

The demon of Laplace (1794-1827)

拉普拉斯，《概率论的哲学试验》：我们可以把宇宙现在的状态看作是它历史的果，和未来的因。如果存在这么一个智者，它在某一时刻，能够获知驱动这个自然运动的所有的力，以及组成这个自然的所有物体的位置，并且这个智者足够强大，可以把这些数据进行分析。

那么宇宙之中从最宏大的天体到最渺小的原子都将包含在一个运动方程之中。对这个智者而言，未来将无不确定，恰如历史一样在它眼前一览无遗。

上世纪初，理查森：天气变化是由偏微分方程确定的；离散化它们可以得到“近似解”。

1916 年他组织了大量人力进行了第一次数值预报尝试。用他设计的手摇计算机一人不停计算需要 6 万 4 千天；或者一个 6 万 4 千人同时工作的计算工厂可预报 24 小时天气。

随着计算机的出现，理查森的梦想实现了：数值求解微分方程可以预测天气！

数学家们为众多的自然现象写出微分方程，部分地完成了“拉普拉斯之问”。

空气动力学 (Euler 方程组)

流体力学 (Navier-Stokes 方程组)

弹性力学 (Lame 方程等)

电磁场问题 (Maxwell 方程组)

微磁问题 (Landau-Lifshiz 方程)

量子力学 (Schrodinger 方程)

这些微分方程能够准确地描述人们想要知道的物理现象，但是微分方程是“无穷维”的，非常复杂，精确解很难找到，实际结果还是看不见摸不着的。而当代的计算机，无论多先进，只能够对付有限多个数的运算，想要在计算机上运算无穷维的微分方程，得到它的解，是不可能办到的。

退而求次之：寻找误差很小的“近似解”，画出图像，从而“眼见为实”。
即找到一个算法，编程，在计算机上运算。误差可以达到人们各种“得寸进尺”的要求，只不过要增加计算机时间。
关键：“离散化”的方法，将连续的无穷维的微分方程，变成有限多个线性或非线性方程组。

差分方程 (齐性)

$y_{n+k} = a_{k-1}y_{n+k-1} + \cdots + a_0y_n$.
 k 个初值, 寻求 k 个 “简单” 解。

根据前 k 个初值
一个新的值

加个常数项为非齐次,
非齐次可化为齐次。

$$B = \begin{bmatrix} a_{k-1} & a_{k-2} & \cdots & \cdot & \cdot & a_0 \\ 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

→ 所有解都是他们的线性
组合。

迭代序列

$$[y_{k-1}, y_{k-2}, \dots, y_0]^T \rightarrow [y_k, y_{k-1}, \dots, y_1]^T \rightarrow \dots$$

排着队的位序串
y 是 y_0 的 λ 倍 ... 后面是前面的 λ 倍

特征值 λ , 特征向量 $[\lambda^{k-1}, \dots, \lambda, 1]^T$.

差分方程的简单解: $1, \lambda, \lambda^2, \dots$. \rightarrow 等比数列.

$$\lambda^k = a_{k-1}\lambda^{k-1} + \dots + a_1\lambda + a_0.$$

$\rightarrow \lambda < 1$, 这一串数趋于 0.
可以是复数, (实虚部分别折开)

B 的特征多项式

$$p(x) = x^k - a_{k-1}x^{k-1} - \dots - a_1x - a_0.$$

$$p(x)x^n|_{x=\lambda} = 0, \quad n = 0, 1, \dots.$$

重根时, 由于 $p(\lambda) = p'(\lambda) = 0$,

$$(p(x)x^n)'|_{x=\lambda} = 0, \quad n = 0, 1, \dots$$

$$(n+k)\lambda^{n+k-1} = a_{k-1}(n+k-1)\lambda^{n+k-2} + \dots + a_1(n+1)\lambda^n + a_0n\lambda^{n-1}.$$

另一个简单解: $0, 1, 2\lambda, 3\lambda^2, \dots$.

若 $p(0.5) = p'(0.5) = 0$, 两个特解

$$1, 0.5, 0.5^2, \dots$$

$$0, 1, 2 * 0.5, 3 * 0.5^2, \dots$$

例: 若 $p(1) = p'(1) = 0$, 两个特解

$$1, 1, 1, \dots; \quad 0, 1, 2, \dots$$

差分方程的解: y_1, y_2, \dots 。

渐进稳定: 所有特征根在单位圆内。

渐进稳定 = 收敛。所有解: $y_n \rightarrow 0$ 。

稳定: 所有特征根在单位圆内或单位圆上, 且在单位圆上的根为单根。

所有解: $\{y_n\}$ 有界。

不稳定: 有特征根在单位圆外, 或在单位圆上的根为重根。

某个解: $\{y_n\}$ 无界。

可以在圆图上, 作是函数, 在-半圆段解上取值。

广义差商 \rightarrow 与差商的区别: 节点是否有重复

n 次多项式 f , x^n 系数。

n 阶广义差商: $f[x_0, x_1, \dots, x_n]$ 。

例: $f = 2x^3 + 5x^2 + 7x + 3$ 。 \rightarrow 3阶差商, 利用4个节点。

$f[1, 3, 5, 7] = 2$; $f[1, 1, 3, 7] = 2$;

