阶经典龙格–库塔法:

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

下表记录了计算结果，其中 $y(x_i)$ 表示准确解。

x_i	y_i	$y(x_i)$
0．2	1．1832	1．1832
0．4	1．3417	1．3416
0．6	1．4833	1．4832
0．8	1．6125	1．6125
1．0	1．7321	1，7321

例 3、例 4 参见教材 p. 156-158。

比较四阶经典龙格-库塔法和改进欧拉法的计算结果，显然四阶经典龙格-库塔法精度高。许多计算实例表明，要达到相同的精度，四阶经典龙格-库塔法的步长可以比二阶方法的步长大十倍，而四阶经典龙格-库塔法每步的计算量仅比二阶方法大一倍，所以总的计算量仍比二阶方法小。正是由于上述原因，**工程上常用四阶经典龙格-库塔法**。高于四阶的方法由于每步计算量将增加较多，而精度提高不快，因此使用得也比较少。

然而值得指出的是，龙格-库塔法的推导是基于泰勒级数展开的方法，因而它要求所求的解具有较好的光滑性质。如果解的光滑性差，那么，使用四阶龙格-库塔方法求得的数值解，其精度可能反而不如改进的欧拉方法。在实际计算时，应当针对问题的具体特点选择合适的算法。

- 一般地，m **级龙格-库塔法所能达到的最大阶** p **的关系如下：**

m	2	3	4	5	6	7	8	9	10
p	2	3	4	4	5	6	6	7	7

2.3 步长的自动选择

在微分方程的数值解中，选择适当的步长是非常重要的。从截断误差来看，步长越小，截断误差就越小。但是，随着步长的减小，在一定的求解区间内所需要走的步数就增多，这样会引起计算量的增大，并且会引起舍入误差的大量积累与传播。因此，**如何选择步长是微分方程数值解法需要考虑的问题。**

以四阶经典龙格–库塔法为例。从结点 x_i 出发，以 h 为步长求一个近似值记为 $y_{i+1}^{(h)}$，由于局部截断误差为 $O(h^5)$，故有

$$y(x_{i+1})-y_{i+1}^{(h)}\approx ch^5 \tag{6.22}$$

这里假定系数 c 变化很慢，近似常数，并且在 h 很小时，c 与 h 无关。然后将步长折半，即取 $\frac{h}{2}$ 为步长，从 x_i 跨两步到 x_{i+1}，求得一个近似值 $y_{i+1}^{(\frac{h}{2})}$ 每跨一步的截断误差是 $c(\frac{h}{2})^5$，因此有

$$y(x_{i+1})-y_{i+1}^{(\frac{h}{2})}\approx 2c(\frac{h}{2})^5 \tag{6.23}$$

可以看出，步长折半后，误差大约减少 $\frac{1}{16}$，即

$$\frac{y(x_{i+1})-y_{i+1}^{(\frac{h}{2})}}{y(x_{i+1})-y_{i+1}^{(h)}}\approx\frac{1}{16}$$

由此易得出下列误差估计式：

$$y(x_{i+1})\approx\frac{2^4 y_{i+1}^{(\frac{h}{2})}-y_{i+1}^{(h)}}{2^4-1} \tag{6.24}$$

取：

$$\boldsymbol{y_{i+1}=\frac{2^4 y_{i+1}^{(\frac{h}{2})}-y_{i+1}^{(h)}}{2^4-1}} \qquad \textbf{(6.25)}$$

作为 $y(x_{i+1})$的近似值，则其精度比 $y_{i+1}^{(h)}$ 与 $y_{i+1}^{(\frac{h}{2})}$ 都要高（**理查森外推方法**）。

(6.24)式可以改写成：

$$y(x_{i+1})-y_{i+1}^{\left(\frac{h}{2}\right)}\approx\frac{1}{2^4-1}\left(y_{i+1}^{(\frac{h}{2})}-y_{i+1}^{(h)}\right) \qquad \textbf{(6.26)}$$

这样，**可以通过检查步长折半前后两次计算结果的偏差**

$$\Delta\triangleq\left|y_{i+1}^{\left(\frac{h}{2}\right)}-y_{i+1}^{(h)}\right|$$

来判断所选的步长是否合适：

（1）对于给定的精度 $\boldsymbol{\varepsilon}$，如果 $\Delta>\boldsymbol{\varepsilon}$，反复将步长折半进行计算，直至 $\Delta<\boldsymbol{\varepsilon}$ 为止，这时取步长折半后的“新值”作为结果；

（2）如果 $\Delta<\boldsymbol{\varepsilon}$，反复将步长加倍，直到 $\Delta>\boldsymbol{\varepsilon}$为止，这时取步长加倍前的“老值”作为结果。

这种通过步长加倍或折半来处理步长的方法称为**变步长方法**。表面上看，为了选择步长，每一步的计算量增加了，但总体考虑往往是合算的，尤其当解 $y(x)$变化剧烈时。

