常微分方程数值解法

- 欧拉法
- 龙格-库塔法
- 线性多步法
- 一阶微分方程组与高阶微分方程的数值解法

在科学研究和工程技术中，常会遇到常微分方程或常微分方程组的求解问题．我们知道，除了几种简单类型的常微分方程外，要找出解的解析表达式是极其困难的，甚至是不可能的．因此，研究各种类型常微分方程的数值解法是很有必要的．本章主要考虑一阶常微分方程初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x, y), a \le x \le b & \text{(8.1)} \\ y(a) = y_0 & \text{(8.2)} \end{cases}$$

在区间$[a, b]$上的解. 为了保证初值问题(8.1) ~ (8.2)解的存在和惟一性，给出如下定理(证明略).

定理8.1 若 $f(x,y)$ 连续，且关于y 满足李普希兹(Lipschitz)条件，即存在常数$L>0$ ，使

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

对任何 y_1,y_2 均成立，则上述初值问题(7.1) ~ (7.2)的解存在、惟一，且连续依赖于初值y_0 .

由于李普希茨条件较难验证，因此在实际应用中，常用函数 $f(x,y)$ 在所考虑区域 G 上对 y 存在连续偏导数条件代替．事实上，若$f(x,y)$ 在有解闭区域 G 上对y 存在连续偏导数，则 $\frac{\partial f}{\partial y}$ 在G 上有界．设$\left|\frac{\partial f}{\partial y}\right|\le L$ ，则

$$\left|f(x,y_1)-f(x,y_2)\right|=\left|\frac{\partial f(x,y_2+\theta(y_1-y_2))}{\partial y}\right|\left|y_1-y_2\right|\le L\left|y_1-y_2\right|$$

这里 $f(x,y_1),\ f(x,y_2)\in G,\ 0<\theta<1$.

本章在研究常微分方程的数值解法时，通常默认常微分方程的初值问题满足定理8.1的条件．

初值问题(8.1) ~ (8.2)的数值解法，就是寻求方程的解析解 $y(x)$ 在自变量 x 的一系列离散节点

$$a=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_{n-1}<x_n=b$$

上的近似值

$$y_0, y_1, y_2, \cdots, y_{n-1}, y_n$$

这些近似值称为初值问题(8.1) ~ (8.2)的数值解.

相邻两节点的间距 $h_i = x_i - x_{i-1}\ (i = 1, 2, \cdots, n)$ 称为步长，通常在计算上采用相等的步长 $h_i = h\ (i = 1, 2, \cdots, n)$，这时等距节点 $x_i = x_0 + ih, (i = 1, 2, \cdots, n)$.求解过程是顺着节点排列的顺序一步一步的向前推进，初值问题的数值解法主要建立这种递推公式 .

求解常微分方程初值问题的数值解法可分为两类：单步法和多步法 . 单步法在计算 y_i 时只用到前面一步 y_{i-1} 处的信息，如欧拉(Euler)法、龙格—库塔(Runge-Kutta)法 . 多步法在计算 y_i 时用到前面多步 $y_{i-1}, y_{i-2}, \cdots$ 处的信息，常用的主要是线性多步法 .

单步法与多步法都有显式格式与隐式格式之分.