$f[1, 2, 5, 4, 7] = 0$ 。

多项式-次地-次高, 只有最后一项是3次

次数没有超过阶数。

$n = 1$ 时, $\frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$;

$n > 1$ 时, $f(x) - f(x_0) = (x - x_0)f_1(x)$,
 f_1 , $n - 1$ 次, x^{n-1} 系数同 f 的 x^n 系数。
归纳得到 $f[x_0, x_1, \dots, x_n]$ 。
一般函数, 不同节点。

f 可微时, Hermite-Genocchi 公式:

$$f[x_0, x_1] = \int_0^1 \underline{f'((1-t)x_0 + tx_1)} dt = f'(\xi).$$

$$f[x_0, x_1, x_2] = \int_0^1 \int_0^{1-t_1} \underline{f''((1-t_1-t_2)x_0 + t_1x_1 + t_2x_2)} dt_2 dt_1 = \frac{1}{2} f''(\xi).$$

在三角形上做了个重积分

类似, 利用积分中值定理,

$$\underline{f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}}, \quad \underline{\xi \text{ 是所有节点的某个加权平均。}}$$

Taylor 展开

常微分方程初值问题 初值: $y(t_0) = y_0$

$$y' = f(t, y), \quad y(t_n) = y_n.$$

计算 $y(t_n + \underline{h})$ 。

$$y' = y'(t_n) = f(t_n, y_n) = f,$$

$$\begin{aligned} y'' &= y''(t_n) = f_t(t_n, y_n) + f_y(t_n, y_n)y' \\ &= f_t + f_y f. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y(t_n + h) &= y + hy' + \frac{1}{2}h^2 y'' + \cdots \\ &= y + hf + \frac{1}{2}h^2(f_t + f_y f) + \cdots. \end{aligned}$$

每一步的误差都是高阶无穷小

二元 Taylor 级数: f 在 (t_n, y_n) 展开

$$f(t, y) = f + f_t(t - t_n) + f_y(y - y_n) + \frac{1}{2}f_{tt}(t - t_n)^2 + f_{ty}(t - t_n)(y - y_n) + \frac{1}{2}f_{yy}(y - y_n)^2 + \dots$$

其中 $f = f(t_n, y_n)$, $f_t = f_t(t_n, y_n)$, \dots 。
 系数可两边在 (t_n, y_n) 求偏导得到。
 龙格-库塔: 通过计算多个点的 f 值, 得到 $y(t_n + h)$ 近似值。

推导二元 Taylor 级数:

引进参数 s ,

$$F(s) = f(t_n + s(t - t_n), y_n + s(y - y_n)), \\ s \in [0, 1].$$

$$F(0) = f(t_n, y_n), \quad F(1) = f(t, y).$$

$$\frac{dF}{ds} = (t - t_n) \frac{\partial f}{\partial t} + (y - y_n) \frac{\partial f}{\partial y}.$$

求导过程: $(t - t_n) \frac{\partial}{\partial t} + (y - y_n) \frac{\partial}{\partial y}.$

第 8 章 * 常微分方程初值问题的解法

§1 引言

一、问题分类与可解性

微分方程描述了未知函数与它的 1 阶或高阶导数之间的关系。

第 8 章 * 常微分方程初值问题的解法

§1 引言

一、问题分类与可解性

微分方程描述了未知函数与它的 1 阶或高阶导数之间的关系。

常微分方程：未知函数是单变量函数。

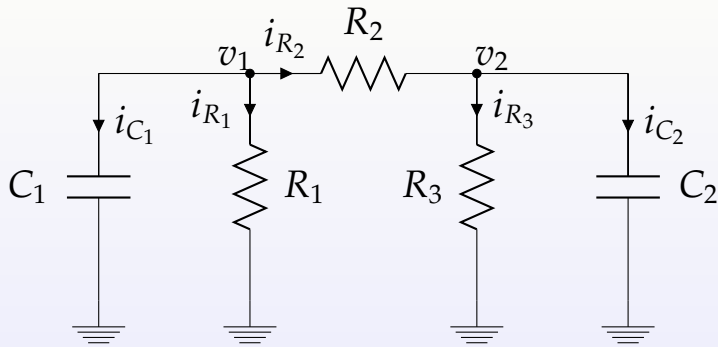
k 阶常微分方程： $g(t, y, y', \dots, y^{(k)}) = 0$ 。

显式形式： $y^{(k)} = f(t, y, y', \dots, y^{(k-1)})$ 。

设 $u_1(t) = y(t), u_2(t) = y'(t), \dots,$
 $u_k(t) = y^{(k-1)}(t)$, 等价的 1 阶显式常微
分方程组:

$$\begin{cases} u_1' = u_2 \\ u_2' = u_3 \\ \dots \\ u_k' = f(t, u_1, u_2, \dots, u_k) \end{cases}$$