§3　收敛性与稳定性

3.1　收敛性

定义 3　若一个数值方法对任意固定的点$x_i=x_0+ih$，当

$h=\frac{x_i-x_0}{i}\to 0$（即 $i\to\infty$）时，都有 $y_i\to y(x_i)$，则称**该方法是收敛的**。

收敛性与方法的整体截断误差有关，记**整体截断误差** $\boldsymbol{\varepsilon_i=y(x_i)-y_i}$ 为在 x_i 处的准确值 $y(x_i)$与数值方法得到的近似值 y_i之间的误差，则有

定理 1 设 $f(x,y)$ 关于 y 满足利普希茨条件，即存在常数 L，使得

$$|f(x,y_1)-f(x,y_2)|\le L|y_1-y_2| \quad (\forall\, x\in[a,b]) \quad \textbf{(6.27)}$$

且 $y''(x)$有界，记 $M=\max_{x\in[a,b]}|y''(x)|$，则**欧拉方法(6.4)的整体截断误差有估计式：**

$$\boldsymbol{|\varepsilon_i|\le e^{L(b-a)}|\varepsilon_0|+\frac{Mh}{2L}\left(e^{L(b-a)}-1\right)} \qquad \textbf{(6.28)}$$

其中 $\varepsilon_0=y(x_0)-y_0$。

当欧拉方法的初始值 y_0 和原问题初始值 $y(x_0)$一致时（$\varepsilon_0=0$），有

$$\boldsymbol{|\varepsilon_i|\le\frac{Mh}{2L}\left(e^{L(b-a)}-1\right)=O(h)} \qquad \textbf{(6.29)}$$

即具有**一阶收敛速度**。

证明 由欧拉公式及泰勒展开，有

$$y_i=y_{i-1}+hf(x_{i-1},y_{i-1})$$

$$y(x_i)=y(x_{i-1})+y'(x_{i-1})h+\frac{1}{2}y''(\varsigma)h^2$$

$$=y(x_{i-1})+hf(x_{i-1},y(x_{i-1}))+\frac{1}{2}y''(\varsigma)h^2,\ \varsigma\in(x_{i-1},x_i)$$

两式相减，得

$$y(x_i)-y_i=y(x_{i-1})-y_{i-1}+h[f(x_{i-1},y(x_{i-1}))$$
$$-f(x_{i-1},y_{i-1})]+\frac{1}{2}y''(\varsigma)h^2$$

于是，得

$$|y(x_i)-y_i|\le|y(x_{i-1})-y_{i-1}|+hL|y(x_{i-1})-y_{i-1}|+\frac{M}{2}h^2$$
$$=(1+hL)|y(x_{i-1})-y_{i-1}|+\frac{M}{2}h^2$$

所以：

$$|y(x_i)-y_i|\le(1+hL)^i|y(x_0)-y_0|+\frac{Mh}{2L}[(1+hL)^i-1]$$

由： $1\le(1+hL)^i\le(1+\frac{L(b-a)}{n})^n\le e^{L(b-a)}$

得：

$$|\varepsilon_i|\le e^{L(b-a)}|\varepsilon_0|+\frac{Mh}{2L}(e^{L(b-a)}-1)。$$

- **欧拉法整体截断误差的阶与 h 同阶，而比局部截断误差低一阶。**
- **整体截断误差与局部截断误差之间关系：**

  整体截断误差=O（h^{-1}*局部截断误差）。

3.2 稳定性

微分方程初值问题的数值方法用差分格式进行计算的过程中，初始值会有误差，计算过程中也会产生舍入误差。**这些误差（或称扰动）的传播、积累对以后的计算结果将产生怎样的影响？这就是差分方法的数值稳定性问题。**

- (*) 称欧拉方法**(6.4)**是**稳定的**，如果存在正常数 C 及 h_0，使得对任意初始值 y_0 和 z_0 的欧拉方法的解 y_i 和 z_i 满足估计式

  $$|y_i - z_i| \le C|y_0 - z_0|, \qquad x_0 \le x_0 + ih \le b, \qquad h \le h_0$$

(*) **定理** 设 $f(x,y)$ 关于 y 满足利普希茨条件，则欧拉方法**(6.4)**是稳定的。

证明 初始值为 y_0 和 z_0 的欧拉方法的解为

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$$

$$z_{i+1} = z_i + hf(x_i, z_i)$$

两式相减，并类似于定理 1 的证明方法，有

$$|y_{i+1} - z_{i+1}| \le (1 + hL)^{i+1}|y_0 - z_0| \le e^{L(b-x_0)}|y_0 - z_0|\ 。$$

定义 4 设用某一数值方法计算 y_i 时，所得到的实际计算结果为 $\tilde{y}_i$，且由误差 $\delta_i = y_i - \tilde{y}_i$ 引起以后各结点处 $y_j\ (j > i)$ 的误差为 δ_j，如果总有 $|\delta_j| \le |\delta_i|$，则称该方法是**绝对稳定**的。

