常微分方程初值问题的数值解法

常微分方程的一般形式：

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \tag{0.1}$$

（定解条件）对于问题 0.1，如果函数 $f(x,y)$ 关于 y 满足 Lipschitz 条件，即 $\exists L$ 使得 $|f(x,y) - f(x,\overline{y})| \le L|y - \overline{y}|$ 成立则由微分方程理论可知，初值问题 0.1的解存在且唯一。

首先，将自变量 x 的区间进行离散，i.e. $x_n = x_{n-1} + h_n$，若等步长，则 $x_n = x_0 + nh$

1 Euler 方法

1.1 向前 Euler 方法

用 y_n 表示 $y(x_n)$ 的近似解，i.e. $y_n \approx y(x_n)$ 由 0.1显然有 $\frac{dy}{dx}|_{x=x_n} = f(x_n, y(x_n)) = y^{'}(x_n)$，而 $\frac{dy}{dx}|_{x=x_n} \approx \frac{y(x_{n+1})-y(x_n)}{h}$，i.e. $\frac{y(x_{n+1})-y(x_n)}{h} \approx f(x_n, y(x_n)) \Rightarrow y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))$ ，若用 $y_n \approx y(x_n), y_{n+1} \approx y(x_{n+1})$，则上式可写为：

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), n = 0, 1, 2, \dots \tag{1.1}$$

向前 Euler 公式，显式方法。

泰勒公式展开法推导

$$\begin{aligned} & y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy^{'}(x_n) + \frac{h^2}{2}y^{''}(\xi) \\ \Rightarrow & y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + hf(x_n, y(x_n)) \\ \Rightarrow & y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \end{aligned}$$

积分方法推导：由 0.1可得：

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

1.2 向后 Euler 公式，梯形公式和改进 Euler 公式

向后 Euler 公式，隐式公式：

$$\begin{aligned} &y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + hf(x_{n+1}, y(x_{n+1})) \Rightarrow \\ &y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) \end{aligned} \tag{1.2}$$

梯形公式 (隐式公式)，当 $f(x,y)$ 关于 y 是线性，则可以直接求出 y_{n+1}：

$$\begin{aligned} &f(x, y(x)) \approx \frac{f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))}{2} \\ &y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + h\frac{f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))}{2}, n = 0, 1, 2, \ldots \end{aligned} \tag{1.3}$$

隐式方法的稳定性往往较好（可取较大步长），但对于非线性问题，方程难解。

以梯形公式 1.3为例说明如何而求 y_{n+1}：

$$\begin{aligned} &y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ &y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + h\frac{f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)})}{2}, k = 0, 1, 2, \ldots \end{aligned}$$

若迭代一次即终止，则有如下公式：

$$\begin{aligned} &\overline{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ &y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \overline{y}_{n+1})], n = 0, 1, 2, \ldots \end{aligned}$$

整理可得改进 Euler 公式：

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n))] \tag{1.4}$$

1.3 单步法的截断误差和阶

所有单步法均可写成：

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

其中 ϕ 与 f 有关，ϕ 称为增量函数

若方法显式则：

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

称 $e_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$ 为在 x_{n+1} 点的整体截断误差

定义 1.1. 设 $y(x)$ 是初值问题 *0.1*的准确解。称

$$T_{n+1}(x) = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\phi(x_n, y(x_n), h) \tag{1.6}$$

为显式单步法 *1.5*在 x_{n+1} 处的局部截断误差。

定义 1.2. 若 $T_{n+1} = O(h^{P+1})$，则称此方法具有 P 阶精度，若 $T_{n+1} = \phi^*(x_n, y(x_n))h^{P+1} + O(h^{P+2})$，则称 $\phi^*(x_n, y(x_n))h^{P+1}$ 为该方法的局部截断误差主项。

对于单步隐式方法 $T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\phi(x_n, y(x_n), y(x_{n+1}), h)$
例：求梯形公式的局部截断误差主项和阶解：

$$\begin{aligned}
T_{n+1} &= y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\frac{f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))}{2} \\
&= y(x_n + h) - y(x_n) - \frac{h}{2}[y^{'}(x_n) + y^{'}(x_n + h)] \\
&= -\frac{h^3}{12}y^{'''}(x_n) + O(h^4)
\end{aligned}$$