例：含电容元件的电路问题



电流电压关系: $i_c = C \frac{dv_c}{dt}$, $i_R = \frac{v_R}{R}$;

节点电流方程: $i_{C_1} + i_{R_1} + i_{R_2} = 0$,

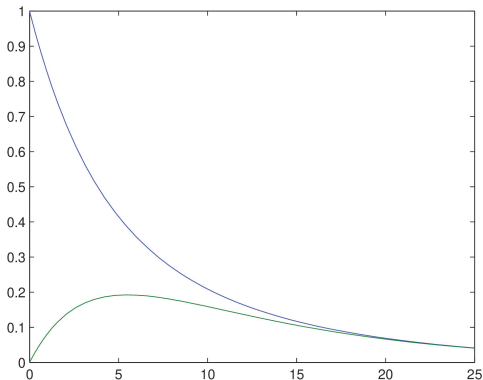
$i_{C_2} + i_{R_3} - i_{R_2} = 0$ 。

通过节点分析法得到线性常微分方程组

$$\begin{bmatrix} C_1 & 0 \\ 0 & C_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{dv_1}{dt} \\ \frac{dv_2}{dt} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} & -\frac{1}{R_2} \\ -\frac{1}{R_2} & \frac{1}{R_3} + \frac{1}{R_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$$

解是电容充放电过程。

假设 $C_1 = C_2 = 1$, $R_1 = R_2 = R_3 = 10$,
 $v_1(0) = 1$, $v_2(0) = 0$, 则 v_1 和 v_2 :



引入 $u = (\theta_1, \theta_2, \dot{\theta}_1, \dot{\theta}_2)^T$, 取
 $m_1 = m_2 = l_1 = l_2 = 1$, $c = \cos(\theta_1 - \theta_2)$
和 $s = \sin(\theta_1 - \theta_2)$, $\theta_1(t)$ 和 $\theta_2(t)$ 满足
一个二阶非线性常微分方程组:

$$2\ddot{\theta}_1 + c\ddot{\theta}_2 = -g \sin \theta_1 - s\dot{\theta}_2^2,$$

$$c\ddot{\theta}_1 + \ddot{\theta}_2 = -g \sin \theta_2 + s\dot{\theta}_1^2.$$

指定第二个摆锤初始位置, 初始速度
 $\dot{\theta}_1(t) = 0$ 和 $\dot{\theta}_2(t) = 0$ 。

Matlab 演示运动过程。

某些初始位置会发生混沌运动。

例：1 阶常微分方程 $y' = y$ 。

解：原方程的解为 $y = ce^t$ ，其中 c 为任意常数。

要确定唯一解，还要附加边界条件。

例：1 阶常微分方程 $y' = y$ 。

解：原方程的解为 $y = ce^t$ ，其中 c 为任意常数。

要确定唯一解，还要附加边界条件。

初值问题：
$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = f(t, y), t \geq t_0 \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

定理

若函数 $f(t, y)$ 关于 y 满足李普希兹 (Lipschitz) 条件, 即存在常数 $L > 0$, 使得对任意的 $t \geq t_0$, 任意的 y 与 \hat{y} , 有 $|f(t, y) - f(t, \hat{y})| \leq L|y - \hat{y}|$, 则常微分方程初值问题存在唯一的解。

定理

若函数 $f(t, y)$ 关于 y 满足李普希兹 (Lipschitz) 条件, 即存在常数 $L > 0$, 使得对任意的 $t \geq t_0$, 任意的 y 与 \hat{y} , 有 $|f(t, y) - f(t, \hat{y})| \leq L|y - \hat{y}|$, 则常微分方程初值问题存在唯一的解。

当 $f(t, y)$ 的偏导数 $\frac{\partial f}{\partial y}$ 存在时, 则设 L 为 $\left| \frac{\partial f}{\partial y} \right|$ 的上界。

二、问题的敏感性

定义

对于初值问题，初值 y_0 的扰动使解 $y(t)$ 发生偏差。若 $t \rightarrow \infty$ 时 $y(t)$ 的偏差被控制在有界范围内，则称该初值问题是稳定的，否则该初值问题是不稳定的。特别地，若 $t \rightarrow \infty$ 时， $y(t)$ 的偏差收敛到零，则称该初值问题是渐进稳定的。

关于定义：

- (1) 渐进稳定是比稳定更强。
 - (2) 对于不稳定初值问题，初值的扰动将使偏差趋于无穷大。
- 为了保证数值求解的有效性，初值问题需具有稳定性。

例：考察如下“模型问题”的稳定性：

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = \lambda y, t \geq t_0 \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

解：准确解 $y(t) = y_0 e^{\lambda(t-t_0)}$ 。

扰动后初值 $y_0 + \Delta y_0$ ，解为

$$\hat{y}(t) = (y_0 + \Delta y_0) e^{\lambda(t-t_0)}。$$

偏差为 $\Delta y = \Delta y_0 e^{\lambda(t-t_0)}$ 。

若 $\lambda \leq 0$, 则原问题是稳定的;
若 $\lambda > 0$, 原问题不稳定;
而且当 $\lambda < 0$ 时, 原问题渐进稳定。