一个数值方法的绝对稳定性与方法本身有关，也与 $f(x,y)$ 和步长 h 有关。

稳定性问题比较复杂，为简化讨论，通常考虑如下**试验方程**（**即取：$f(x,y) = \lambda y$**）**：**

$$y' = \lambda y \tag{6.30}$$

其中 λ 是一个复常数，记 $\tilde{h} = \lambda h$。能使某一数值方法绝对稳定的 $\tilde{h}$ 的允许取值范围称为该方法的**绝对稳定域**。

注：对于一个数值方法，尽管试验方程绝对稳定，也不一定保证

对一般方程绝对稳定。但**试验方程在一定程度上反映了数值方法的某些特性**。

- **欧拉方法的绝对稳定性：**

试验方程 $y' = \lambda y$ 的欧拉格式为

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

当 y_i 有误差而变为 $\tilde{y}_i$ 时，有

$$\tilde{y}_{i+1} = (1 + \tilde{h})\tilde{y}_i$$

记 $\delta_i = y_i - \tilde{y}_i$，两式相减有

$$\delta_{i+1} = (1 + \tilde{h})\delta_i$$

要使误差不增加，则必须选取 $\tilde{h}$，使

$$|\mathbf{1} + \tilde{\boldsymbol{h}}| \le \mathbf{1} \qquad \textbf{(6.31)}$$

即**欧拉方法的绝对稳定区域**是以 $(-1,0)$ 为中心、半径为 1 的圆形区域。**欧拉方法是条件稳定的。**

类似地，可以得到（参见教材图 6-4～图 6-6，p. 162）：

- **向后欧拉方法绝对稳域分别为：$|\mathbf{1} - \tilde{\boldsymbol{h}}| > \mathbf{1}$**
- **改进欧拉方法的绝对稳域分别为：**

$$|\mathbf{1} + \tilde{\boldsymbol{h}} + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\tilde{\boldsymbol{h}}^{\mathbf{2}}| \le \mathbf{1} \qquad \textbf{(6.32)}$$

注： $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[\lambda y_i + \lambda(y_i + h\lambda y_i)] = (1 + \tilde{h} + \frac{1}{2}\tilde{h}^2)y_i$

得：$\delta_{i+1} = (1 + \tilde{h} + \frac{1}{2}\tilde{h}^2)\delta_i$，所以：$|1 + \tilde{h} + \frac{1}{2}\tilde{h}^2| \le 1$。

- **经典龙格-库塔法的绝对稳域分别为：**

$$|\mathbf{1} + \tilde{\boldsymbol{h}} + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\tilde{\boldsymbol{h}}^{\mathbf{2}} + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{6}}\tilde{\boldsymbol{h}}^{\mathbf{3}} + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{24}}\tilde{\boldsymbol{h}}^{\mathbf{4}}| \le \mathbf{1} \qquad \textbf{(6.33)}$$

例 5 见教材 p. 163。

对于一般方程 $\frac{dy}{dx}=f(x,y)$，可近似地取

$$\lambda \approx -|\frac{\partial f}{\partial y}|_{(x_i,y_i)}$$

以便判断绝对稳定性，并用以确定求 y_{i+1}时的步长 h_{i+1}。

(*) 线性多步法

- **一般形式**

龙格-库塔法每一步都需要先预报几个点上的导数值，计算量比较大，而计算 y_{n+1} 之前已经得到一系列结点 $x_n, x_{n-1}, \cdots$ 上的导数值，利用这些“老信息”来减少计算量，这就是多步法的基本出发点。**多步法中最常用的是线性多步法**。**线性多步法是利用已求出若干结点 $x_n, x_{n-1}, \cdots$ 上的近似值 $y_n, y_{n-1}, \cdots$ 和其一阶导数 $y'_n, y'_{n-1}, \cdots$ 的线性组合来求出下一个结点 x_{n+1} 处的近似值 y_{n+1}，写成一般形式：**

$$y=\sum_{i=0}^{k-1}\alpha_i y_{n-i}+h\sum_{i=-1}^{k-1}\beta_i y'_{n-i}\text{，}n=k,k+1,\cdots$$

其中 α_i, β_i 为待定常数。若 $\alpha_{k-1}^2+\beta_{k-1}^2\neq 0$，称为**线性 k 步法**。当 $\beta_{-1}=0$ 时，右端是已知的，称为**显示多步法**；当 $\beta_{-1}\neq 0$ 时，右端有未知的 $y'_{n+1}=f(x_{n+1},y_{n+1})$，称为**隐式多步法**。 J

构造线性多步法公式常用泰勒展开法和数值积分法。下面仅以最简单的例子进行说明，进而可推广到一般情况。

- **亚当斯（Adams）格式**

当线性多步法取如下形式的 k 步法：

$$y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=-1}^{k-1}\beta_i y'_{n-i}$$

称为**亚当斯法**，当 $\beta_{-1}=0$ 时为**显式亚当斯法**，当 $\beta_{-1}\neq 0$ 时为**隐式亚当斯法**。

- **泰勒展开构造亚当斯格式的基本思路：**先将线性多步法的表达式 y_{n+1} 在 $x=x_n$ 处进行泰勒展开，并与真实值 $y(x_{n+1})$ 在 x_n 处的泰勒展开式相比较，使其局部截断误差为 $O(h^{k+1})$，以此确定格式中的系数，便得到 k **阶亚当斯格式**。