§8.1欧拉法

8.1.1 欧拉公式

设初值问题(8.1) ~ (8.2)的精确解为$y(x)$在区间$[a,b]$ 上取一系列等距节点

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$$

根据导数定义，可以用

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

近似代替 $y'(x_{i-1})$ 或 $y'(x_i)$(图7-1)，其中$h = \dfrac{b-a}{n}$.于是，根据微分方程(8.1)可得

$$\frac{y(x_i)-y(x_{i-1})}{h}\approx f(x_{i-1},y_{i-1}),$$
（8.3）

$i=1,2,\cdots,n$

或

$$\frac{y(x_i)-y(x_{i-1})}{h}\approx f(x_i,y_i),$$
（8.4）

$i=1,2,\cdots,n$

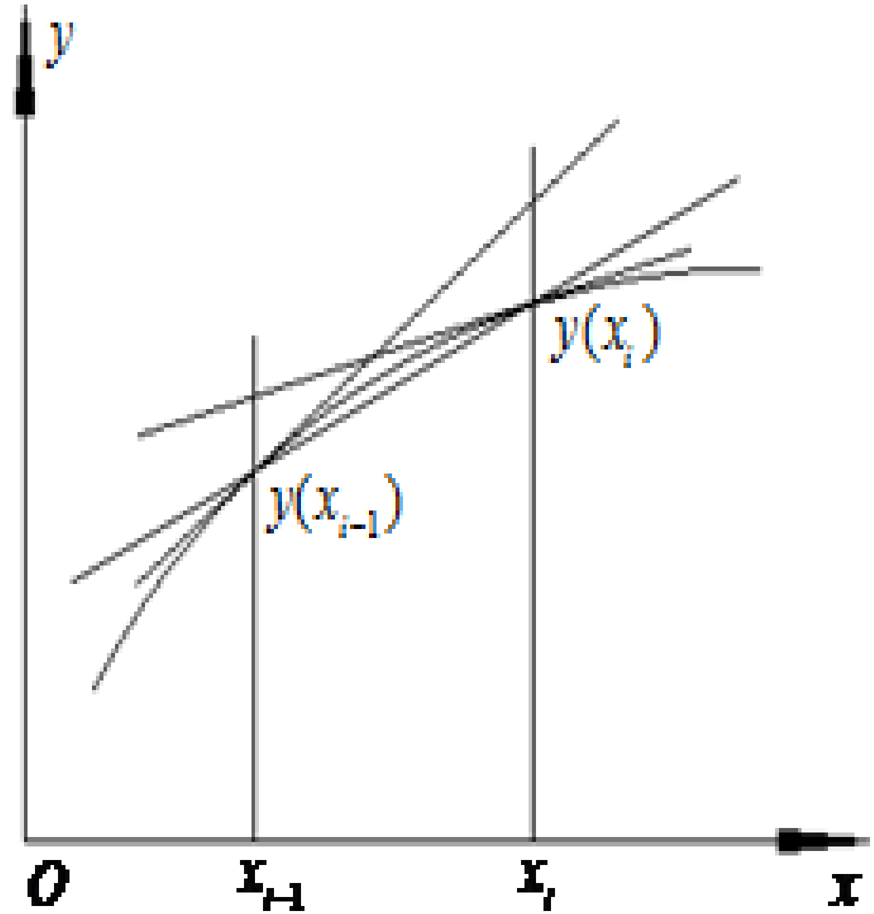

图 7-1

设 y_i ，y_{i-1} 分别为精确解 $y(x_{i-1})$ ，$y(x_i)$ 的近似值,则由(8.3)、(8.4)式，又可得

$$y_i=y_{i-1}+hf(x_{i-1},y_{i-1}),\ i=1,2,\cdots,n \quad（8.5）$$

及

$$y_i = y_{i-1} + hf(x_i, y_i),\ i = 1, 2, \cdots, n \qquad (8.6)$$

(8.5)、(8.6)式称为欧拉公式．其中(8.5)式称为显式欧拉公式，(8.6)式称为隐式欧拉公式．利用欧拉公式求解初值问题(8.1)~(8.2)数值解的方法称为欧拉法．

欧拉公式还可以利用泰勒展开的方法得到．将$y(x)$ 在点x_{i-1}处展开，有

$$y(x) = y(x_{i-1}) + y'(x_{i-1})(x - x_{i-1}) + \frac{y''(\xi)}{2!}(x - x_{i-1})^2,$$