若 $\lambda \leq 0$, 则原问题是稳定的;
若 $\lambda > 0$, 原问题不稳定;
而且当 $\lambda < 0$ 时, 原问题渐进稳定。
对上述“模型问题”, 若 λ 为复数, 则当 $\operatorname{Re}(\lambda) \leq 0$ 时, 问题是稳定的, 否则不稳定。

若 $\lambda \leq 0$, 则原问题是稳定的;
若 $\lambda > 0$, 原问题不稳定;
而且当 $\lambda < 0$ 时, 原问题渐进稳定。

局部稳定性: 对于 1 阶常微分方程, 考察 $\frac{\partial f}{\partial y}$ 。

§2 简单的数值解法与有关概念

常微分方程的数值解是个表格函数。

$$t_0 < t_1 < \cdots < t_n < t_{n+1} < \cdots,$$

$$y_0, y_1, \cdots, y_n, y_{n+1}, \cdots$$

$h_n = t_{n+1} - t_n$, 称为步长。

数值解法: $y_{n+1} = G(y_{n+1}, y_n, \dots, y_{n-k})$ 。

单步法: $y_{n+1} = G(y_{n+1}, y_n)$, 其它称为多步法。
→ 初值给的非常准

显格式方法: $y_{n+1} = G(y_n, \dots, y_{n-k})$, 其它称为隐格式方法。

一、欧拉法

欧拉法是一种显格式单步法,

$$y_{n+1} = y_n + h_n f(t_n, y_n).$$

例：用欧拉法求解初值问题

$$\begin{cases} y' = t - y + 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

求 $t = 0.5$ 时 $y(t)$ 的值。

解： $f(t, y) = t - y + 1$, $t_0 = 0$, $y_0 = 1$ 。

$$y_{n+1} = y_n + h(t_n - y_n + 1).$$

$h = 0.1$ 时, $y_{n+1} = 0.9y_n + 0.1t_n + 0.1$;

$h = 0.05$ 时,

$$y_{n+1} = 0.95y_n + 0.05t_n + 0.5。$$

准确解 $y(t) = t + e^{-t}$ 。

t_n	y_n	$y(x_n)$	t_n	y_n	t_n	y_n
0.1	1.000000	1.004837	0.05	1.000000	0.3	1.035092
0.2	1.010000	1.018731	0.1	1.002500	0.35	1.048337
0.3	1.029000	1.040818	0.15	1.007375	0.4	1.063420
0.4	1.056100	1.070320	0.2	1.014506	0.45	1.080249
0.5	1.090490	1.106531	0.25	1.023781	0.5	1.098737

步长取 0.05 时, 计算的误差较小。

二、数值解法的稳定性与准确度

定义

采用某个数值方法求解常微分方程初值问题，若在节点 t_n 上的函数近似值存在扰动 δ_n ，由它引起的后续各节点上的误差 $\delta_m (m > n)$ 均不超过 δ_n ，即 $|\delta_m| \leq |\delta_n|$ ，则称该方法是稳定的。

实际问题中，常微分方程数值求解大多以截断误差为主。

欧拉法的稳定性:

模型问题 $y' = \lambda y$, $\operatorname{Re}(\lambda) \leq 0$ 。

$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n$, $\delta_{n+1} = (1 + h\lambda)\delta_n$ 。

要使 $|\delta_{n+1}| \leq |\delta_n|$, 则要求 $|1 + h\lambda| \leq 1$ 。

稳定区间为 $[0, -\frac{2}{\lambda}]$, 稳定区域

$|1 + h\lambda| \leq 1$ 。

为保证稳定性, 步长 h 不能取得太大。

对于一般的常微分方程，采用欧拉法求解 $y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n)$ ，则

$$\delta_{n+1} = \delta_n + h[f(t_n, y_n + \delta_n) - f(t_n, y_n)] + O(\delta_n^2) = \delta_n[1 + h\frac{\partial f}{\partial y}(t_n, y_n)] + O(\delta_n^2),$$

稳定区域是 $\left|1 + h\frac{\partial f}{\partial y}(t_n, y_n)\right| \leq 1$ 。

考虑到问题满足局部稳定性要求，一般要求 $Re(\frac{\partial f}{\partial y}(t_n, y_n)) < 0$ 。

定义

设常微分方程初值问题的数值解法为

$y_{n+1} = G(y_{n+1}, y_n, \dots, y_{n-k})$, 假设其中 $y_{n-i} (0 \leq i \leq k)$ 均等于准确的解函数值 $y(t_{n-i})$, 则 $l_{n+1} = y(t_{n+1}) - y_{n+1}$ 为该方法的局部截断误差。