设用 x_{n-1}, x_n 两点的斜率值加权平均作为区间 $[x_n, x_{n+1}]$ 上的平均斜率，有计算格式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h[(1-\lambda)y'_n + \lambda y'_{n-1}] \\ y'_n = f(x_n, y_n) \\ y'_{n-1} = f(x_{n-1}, y_{n-1}) \end{cases}$$

选取参数 λ，使上述格式有二阶精度。

将 y'_{n-1} 在 x_n 点泰勒展开

$$y'_{n-1} = y'_n + y''_n(-h) + \frac{1}{2!}y'''_n(-h)^2 + \cdots$$

代入计算格式化简，并假设 $y_n = y(x_n), y_{n-1} = y(x_{n-1})$，因此有

$$y_{n+1} = y(x_n) + hy'(x_n) - \lambda h^2 y''(x_n) + \cdots$$

和

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{1}{2}hy''(x_n) + \cdots$$

两式相比较，需取$\lambda=-\dfrac{1}{2}$才使计算格式具有二阶精度。这样导出的计算格式：

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}(3y'_n-y'_{n-1})$$

称做**二阶亚当斯格式**。

类似地，可以导出**三阶亚当斯格式：**

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{12}(23y'_n-16y'_{n-1}+5y'_{n-2})$$

和**四阶亚当斯格式：**

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}(55y'_n-59y'_{n-1}+37y'_{n-2}-9y'_{n-3})$$

这里和下面均记$y'_{n-k}=f(x_{n-k},y_{n-k})$。

上述几种亚当斯格式都是显式的，算法比较简单，但用结点$x_n,x_{n-1},\cdots$的斜率值来预报区间$[x_n,x_{n-1}],\cdots$上的平均斜率是个外推过程，效果不够理想。为了进一步改善精度，**变外推为内插**，即增加结点x_{n+1}的斜率值来得出$[x_n,x_{n-1}],\cdots$上的平均斜率。譬如，考察形如

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+h[(1-\lambda)y'_{n+1}+\lambda y'_n] \\ y'_n=f(x_{n,}y_n) \\ y'_{n+1}=f(x_{n+1},y_{n+1}) \end{cases}$$

的隐式格式，设右端的$y_n=y(x_n),y_{n+1}=y(x_{n+1})$，泰勒展开有

$$y_{n+1}=y(x_n)+hy'(x_n)+(1-\lambda)h^2y''(x_n)+\cdots$$

当取$\lambda=\frac{1}{2}$时，就可构造出**二阶隐式亚当斯格式：**

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}(y'_{n+1}+y'_n)$$

其实就是**梯形格式**。

类似地，可以导出**三阶隐式亚当斯格式：**

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{12}(5y'_{n+1}+8y'_n-y'_{n-1})$$

和**四阶隐式来当斯格式：**

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}(9y'_{n+1}+19y'_n-5y'_{n-1}+y'_{n-2})$$

§4　一阶方程组与高阶方程的数值解法

4.1　一阶方程组初值问题的数值解法

一阶常微分方程组初值问题：

$$\begin{cases}\dfrac{dy_i}{dx}=f_i(x,y_1,y_2,\cdots,y_n)\\ y_i(x_0)=y_{i0}\end{cases},i=1,2,\cdots,n$$

若把其中的未知函数、方程右端都表成向量形式

$$Y=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^T,\quad F=(f_1,f_2,\cdots,f_n)^T$$

初值条件表示成

$$Y(x_0)=Y_0=(y_{10,}y_{20},\cdots,y_{n0})^T$$

则方程可表示成：

$$\begin{cases} \dfrac{dY}{dx} = F(x, Y) \\ Y(x_0) = Y_0 \end{cases}$$

- **这种写法的优点：简洁且形式上与一个方程的初值问题类似，其数值解法可以完全按照一个方程的情形去做，甚至误差估计、收敛性、稳定性等可以类似地加以讨论。**

例如，**对于方程组：**

$$\begin{cases} y' = f(x, y, z), \ \ y(x_0) = y_0 \\ z' = g(x, y, z), \ \ z(x_0) = z_0 \end{cases} \tag{6.34}$$

引入**向量**记号：

$$Y(x) = \begin{pmatrix} y(x) \\ z(x) \end{pmatrix}, F(x, Y) = \begin{pmatrix} f(x, y, z) \\ g(x, y, z) \end{pmatrix}, Y(x_0) = \begin{pmatrix} y(x_0) \\ z(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}$$

令 $x_i = x_0 + ih, \ i = 1,2,\cdots$，以 y_i, z_i 表示结点 x_i 上的近似解，则：

- **改进的欧拉格式的预报公式：**

$\tilde{Y}_{i+1} = Y_i + hF(x_i, Y_i)$，即 $\begin{pmatrix} \tilde{y}_{i+1} \\ \tilde{z}_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_i \\ z_i \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} f(x_i, y_i, z_i) \\ g(x_i, y_i, z_i) \end{pmatrix}$