ξ 在 x_{i-1} 与 x 之间

令 $x=x_i$ ，得

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

$$=y(x_{i-1})+f(x_{i-1},y(x_{i-1}))h+\frac{y''(\xi_{i-1})}{2!}h^2,$$

ξ_{i-1} 在 x_{i-1} 与 x_i 之间

将 $y(x)$ 在 x_i 点处展开，有

$$y(x)=y(x_i)+y'(x_i)(x-x_i)+\frac{y''(\xi)}{2!}(x-x_i)^2,$$

ξ 在x与 x_i之间

令 $x=x_{i-1}$ ，得

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

$$=y(x_i)-f(x_i,y(x_i))h+\frac{y''(\xi_i)}{2!}h^2,$$

ξ 在 x_{i-1} 与 x_i之间

当$h=x_i-x_{i-1}$充分小时，忽略二阶导数项，并以近似值y_{i-1},y_i代替精确值$y(x_{i-1}),y(x_i)$，同样可得欧拉公式(8.5)、(8.6) .

例8.1 设有初值问题

$$\begin{cases} y'(x) = x + y, \ 0 \le x \le 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

取 $h=0.2$ ，试用梯形公式求其数值解，并与精确解 $y(x) = 2e^x - x - 1$相比较.

解 根据已知条件，有

$$n = 5, h = 0.2$$

$$x_0 = 0, y_0 = 1$$

$$x_i = ih, i = 1, 2, \cdots, n$$

又

$$f(x, y) = x + y$$

（1）由显式欧拉公式(8.5)，得

$$y_i = y_{i-1} + 0.2(x_{i-1} + y_{i-1}), i = 1, 2, \cdots, 5$$

整理，得

$$y_i = 0.2x_{i-1} + 1.2y_{i-1}, i = 1, 2, \cdots, 5$$

计算结果见下表 (表8-1)：

表8-1

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
y_i	1.0000	1.2000	1.4800	1.8560	2.3472	2.9766
$y(x_i)$	1.0000	1.2428	1.5836	2.0442	2.6511	3.4366
$y(x_i)-y_i$	0.0000	0.0428	0.1036	0.1882	0.3039	0.4600

（2）由隐式欧拉公式(8.6)，得

$$y_i = y_{i-1} + 0.2(x_i + y_i),\ \ i = 1, 2, \cdots, 5$$

整理，得

$$y_i = (0.2x_i + y_{i-1})/0.8,\ \ i = 1, 2, \cdots, 5$$

计算结果见下表 (表8-2)：

表8-2

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
y_i	1.0000	1.3000	1.7250	2.3062	3.0828	4.1035
$y(x_i)$	1.0000	1.2428	1.5836	2.0442	2.6511	3.4366
$y(x_i)-y_i$	0	-0.0572	-0.1414	-0.2620	-0.4317	-0.6669

从表8-1，8-2的结果可以看出，随着 i 的增大，误差也在增大．因此，不论显式欧拉公式还是隐式欧拉公式，计算误差都较大．

此外，当函数 $f(x,y)$ 比较复杂时，从隐式欧拉公式(8.6)式中解出 y_i 是很困难的．为此，我们需要寻求更有效的方法，解决初值问题(8.1)～(8.2)的数值求解问题．

8.1.2 改进欧拉公式

根据(8.3),(8.4)式，令

$$\frac{y(x_i)-y(x_{i-1})}{h}\approx\frac{f(x_{i-1},y_{i-1})+f(x_i,y_i)}{2}$$

整理，得

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

所以，通过取显示欧拉公式和隐式欧拉公式的算术平均值，得

$$y_i=y_{i-1}+\frac{h}{2}[f(x_{i-1},y_{i-1})+f(x_i,y_i)],\ i=1,2,\cdots,n \quad (8.7)$$

上式称为常微分方程初值问题(8.1) ~ (8.2)的梯形公式．

另外，将微分程(8.1)两端从 x_{i-1} 到 x_i 积分，得

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

上式右端积分用梯形公式近似，即

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

于是，有

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

以 y_{i-1}, y_i 近似代替 $y(x_{i-1}), y(x_i)$，并用等号代替上式中的约等于号，同样可得梯形公式(7.7).