对于欧拉法来说,

$$\begin{aligned}l_{n+1} &= y(t_{n+1}) - y(t_n) - hf(t_n, y(t_n)) \\&= y(t_{n+1}) - y(t_n) - h\lambda y'(t_n) \\&= \frac{h^2}{2}y''(t_n) + O(h^3) = O(h^2)。
局部截断误差主项: $\frac{h^2}{2}y''(x_n)$ 。$$

定义

若一个求解常微分方程初值问题的数值方法，其局部截断误差 $l_{n+1} = O(h^{p+1})$ ，则称该方法具有 p 阶准确度。

根据定义，欧拉法具有 1 阶准确度。常微分方程的整体误差为 $e_n = y_n - y(t_n)$ 。

可以证明在适当条件下，若局部截断误差为 $O(h^{p+1})$ ，则整体误差 $e_n = O(h^p)$ ，其中 h 为平均步长。

因此，只要阶数 $p \geq 1$ ，则随着步长 h 的减小截断误差将收敛到 0，这称为常微分方程数值解法的收敛性。

以后要求数值方法都有至少 1 阶的准确度，因此都是收敛的。

三、向后欧拉法和梯形法

向后欧拉法: $y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1})$ 。

梯形方法:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})]。$$

两者都是单步隐格式方法。一般情形, 采用隐式方法时每步计算都要求解一个非线性方程, 计算量比显式方法要大。

向后欧拉法的稳定性:

模型问题 $y' = \lambda y$, $\operatorname{Re}(\lambda) \leq 0$.

$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1}$ 。因此,

$$y_{n+1} = \frac{1}{1-h\lambda} y_n.$$

$\delta_{n+1} = \frac{1}{1-h\lambda} \delta_n$, 因此要保证稳定性, 则要求 $\left| \frac{1}{1-h\lambda} \right| \leq 1$, 即 $|1 - h\lambda| \geq 1$ 。

无条件稳定: 对任意步长 h 都是稳定的。

类似分析, 只要常微分方程是稳定的, 则向后欧拉法是无条件稳定的。

梯形法也是无条件稳定的。

向后欧拉法具有 1 阶准确度，梯形法具有 2 阶准确度。

最后，说明两点：

(1) 无条件稳定，或稳定区域较大，则意味着步长 h 很大时仍能保证计算的稳定性。

(2) 准确度阶数越高，意味着其计算误差随步长减小而减小的速度越快。

§3 龙格-库塔 (Runge-Kutta) 方法

一、基本思想

R-K 方法是一大类单步法, 公式:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^r c_i k_i & \text{通过 } y_n \text{ 估计 } y_{n+1} \\ k_i = f(t_n + \lambda_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} \mu_{ij} k_j), & \text{还得算 } f \text{ 的导数} \\ (i = 1, 2, \dots, r) & \text{泰勒展开} \end{cases}$$

称为 r 级龙格-库塔公式, r 为是计算 f 函数的次数。待定参数 c_i, λ_i, μ_{ij} 。

二、几种显式 R-K 公式

2 级 R-K 方法:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(c_1k_1 + c_2k_2) \\ k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + \lambda_2h, y_n + \lambda_2hk_1) \end{cases}$$

待定参数满足

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ c_2\lambda_2 = 1/2 \end{cases}.$$

任何解代入都得到一个 2 阶准确度 R-K 公式。

改进 Euler 法 (Heun 方法): $c_1 = c_2 = \frac{1}{2}$,
 $\lambda_2 = 1$,

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + h, y_n + hk_1) \end{cases}$$

改写为:

$$\begin{cases} \bar{y}_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, \bar{y}_{n+1})] \end{cases}$$

欧拉法预测, 梯形法校正。

中点公式: $c_1 = 0, c_2 = 1, \lambda_2 = \frac{1}{2}$ 。

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hk_2 \\ k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + h/2, y_n + hk_1/2) \end{cases}$$

3 级 R-K 公式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(c_1k_1 + c_2k_2 + c_3k_3) \\ k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + \lambda_2h, y_n + \lambda_2hk_1) \\ k_3 = f(t_n + \lambda_3h, y_n + \mu_{31}hk_1 + \mu_{32}hk_2) \\ c_1 + c_2 + c_3 = 1 \\ \lambda_3 = \mu_{31} + \mu_{32} \\ c_2\lambda_2 + c_3\lambda_3 = 1/2 \\ c_2\lambda_2^2 + c_3\lambda_3^2 = 1/3 \\ c_3\lambda_2\mu_{32} = 1/6 \end{cases}$$

3个自由度

3 阶库塔公式:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \\ k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1) \\ k_3 = f(t_n + h, y_n - hk_1 + 2hk_2) \end{cases}$$

Ralston 公式:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{9}(2k_1 + 3k_2 + 4k_3) \\ k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1) \\ k_3 = f(t_n + \frac{3h}{4}, y_n + \frac{3h}{4}k_2) \end{cases}$$

4 阶经典 R-K 公式:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1) \\ k_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2) \\ k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3) \end{cases}$$