或： $\begin{cases} \tilde{y}_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i, z_i) \\ \tilde{z}_{i+1} = z_i + hg(x_i, y_i, z_i) \end{cases}$

校正公式：

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \dfrac{h}{2}[f(x_i, y_i, z_i) + f(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1}, \tilde{z}_{i+1})] \\ z_{i+1} = z_i + \dfrac{h}{2}[g(x_i, y_i, z_i) + g(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1}, \tilde{z}_{i+1})] \end{cases}$$

● **四阶经典龙格—库塔公式：**

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ z_{i+1} = z_i + \frac{h}{6}(L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4) \end{cases} \tag{6.35}$$

式中：

$$\begin{cases} K_1 = f(x_i, y_i, z_i) \\ L_1 = g(x_i, y_i, z_i) \end{cases}$$

$$\begin{cases} K_2 = f(x_i + \dfrac{h}{2}, y_i + \dfrac{h}{2}K_1, z_i + \dfrac{h}{2}L_1) \\ L_2 = g(x_i + \dfrac{h}{2}, y_i + \dfrac{h}{2}K_1, z_i + \dfrac{h}{2}L_1) \end{cases}$$

$$\begin{cases} K_3 = f(x_i + \dfrac{h}{2}, y_i + \dfrac{h}{2}K_2, z_i + \dfrac{h}{2}L_2) \\ L_3 = g(x_i + \dfrac{h}{2}, y_i + \dfrac{h}{2}K_2, z_i + \dfrac{h}{2}L_2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} K_4 = f(x_i + h, y_i + hK_3, z_i + hL_3) \\ L_4 = g(x_i + h, y_i + hK_3, z_i + hL_3) \end{cases}$$

利用结点值 y_i, z_i，首先计算$K_1, L_1, K_2, L_2, K_3, L_4, K_4$，然后代入上式，即可求得结点值 y_{i+1}, z_{i+1}。

向量形式的经典龙格-库塔法参见教材(6.36)、(6.37)（p. 165）。

4.2 高阶方程初值问题的数值解法

对于如下形式的高阶常微分方程：

$$y^{(n)} = f\left(x, y, y', \cdots, y^{(n-1)}\right)$$

其初值问题应在初值点 $x = x_0$ 处给出 n 个条件：

$$y(x_0)=y_0, y'(x_0)=y_0', \cdots, y^{(n-1)}(x_0)=y_0^{(n-1)}$$

可引进新的未知函数：

$$y_1=y, y_2=y', \cdots, y_n=y^{(n-1)}$$

从而**把上述初值问题变成一个常微分方程组：**

$$\begin{cases} y_1'=y_2 \\ y_2'=y_3 \\ \vdots \\ y_{n-1}'=y_n \\ y_n'=f(x, y_1, y_2, \cdots, y_{n-1}) \end{cases}$$

初始条件为：

$$y_1(x_0)=y_0, y_2(x_0)=y_0', \cdots, y_n(x_0)=y_0^{(n-1)}$$

例如，**对于下列二阶常微分方程初值问题：**

$$\begin{cases} y''=f(x, y, y') \\ y(x_0)=y_0, y'(x_0)=y_0' \end{cases} \tag{6.38}$$

若引入新的变量 $z=y'$，即可化为**一阶方程组的初值问题：**

$$\begin{cases} y'=z, & y(x_0)=y_0 \\ z'=f(x, y, z), & z(x_0)=y_0' \end{cases} \tag{6.39}$$

则由公式**(6.35)**，可得：

- **四阶经典龙格—库塔公式**：

$$\begin{cases} y_{i+1}=y_i+\frac{h}{6}(K_1+2K_2+2K_3+K_4) \\ z_{i+1}=z_i+\frac{h}{6}(L_1+2L_2+2L_3+L_4) \end{cases}$$

其中：

$$\begin{cases}K_1 = z_i \\ L_1 = f(x_i, y_i, z_i)\end{cases}$$

$$\begin{cases}K_2 = z_i + \dfrac{h}{2}L_1 \\ L_2 = f(x_i + \dfrac{h}{2}, y_i + \dfrac{h}{2}K_1, z_i + \dfrac{h}{2}L_1)\end{cases}$$

$$\begin{cases}K_3 = z_i + \dfrac{h}{2}L_2 \\ L_3 = f(x_i + \dfrac{h}{2}, y_i + \dfrac{h}{2}K_2, z_i + \dfrac{h}{2}L_2)\end{cases}$$

$$\begin{cases}K_4 = z_i + hL_3 \\ L_4 = f(x_i + h, y_i + hK_3, z_i + hL_3)\end{cases}$$

消去K_1, K_2, K_3, K_4，**上述公式可简化为：**

$$\begin{cases}y_{i+1} = y_i + hz_i + \frac{h^2}{6}(L_1 + L_2 + L_3) \\ z_{i+1} = z_i + \frac{h}{6}(L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4)\end{cases} \tag{6.40}$$