例8.2 设有初值问题

$$\begin{cases} y'(x) = x + y, \ 0 \le x \le 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

取 $h = 0.2$ ，试用梯形公式求其数值解，并与精确解 $y(x) = 2e^x - x - 1$ 相比较.

解 根据已知条件，有

$$n = 5, h = 0.2$$

$$x_0 = 0, y_0 = 1$$

$$x_i = ih, i = 1, 2, \cdots, n$$

又

$$f(x, y) = x + y$$

由梯形公式(8.7)，得

$$y_i = y_{i-1} + 0.1[(x_{i-1} + y_{i-1}) + (x_i + y_i)] \quad i = 1, 2, \cdots, 5$$

整理，得

$$y_i = [0.1(x_{i-1} + x_i) + 1.1 y_{i-1}] / 0.9 \quad i = 1, 2, \cdots, 5$$

计算结果如下：

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
y_i	1.0000	1.2444	1.5877	2.0516	2.6630	3.4548
$y(x_i)$	1.0000	1.2428	1.5836	2.0442	2.6511	3.4366
$y(x_i) - y_i$	0	-0.0016	-0.0041	-0.0074	-0.0119	-0.0182

将例8.2与例8.1 (1)、(2)对比，可以看出梯形公式比欧拉公式的精度明显提高．但由于梯形公式(8.7)仍然是隐式公式，因此当函数 $f(x,y)$ 比较复杂时从(7.7)式中解出y_i还是十分困难.

能否找到一种公式，既能提高精度，又可避免从代数方程中求解 y_i 这一繁琐过程呢？改进的欧拉公式正好满足这些要求．

在实际应用中，首先利用显式欧拉公式(8.5)计算y_i的一个初值 $\bar{y}_i$ (称为预测值)，再用梯形公式对y_i进行校正，就可得到所谓改进的欧拉公式

$$\begin{cases} \bar{y}_i = y_{i-1} + hf(x_{i-1}, y_{i-1}) \\ y_i = y_{i-1} + \dfrac{h}{2}[f(x_{i-1}, y_{i-1}) + f(x_i, \bar{y}_i)] \end{cases}, i = 1, 2, \cdots, n \quad \textbf{(8.8)}$$

(8.8)式中的第一式称为预测算式，用来得到精度较低的预测值；第二式称为校正算式，用来得到较高精度的校正值．

例8.3 设有初值问题

$$\begin{cases} y'(x) = x + y, \ 0 \le x \le 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

取 $h = 0.2$ ，试用改进欧拉公式求其数值解，并与精确解 $y(x) = 2e^x - x - 1$ 相比较.

解 根据已知条件，有

$$n = 5, h = 0.2$$

$$x_0 = 0, y_0 = 1$$

$$x_i = ih, i = 1, 2, \cdots, n$$

又

$$f(x, y) = x + y$$

根据改进的欧拉公式(8.8)，有

$$\begin{cases} \bar{y}_i = y_{i-1} + 0.2(x_{i-1} + y_{i-1}) \\ y_i = y_{i-1} + 0.1[(x_{i-1} + y_{i-1}) + (x_i + \bar{y}_i)] \end{cases}, \quad i = 1, 2, \cdots, 5$$

计算结果如下：

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
y_i	1.0000	1.2400	1.5768	2.0317	2.6307	3.4054
$y(x_i)$	1.0000	1.2428	1.5836	2.0442	2.6511	3.4366
$y(x_i)-y_i$	0	0.0028	0.0068	0.0125	0.0204	0.0312

将例8.3与例8.1 (1)、(2)的结果对比，可以看出改进的欧拉公式比欧拉公式的精度明显提高．同时，改进的欧拉公式也避免了梯形公式中求解y_i这一繁琐过程．所以改进的欧拉公式是解决初值问题(8.1) ~ (8.2)的一个简单易行的数值求解方法．