若 f 函数只与 t 有关, 则它就是辛普森求积公式。

级数对应的最高准确度阶数。

级数	2	3	4	5	6	7	8	9
阶数	2	3	4	4	5	6	6	7

§4 多步法

线性多步法: $y_{n+1} = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_{n+1-i}$

$+ h \sum_{i=0}^m \beta_i f(t_{n+1-i}, y_{n+1-i})$, 其中 h 为步

长, α_i, β_i 为待定参数。若 $\beta_0 \neq 0$ 为隐格式方法, 否则为显格式方法。

一、多步法公式的推导

两种方法: 泰勒展开, 单项式函数代入法。

1. 泰勒展开法

对于多步法公式, 其局部截断误差为

$$\begin{aligned} l_{n+1} &= y(t_{n+1}) - y_{n+1} \\ &= y(t_{n+1}) - \sum_{i=1}^m \alpha_i y(t_{n+1-i}) - \\ &\quad h \sum_{i=0}^m \beta_i f(t_{n+1-i}, y_{n+1-i}) \\ &= y(t_{n+1}) - \sum_{i=1}^m \alpha_i y(t_{n+1-i}) - \\ &\quad h \sum_{i=0}^m \beta_i y'(t_{n+1-i}). \end{aligned}$$

对于 $y(t_{n+1-i})$ 和 $y'(t_{n+1-i})$, 在 $t = t_{n+1}$ 处进行泰勒展开, 代入到 l_{n+1} , 整理后得到

$$\begin{aligned} l_{n+1} = & y(t_{n+1}) \left[1 - \sum_{i=1}^m \alpha_i \right] + \\ & hy'(t_{n+1}) \left[\sum_{i=1}^m i\alpha_i - \sum_{i=0}^m \beta_i \right] \\ & + h^2 y''(t_{n+1}) \left[-\sum_{i=1}^m \frac{i^2}{2!} \alpha_i + \sum_{i=0}^m i\beta_i \right] + \cdots \\ & h^k y^{(k)}(t_{n+1}) \text{ 的系数为} \end{aligned}$$

$$c_k = \begin{cases} 1 - \sum_{i=1}^m \alpha_i, & k = 0 \\ \sum_{i=1}^m i\alpha_i - \sum_{i=0}^m \beta_i, & k = 1 \\ (-1)^{k+1} \left[\sum_{i=1}^m \frac{i^k}{k!} \alpha_i - \sum_{i=0}^m \frac{i^{k-1}}{(k-1)!} \beta_i \right], & k \geq 2 \end{cases}$$

则 $l_{n+1} = c_0 y(t_{n+1}) + c_1 h y'(t_{n+1}) + c_2 h^2 y''(t_{n+1}) + \cdots$,

只需令 $c_k = 0, k = 0, 1, \dots, p$, 则 $l_{n+1} = O(h^{p+1})$, 达到 p 阶准确度。

α_i 和 β_i 依次满足

$$\begin{cases} \alpha_1 + \alpha_2 + \cdots + \alpha_m = 1 \\ \alpha_1 + 2\alpha_2 + \cdots + m\alpha_m = \beta_0 + \beta_1 + \cdots + \beta_m \\ \frac{1}{2}(\alpha_1 + 2^2\alpha_2 + \cdots + m^2\alpha_m) = \beta_1 + 2\beta_2 \cdots + m\beta_m \\ \dots \end{cases}$$

其中，前两个方程代表了线性多步法的相容性条件 (准确度阶数 $p \geq 1$)，满足它们才能保证数值求解的收敛性。

例：假设

$y_{n+1} = \alpha_1 y_n + h(\beta_1 f_n + \beta_2 f_{n-1})$ ，试确定其中参数，使其具有较高的准确度。

解：

$$\begin{cases} \alpha_1 = 1 \\ \alpha_1 = \beta_1 + \beta_2 \\ \frac{1}{2}\alpha_1 = \beta_1 + 2\beta_2 \end{cases}$$

解得： $\alpha_1 = 1$ 、 $\beta_1 = \frac{3}{2}$ 、 $\beta_2 = -\frac{1}{2}$ 。

$y_{n+1} = y_n + h(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1})$ ，具有 2 阶准确度。

2. 单项式函数代入法

定理

对于求解常微分方程初值问题的线性多步法, 若当 $y(t) = t^i (i = 0, 1, \dots, p)$ 时, 均有局部截断误差 $l_{n+1} = 0$, 则线性多步法至少具有 p 阶准确度。若同时在 $y(t) = t^{p+1}$ 时 $l_{n+1} \neq 0$, 则线性多步法恰好有 p 阶准确度。

例： $y_{n+1} = \alpha_1 y_n + h(\beta_1 f_n + \beta_2 f_{n-1})$ ，利用单项式函数代入法求待定参数。

解： $l_{n+1} = y(t_{n+1}) - y_{n+1} = y(t_{n+1}) - (\alpha_1 y(t_n) + h(\beta_1 y'(t_n) + \beta_2 y'(t_{n-1})))$ 。