其中：

$$\begin{cases}L_1 = f(x_i, y_i, z_i) \\ L_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}z_i, z_i + \frac{h}{2}L_1\right) \\ L_3 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}z_i + \frac{h^2}{4}L_1, z_i + \frac{h}{2}L_2) \\ L_4 = f(x_i + h, y_i + hz_i + \frac{h^2}{2}L_2, z_i + hL_3)\end{cases} \tag{6.41}$$

例 6　求微分方程

$$\begin{cases}y'' - 2y' + 2y = e^{2x}\sin x \\ y(0) = -0.4 \\ y'(0) = -0.6\end{cases}$$

的解 $x \in [0,1]$，取步长 $h = 0.1$。

解 作变换 $z = y'$，则上述二阶微分方程转为一阶方程组：

$$\begin{cases} y' = z \\ z' = e^{2x} sinx - 2y + 2z \triangleq f(x,y,z) \\ y(0) = -0.4 \\ z(0) = -0.6 \end{cases}$$

用经典龙格—库塔格式：

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + hz_i + \dfrac{h^2}{6}(L_1 + L_2 + L_3) \\ z_{i+1} = z_i + \dfrac{h}{6}(L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4) \end{cases}$$

其中：

$$\begin{cases} L_1 = f(x_i, y_i, z_i) \\ L_2 = f\left(x_i + \dfrac{h}{2}, y_i + \dfrac{h}{2} z_i, z_i + \dfrac{h}{2} L_1\right) \\ L_3 = f(x_i + \dfrac{h}{2}, y_i + \dfrac{h}{2} z_i + \dfrac{h^2}{4} L_1, z_i + \dfrac{h}{2} L_2) \\ L_4 = f(x_i + h, y_i + hz_i + \dfrac{h^2}{2} L_2, z_i + hL_3) \end{cases}$$

求解结果如下表所示。

表 6-6

x_i	y_i	$y(x_i)$	$\lvert y(x_i) - y_i \rvert$
0	-0.4	0.4	0
0.1	-0.46173334	-0.4617329	0.37×10^{-6}
0.2	-0.52555988	-0.52555905	0.83×10^{-6}
0.3	-0.58860005	-0.58860005	0.139×10^{-5}

0.4	-0.64661028	-0.64661028	0.2036×10^{-5}
0.5	-0.69356395	-0.69356395	0.271×10^{-5}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
1.0	-0.35339886	-0.35339436	0.450×10^{-5}

§5　边值问题的数值解法

求解二阶常微分方程：

$$y'' = f(x, y, y'),\ \ x \in [a, b] \tag{6.42}$$

需要两个特定的条件，除了初值条件外，也可以通过给定边值条件来确定。**边值条件一般有下列三种给定法：**

（1）**第一边值条件：** $y(a) = \alpha$，$y(b) = \beta$;

（2）**第二边值条件：** $y'(a) = \alpha$，$y'(b) = \beta$;

（3）**第三边值条件：** $\begin{cases} y'(a) - \omega_1 y(a) = \alpha \\ y'(b) + \omega_2 y(b) = \beta \end{cases}$

其中 $\omega_1 \geq 0$，$\omega_2 \geq 0$，$\omega_1 + \omega_2 > 0$。

本节介绍两点边值问题的打靶法和有限差分法。

5.1　打靶法

- **打靶法：把边值问题转化为初值问题的一种数值方法。**

考虑二阶常微分方程第一边值问题：

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y'), & a < x < b \\ y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta \end{cases} \tag{6.43}$$

假定方程**(6.43)**存在唯一解。

选取适当的 t，构造初值问题：

$$\begin{cases} y'' = f(x,y,y'), & a < x < b \\ y(a) = \alpha, & y'(a) = t \end{cases} \quad \textbf{(6.44)}$$

(6.43)、 **(6.44)**的解分别记为 $y(x)$与 $y(x,t)$。若能使：

$$|y(b,t) - \beta| < \varepsilon \quad \textbf{(6.45)}$$

其中：ε为给定的精度要求

则可以把初值问题(6.44)的解 $\boldsymbol{y(x,t)}$作为边值问题(6.43)的近似解，即表示近似“命中”精确解，见教材图 6-7，p.168。

为了满足**(6.45)**式，常常通过不断试算和修正的方法来获得$\boldsymbol{t}$的值。

先凭经验确定 $y'(a)$的两个预测值 t_1和 t_2进行试算，分别得到两个解 $y(x,t_1)$和 $y(x,t_2)$，记

$$\beta_1 = y(b,t_1),\ \ \beta_2 = y(b,t_2)$$

若 $|\beta_1 - \beta| < \varepsilon$ （或$|\beta_2 - \beta| < \varepsilon$），则取 $y(x,t_1)$（或 $y(x,t_2)$）作为边值问题**(6.43)**的近似解，并满足**(6.45)**；否则，可以通过线性插值方法（或其它方法）确定 t的新的预测值：

$$t_3 = t_1 + \frac{t_2 - t_1}{\beta_2 - \beta_1}(\beta - \beta_1)$$

然后，重新试算可得 $\beta_3, \cdots\cdots$，直到满足 $|\beta_i - \beta| < \varepsilon$为止，其中 $\beta_i = y(b,t_i)$。**$\boldsymbol{t_i}$ 计算的公式：**

$$t_i = t_{i-2} + \frac{t_{i-1} - t_{i-2}}{\beta_{i-1} - \beta_{i-2}}(\beta - \beta_{i-2}),\ i = 3,4,\cdots$$