§8.2 龙格—库塔法

无论显式欧拉法还是隐式欧拉法都是一步法，它们只有一阶精度．本节我们介绍具有更高精度的显式一步法：龙格-库塔法．

利用泰勒展开构造欧拉公式时，只取泰勒展开式的前面两项，为了得到更高精度的一步方法，我们自然想到，取泰勒展开式的更多项．

设 $f(x,y)$ 与初值问题(8.1)~(8.2)的解析解$y(x)$充分光滑，将 $y(x)$ 在 x_{i-1} 处展成泰勒级数，然后将 $x=x_i$ 代入，有

$$y(x_i)=y(x_{i-1})+hy'(x_{i-1})+\frac{h^2}{2!}y''(x_{i-1})+\cdots+\frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x_{i-1})+\cdots \tag{8.14}$$

其中

$$
\begin{aligned}
y' &= f(x,y) \\
y'' &= f_x'(x,y) + f_y'(x,y)\cdot y' = f_x'(x,y) + f(x,y)\cdot f_y'(x,y) \\
y''' &= f_{xx}''(x,y) + 2f(x,y)\cdot f_{xy}''(x,y) + f^2(x,y)\cdot f_{yy}''(x,y) \\
&\quad + f(x,y)\cdot f_y'^2(x,y) + f_x'(x,y)\cdot f_y'(x,y) \\
&\qquad\qquad \cdots
\end{aligned}
\tag{8.15}
$$

取(7.14)式的p+1前项得

$$
y(x_i) \approx y(x_{i-1}) + hy'(x_{i-1}) + \frac{h^2}{2!}y''(x_{i-1}) + \cdots + \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x_{i-1})
$$

以近似值 y_{i-1}, y_i 代替精确值 $y(x_{i-1}), y(x_i)$ ，并用等号代替上式中的约等于号，可得 $y(x_i)$ 的近似值 y_i 的计算公式

$$y_i = y_{i-1} + hy'(x_{i-1}) + \frac{h^2}{2!} y''(x_{i-1}) + \cdots + \frac{h^p}{p!} y^{(p)}(x_{i-1}) \tag{8.16}$$

然而，对于一般的复合函数，计算各阶导数往往比较麻烦，因此这种方法不太实用．

龙格－库塔法，可以在不求高阶导数的前提下，提高初值问题(8.1) ~ (8.2)数值解的精度．一般地，微分方程(8.1)的龙格－库塔法可写为如下形式：

$$
\begin{aligned}
K_0 &= f(x_{i-1}, y(x_{i-1})) \\
K_1 &= f(x_{i-1}+\alpha_1 h, y(x_{i-1})+\beta_{10}K_0 h) \\
K_2 &= f(x_{i-1}+\alpha_2 h, y(x_{i-1})+\beta_{20}K_0 h+\beta_{21}K_1 h) \\
&\cdots\cdots \\
K_r &= f(x_{i-1}+\alpha_r h, y(x_{i-1})+\beta_{r0}K_0 h+\beta_{r1}K_1 h+\cdots+\beta_{r,r-1}K_{r-1} h)
\end{aligned}
$$

然后把 $K_0, K_1, \cdots, K_r$ 线性组合

$$\bar{K} = \omega_0 K_0 + \omega_1 K_1 + \cdots + \omega_r K_r$$

作为由 $y(x_{i-1})$ 到$y(x_i)$的增量，即

$$y(x_i)=y(x_{i-1})+h\bar{K}=y(x_{i-1})+h\left[\omega_0 K_0+\omega_1 K_1+\cdots+\omega_r K_r\right]$$

（8.17）

根据二元泰勒公式展开，即

$$f(x+\Delta x,y+\Delta y)=f(x,y)+\left(\Delta x\frac{\partial}{\partial x}+\Delta y\frac{\partial}{\partial y}\right)f(x,y)+\frac{1}{2!}\left(\Delta x\frac{\partial}{\partial x}+\Delta y\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 f(x,y)$$

$$+\cdots+\frac{1}{p!}\left(\Delta x\frac{\partial}{\partial x}+\Delta y\frac{\partial}{\partial y}\right)^p f(x,y)+\frac{1}{(p+1)!}\left(\Delta x\frac{\partial}{\partial x}+\Delta y\frac{\partial}{\partial y}\right)^{p+1} f(x+\theta\Delta x,y+\theta\Delta y)$$