将 $y(t) = 1, t, t^2$ 依次代入上式，并令 $l_{n+1} = 0$ ，得到如下方程组：

$$\begin{cases} 1 - \alpha_1 = 0 \\ t_{n+1} - \alpha_1 t_n - h(\beta_1 + \beta_2) = 0 \\ t_{n+1}^2 - \alpha_1 t_n^2 - h(2\beta_1 t_n + 2\beta_2 t_{n-1}) = 0 \end{cases}$$

考虑到 t_n 、 h 任意, 得到

$$\begin{cases} 1 - \alpha_1 = 0 \\ 1 - (\beta_1 + \beta_2) = 0 \\ 1 + 2\beta_2 = 0 \end{cases}$$

其解为 $\alpha_1 = 1$ 、 $\beta_1 = \frac{3}{2}$ 、 $\beta_2 = -\frac{1}{2}$ 。

定义

设初值问题有精确解 $y(t)$, 使用线性多步法解此初值问题, 多步法的启动计算条件为: $y_i = \eta_i(h)$, $i = 0, \dots, m-1$, 其中 h 为步长。若有 $\lim_{h \rightarrow 0} \eta_i(h) = y_0$, $i = 0, \dots, m-1$, 且

$\lim_{h \rightarrow 0, n \rightarrow \infty} y_n = y(t_0 + nh)$, 则称线性 m 步法是收敛的。

线性多步法的相容性条件并不能保证其收敛性。

例如，用线性二步法

$$y_{n+1} = 3y_n - 2y_{n-1} + h(f_n - 2f_{n-1}),$$

$$y_0 = \varphi_0(h), \quad y_1 = \varphi_1(h) \quad \text{解初值问题}$$

$$y'(t) = 2t, \quad y(0) = 0.$$

此初值问题的精确解为 $y = t^2$ 。

上述方法满足 $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$,

$\alpha_1 + 2\alpha_2 = \beta_0 + \beta_1$, 因而是相容性的。

若取初值 $y_0 = 0, y_1 = h$, 则

$$y_n = (2^n - 1)h + n(n-1)h^2, \quad t = nh,$$

$$\lim_{h \rightarrow 0, n \rightarrow \infty} y_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{2^n - 1}{n} t + \frac{n-1}{n} t^2 \right) = \infty.$$

一般情形,

$$y_n = 2^n A(h) + B(h) + n(n-1)h^2, \quad \text{只有} \\ y_0 = y_1 = B(h) \text{ 时, } \lim_{h \rightarrow 0, n \rightarrow \infty} y_n = t^2. \text{ 该}$$

方法没有局部收敛性。

例：用线性二步法

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

$$y_0 = \varphi_0(h), \quad y_1 = \varphi_1(h) \text{ 解初值问题}$$

$$y'(t) = 2t.$$

$$y_n = A(h) + nB(h) + n^2h^2.$$

$$\lim_{h \rightarrow 0, n \rightarrow \infty} y_n$$

$$= \begin{cases} A(0) + B'(0)t + t^2 & \text{if } B(0) = 0 \\ \infty, & \text{if } B(0) \neq 0 \end{cases}$$

该方法没有局部收敛性。

多步法的是否收敛与特征方程

$$\rho(x) = x^m - \sum_{i=1}^m \alpha_i x^{m-i} \text{ 的根有关。}$$

定理

若线性多步法是相容的, 则按 $y_{n+1} =$

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i y_{n+1-i} + h \sum_{i=0}^m \beta_i f(t_{n+1-i}, y_{n+1-i}),$$

$y_i = \varphi_i(h), i = 0, 1, \dots, m$ 解初值问题的
线性多步法收敛的充分必要条件是特征
方程 $\rho(x)$ 的根都在复平面的单位圆内或
单位圆上, 且在单位圆上的根为单根。

二、亚当姆斯 (Adams) 公式

m 步亚当姆斯公式:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=0}^m \beta_i f(t_{n+1-i}, y_{n+1-i}).$$

定理

m 步亚当姆斯公式, 隐格式可达到 $m + 1$ 阶准确度; 显格式可达到 m 阶准确度。

稳定区间左端点值为稳定阈值，右端点0；误差常数局部截断误差主项系数。

亚当姆斯显格式公式：

阶数	β_1	β_2	β_3	β_4	稳定阈值	误差常数
1	1				-2	1/2
2	3/2	-1/2			-2	5/12
3	23/12	-16/12	5/12		-6/11	3/8
4	55/24	-59/24	37/24	-9/24	-3/10	251/720

亚当姆斯隐格式公式：

阶数	β_1	β_2	β_3	β_4	稳定阈值	误差常数
1	1				$-\infty$	$-1/2$
2	$1/2$	$1/2$			$-\infty$	$-1/12$
3	$5/12$	$8/12$	$-1/12$		-6	$-1/24$
4	$9/24$	$19/24$	$-5/24$	$1/24$	-3	$-19/720$