注：（1）也可以通过**牛顿迭代法**等方法来得到 t的值。

（2）对于第二、第三边值问题，类似地可以得到相应的解。

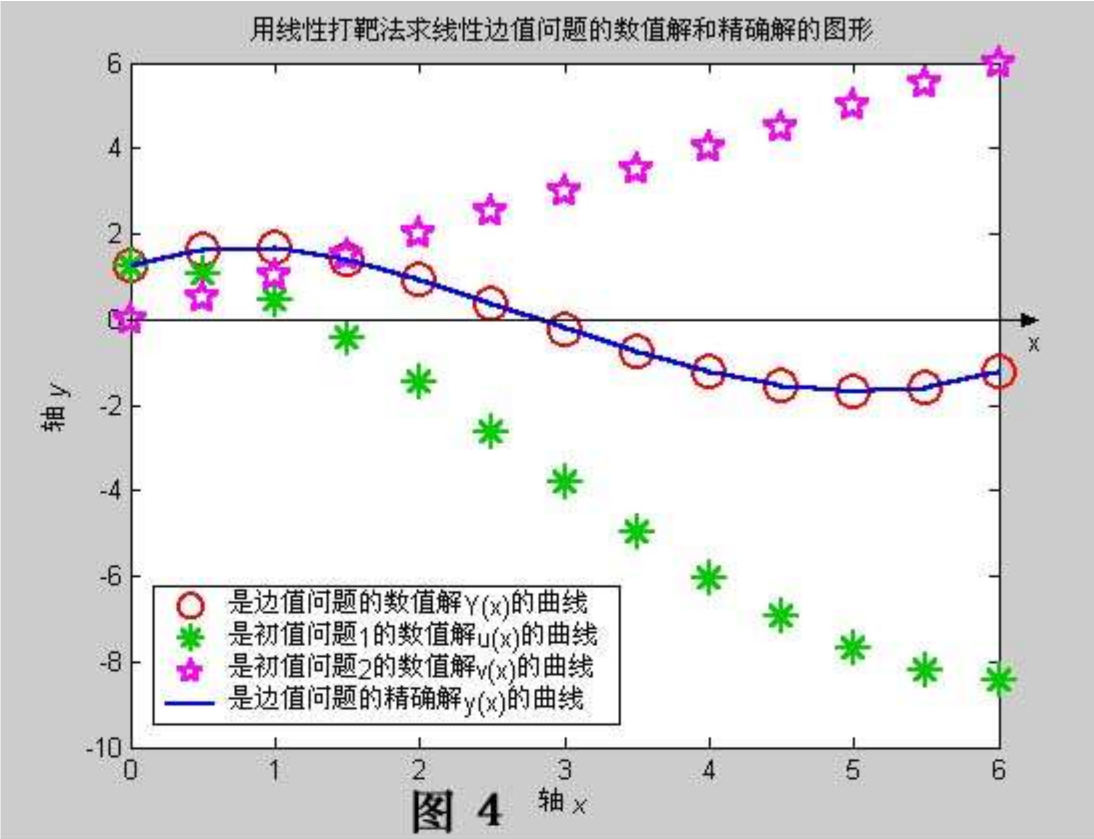


图 4

5.2　有限差分法

考虑两点边值问题

$$\begin{cases} Ly \triangleq -\dfrac{d}{dx}\left(p(x)\dfrac{dy}{dx}\right)+r(x)\dfrac{dy}{dx}+q(x)y=f(x)\,,\quad a<x<b \\ y(a)=\alpha,\quad y(b)=\beta \end{cases}$$

其中 $p(x)\in C^1[a,b],\ r(x),q(x),\ f(x)\in C[a,b],\ p(x)\ge p_0>0$，$q(x)\ge 0$。在 $x=a, x=b$ 两个端点给定两个边值条件，也可给定其他带一阶导数值的边值条件。

将区间 $[a,b]$ 均匀分成 N 等份网格，即

$$x_n=a+nh,\ h=\frac{b-a}{N};\quad n=0,1,\cdots,N$$

在每个内网格结点 x_n，令

$$Ly|_{x_n} = f|_{x_n}, \quad n = 1,2,\cdots,N-1$$

假定解 $y(x)$ 充分光滑，则由泰勒展开式，有

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx}|_{x_n} = \dfrac{y(x_{n+1}) - y(x_{n-1})}{2h} + O(h^2) \\ \dfrac{d}{dx}(p(x)\dfrac{dy}{dx})|_{x_n} = \dfrac{1}{h}((p\dfrac{dy}{dx})_{x_{n+\frac{1}{2}}} - (p\dfrac{dy}{dx})_{x_{n-\frac{1}{2}}}) + O(h^2) \\ \quad = \dfrac{1}{h}[p_{n+\frac{1}{2}} \dfrac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} - p_{n-\frac{1}{2}} \dfrac{y(x_n) - y(x_{n-1})}{h}] + O(h^2) \end{cases}$$