$\therefore$ 梯形公式的局部截断误差为 $-\frac{h^3}{12}y^{'''}(x_n) + O(h^4)$，主项为：$-\frac{h^3}{12}y^{'''}(x_n)$，阶：2 阶。

思考题：改进 Euler 方法的 $T_{n+1} =$? 主项为？阶？（多元函数求 2 阶导）

证明.

$$\begin{aligned}
y(x_{n+1}) = {} & y(x_n) + hf + \frac{h^2}{2}(f_x + ff_y) + \\
& \frac{h^3}{6}(f_{xx} + f_{xy}f + ff_{yx} + f^2 f_{yy} + f_y f_x + f_y^2 f) + O(h^4)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\overline{y} = {} & y(x_n) + \frac{h^2}{2}(f_x + ff_y) \\
& \frac{h^3}{4}(f_{xx} + f_{xy}f + ff_{yx} + f^2 f_{yy} + f_y f_x + f_y^2 f) + O(h^4)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& y(x_{n+1}) - \overline{y} \\
= & -\frac{h^3}{12}(f_{xx} + f_{xy}f + ff_{yx} + f^2 f_{yy} + f_y f_x + f_y^2 f) + O(h^4)
\end{aligned}$$

□

2 Runge-kutta 方法

2.1 R-K 法基本思想

向前 Euler(1 阶):

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hk_1 \\ k_1 = f(x_n, y_n) \end{cases}$$

梯形公式 (2 阶):

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

取更多点斜率加权平均，构造更高精度的数值方法。

2.2 R-K 方法的构造

假设 P 级 R-K 方法的公式为:

$$\begin{array}{ll} y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{P} c_i k_i, & k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_i = f(x_n + a_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j), & i = 2, 3, \ldots, P \end{array} \tag{2.1}$$

以 $P = 2$ 为例，构造 R-K 方法:

$$\begin{aligned} &y_{n+1} = y_n + h(c_1 k_1 + c_2 k_2), k_1 = f(x_n, y_n) \\ &k_2 = f(x_n + a_2 h, y_n + hb_{21} k_1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{n+1} = &y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\{c_1 f(x_n, y(x_n)) \\ &+ c_2 f[x_n + a_2 h, y(x_n + b_{21} h f(x_n, y(x_n)))]\} \end{aligned}$$

构造麻烦的地方在于 $y(x_n + b_{21} f(x_n, y(x_n))$ 无法写成 y 的形式，使用 2 元函数泰勒展开。

$$\begin{aligned} &y(x_{n+1}) = [y + hy' + \frac{h^2}{2}y'' + \frac{h^3}{6}y''' + O(h^4)]|_{x=x_n} \\ =&y + hf + \frac{h^2}{2}(f_x + f_y f) + \frac{h^3}{6}() \\ &\overline{y}_{n+1} = y + h\{c_1 f + c_2[f + a_2 h f_x + hb_{21} f f_y]\} + O(h^3) \end{aligned}$$

将 $y(x_{n+1})$ 与 $\overline{y}_{n+1}$ 中前三项对应相等即可得:

$$\begin{cases} c_1+c_2=1 \\ c_2a_2=\frac{1}{2} \\ c_2b_{21}=\frac{1}{2} \end{cases}$$

取 $c_2=1$ 则 $c_1=0, a_2=b_{21}=\frac{1}{2}$,

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

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+hk_2 \\ y_{n+1}=y_n+hf(x_n+\frac{1}{2}h, y_n+\frac{1}{2}hf(x_n,y_n)) \end{cases} \tag{2.2}$$

如果取 $c_1=c_2=\frac{1}{2}, a_2=b_{21}=1$ 即可得改进 Euler 公式 1.4。

4 阶 R-K 方法:

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+\frac{h}{6}[k_1+2k_2+2k_3+k_4], k_1=f(x_n,y_n) \\ k_2=f(x_n+\frac{1}{2}h, y_n+\frac{h}{2}k_1), k_3=f(x_n+\frac{1}{2}h, y_n+\frac{h}{2}k_2) \\ k_4=f(x_n+h, y_n+hk_3) \end{cases} \tag{2.3}$$