同阶的显格式公式和隐格式公式，隐式公式的稳定性和准确度（看误差常数）都好于显式公式。

使用隐式公式时，也采用预测-校正公式。

常用的 Adams 预测—校正公式：使用显式 4 阶 Adams-Bashforth 公式进行预测，

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

使用隐式 4 阶 Adams-Moulton 公式进行校正，

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f_n + 19f_{n-1} - 5f_{n-2} + f_{n-3}).$$

关于线性多步法，最后说明几点：

(1) 由于可利用前面已计算的 y 和 y' 函数值，采用多步法求解初值问题时，每前进一步只需计算一次函数值，因此计算效率较高。而且计算量几乎不随准确度阶数的提高而增大，这是相比 R-K 方法 (单步法) 最明显的优势。

(2) 由于需要前面若干点上的函数值，所以多步法不是“自启动”的，开始时必须使用单步法或者低阶的多步法产生足够的初始值。

(3) 相比 R-K 方法 (单步法)，多步法的编程较复杂，尤其是考虑步长可以改变的情况就更加复杂。

(4) 对于预测-校正格式，可用预测值与校正值的差作为局部误差估计，构造自动变步长的解法。

(5) 虽然隐式方法比显式方法更稳定，但并不是无条件稳定的。事实上，超过 2 阶的多步法都不是无条件稳定的。

(6) 为了方便，本节只讨论了步长固定的多步法，实际的软件包中一般采用变步长的多步法。

应用实例：洛伦兹吸引子

1. 问题背景

Lorenz 吸引子作为第一个混沌模型，是混沌学的里程碑。由 MIT 的 Edward Lorenz 在 1963 年提出。他建立的天气模型将变量压缩到了随时间变化三个变量。Lorenz 方程是一个常微分方程组，可写成 $y' = Ay$ ，其中 $y = [y_1(t), y_2(t), y_3(t)]^T$ ，而

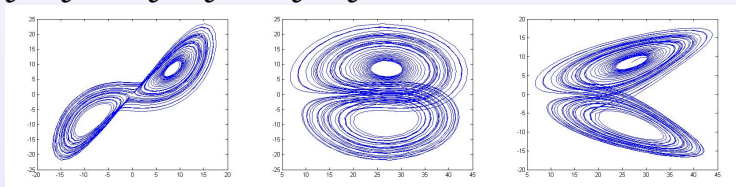
$$A = \begin{bmatrix} -\beta & 0 & y_2 \\ 0 & -\sigma & \sigma \\ -y_2 & \rho & 1 \end{bmatrix}$$

$y_1(t)$ 和大气的对流相关, 而 $y_2(t)$ 和 $y_3(t)$ 分别与温度的水平和竖直变化相关。参数 σ 称为普兰特数, ρ 是规范化的瑞利数, β 和模拟区域的几何形状相关。 A 中的 $\pm y_2$ 使得 Lorenz 方程非线性, 没有解析解。

2. 吸引子的位置

数值仿真： $y(t)$ 的轨迹混乱地在两个点（吸引子）之间往返，有界但无周期，不收敛也不自交。

y_2-y_3 , y_1-y_2 , y_1-y_3 相位投影图



奇异吸引子位置, 考虑 $y(t_0)$ 为何值时 $Ay(t_0) = 0$ 。

A 奇异的充要条件是 $y_2^2 = \beta(\rho - 1)$ 。

求向量 z , 使得 $Az = 0$, 且第二个分量等于 y_2 。

$$\begin{aligned} z &= [\rho - 1, y_2, y_2]^T \\ &= [\rho - 1, \sqrt{\beta(\rho - 1)}, \sqrt{\beta(\rho - 1)}]^T. \end{aligned}$$

两个吸引子 (不动点) 是不稳定的, 轨迹在它们附近将受到排斥。

3. MATLAB 实验

Lorenz 方程中典型的参数取值是 $\rho = 28$, $\beta = 8/3$ 。则算出吸引子的位置为 $[27, 8.49, 8.49]^T$ 和 $[27, -8.49, -8.49]^T$ 。假设初始值 $y(t_0)$ 稍稍偏离吸引子 $[27, 8.49, 8.49]^T$ 。具体的程序如下:

```
function ydot=Lorenzydot (t,y,sig,b,r)
    ydot=[y(2)*y(3)-b*y(1);
    sig*(y(3)-y(2));
    r*y(2)-y(3)-y(2)*y(1)];
end
```



```
>> clear
>> sig = 10; b = 8/3; r = 28;
>> yc = [r-1; sqrt(b*(r-1)); sqrt(b*(r-1))];
>> y0 = yc + [0;0;3];
>> tspan = [0,50];
>> f = @(t,y)Lorenzydot(t,y,sig,b,r);
>> [t,y] = ode23(f,tspan, y0);
>> plot(y(:,2),y(:,3)); %y2-y3相位图
>> figure(2)
>> plot(y(:,1),y(:,3)); %y1-y3相位图
>> figure(3)
>> plot(y(:,1),y(:,2)); %y1-y2相位图
```