这里 $x_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_{n+1} + x_n),\ p_{n\pm\frac{1}{2}} = p(x_{n\pm\frac{1}{2}})$ 。

于是，有

$$-\frac{1}{h}[p_{n+\frac{1}{2}} \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} - p_{n-\frac{1}{2}} \frac{y(x_n) - y(x_{n-1})}{h}] + r_n \frac{y(x_{n+1}) - y(x_{n-1})}{2h} + q_n y(x_n) + R_n = f_n$$

其中 $R_n = O(h^2)$ 。

忽略高阶项 R_n，并用 y_n 表示 $y(x_n)$ 的近似值，得

$$-\frac{1}{h}\left(p_{n+\frac{1}{2}} \frac{y_{n+1} - y_n}{h} - p_{n-\frac{1}{2}} \frac{y_n - y_{n-1}}{h}\right) + r_n \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} + q_n y_n = f_n, \quad n = 1,2,\cdots,N-1 \qquad \textbf{(*)}$$

加上边值条件

$$y_0 = \alpha, \quad y_N = \beta \qquad \textbf{(**)}$$

方程**(*)-(**)**是关于未知量 $y_n (n = 1,2,\cdots,N-1)$ 的一个线性方程组，其系数矩阵为：

$$A=\begin{bmatrix} b_1 & -c_1 & & & \\ -a_2 & b_2 & -c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -a_{N-2} & b_{N-2} & -c_{N-2} \\ & & & -a_{N-1} & b_{N-1} \end{bmatrix}_{(N-1)\times(N-1)}$$

其中：$\begin{cases} b_n=\dfrac{1}{h^2}(p_{n+\frac{1}{2}}+p_{n-\frac{1}{2}})+q_n \\ c_n=\dfrac{1}{h^2}p_{n+\frac{1}{2}}+\dfrac{1}{2h}r_n \\ a_n=\dfrac{1}{h^2}p_{n-\frac{1}{2}}-\dfrac{1}{2h}r_n \end{cases}$

当网格步长h充分小时，A是一个对角占优的三对角矩阵，因此A是非奇异矩阵，可用追赶法直接求解。

若$p(x)\equiv 1,\ r(x)\equiv 0,\ f(x)\triangleq -\gamma(x)$，则两点边值问题为

$$\begin{cases} Ly\triangleq -y''+q(x)y=-\gamma(x),\ \ q(x)\geq 0,\ x\in[a,b] \\ y(a)=\alpha,\quad y(b)=\beta \end{cases} \qquad \textbf{(6.46)}$$

由：

$$y''(x_i)-q(x_i)y(x_i)=\gamma(x_i) \qquad \textbf{(6.47)}$$

得到的线性方程组（称为**差分方程**）为

$$\begin{cases} \dfrac{y_{i+1}-2y_i+y_{i-1}}{h^2}-q_iy_i=\gamma_i \\ y_0=\alpha,\quad y_N=\beta \end{cases},\ i=1,2,\cdots,N-1 \qquad \textbf{(6.48)}$$

整理后的**矩阵形式：**

$$Ay=b \qquad \textbf{(6.49)}$$

其中

$$A=\begin{bmatrix} -2-q_1h^2 & 1 & & & \\ 1 & -2-q_2h^2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2-q_{N-2}h^2 & 1 \\ & & & 1 & -2-q_{N-1}h^2 \end{bmatrix}_{(N-1)\times(N-1)}$$

$$y=\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-2} \\ y_{N-1} \end{pmatrix}, \qquad b=\begin{pmatrix} \gamma_1h^2-\alpha \\ \gamma_2h^2 \\ \vdots \\ \gamma_{N-2}h^2 \\ \gamma_{N-1}h^2-\beta \end{pmatrix}$$

系数矩阵 A 是一个对角占优的三对角矩阵，可用追赶法求解。

注：若边界条件 $y(b)=\beta$ 改为：$y'(b)=m$，时：

由 $y''(x_N)-q(x_N)y(x_N)=\gamma(x_N)$，得 $i=N$ 时的**(6.48)：**

$$\boldsymbol{\frac{y_{N+1}-2y_N+y_{N-1}}{h^2}-q_Ny_N=\gamma_N}$$

由 $\frac{y(x_{N+1})\ -y(x_{N-1})}{2h}=y'(x_N)+O(h^2)=m+O(h^2)$，得：

$$\boldsymbol{\frac{y_{N+1}-y_{N-1}}{2h}=m}$$

保证了其余项为 $\boldsymbol{O(h^2)}$，仍是一个二阶方法。

例 7 （见教材 p. 170）。