其中$0<\theta<1$，而

$$\left(\Delta x\frac{\partial}{\partial x}+\Delta y\frac{\partial}{\partial y}\right)f(x,y)=\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\Delta x+\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\Delta y$$

$$\left(\Delta x\frac{\partial}{\partial x}+\Delta y\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 f(x,y)=\left(\Delta x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+2\Delta x\Delta y\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+\Delta y^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)f(x,y)$$

$$=\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2}\Delta x^2+2\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x\partial y}\Delta x\Delta y+\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y^2}\Delta y^2$$

$$\cdots\cdots$$

将(8.17)式在$(x_{i-1}, y(x_{i-1}))$ 处作二元泰勒展开，然后按 h 的幂合并同类项，并舍去h^{p+1}及以后各项，使得

$$y(x_i)\approx y(x_{i-1})+\gamma_1 h+\frac{1}{2!}\gamma_2 h^2+\cdots+\frac{1}{p!}\gamma_p h^p$$

以近似值 y_{i-1}, y_i 代替精确值$y(x_{i-1}), y(x_i)$ ，并用等号代替上式中的约等于号，可得 y_i 的计算公式

$$y_i \approx y_{i-1} + \gamma_1 h + \frac{1}{2!}\gamma_2 h^2 + \cdots + \frac{1}{p!}\gamma_p h^p$$

令 $\gamma_1 = y'(x_{i-1}), \gamma_2 = y''(x_{i-1}), \cdots, \gamma_p = y^{(p)}(x_{i-1})$ ，可求出待定参数

$$\alpha_1, \beta_{10}$$

$$\alpha_2, \beta_{20}, \beta_{21}$$

$$\cdots\cdots$$

$$\alpha_r, \beta_{r0}, \beta_{r1}, \cdots, \beta_{r,r-1}$$

及

$$\omega_0, \omega_1, \cdots, \omega_r$$

将上述参数代入(8.17)式，然后以近似值 y_{i-1}, y_i 代替精确值 $y(x_{i-1}), y(x_i)$ ，得到的公式称为p阶龙格－库塔公式．

例如，根据以下公式

$$\begin{cases} K_0 = f(x_{i-1}, y(x_{i-1})) \\ K_1 = f(x_i + \alpha_1 h, y(x_{i-1}) + \beta_{10} K_0 h) \\ y(x_i) = y(x_{i-1}) + h(\omega_0 K_0 + \omega_1 K_1) \end{cases} \quad \textbf{(8.18)}$$

确定参数$\alpha_1, \beta_{10}, \omega_0, \omega_1$，构造二阶龙格 - 库塔公式，使其具有二阶精度 .

将$y(x)$在x_{i-1}处，作泰勒公式展开，并将$x = x_i$代入，得

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

又由于

$$y' = f(x, y)$$

$$y'' = f_x'(x, y) + f_y'(x, y) \cdot y' = f_x'(x, y) + f(x, y) \cdot f_y'(x, y)$$

因此

$$y(x_i) = y(x_{i-1}) + hf + \frac{h^2}{2!}(f_x' + f \cdot f_y') + O(h^3) \qquad \textbf{（8.19）}$$

这里 f, f_x', f_y' 分别表示 $f(x, y), f_x'(x, y), f_y'(x, y)$ 在点 $(x_{i-1}, y(x_{i-1}))$ 处的取值，以下均同．

另外 ,K_1在点$(x_{i-1}, y(x_{i-1}))$ 处的泰勒展开式为

$$K_1 = f(x_{i-1} + \alpha_1 h,\ y(x_{i-1}) + \beta_{10} K_0 h) = f + \alpha_1 f_x' \cdot h + \beta_{10} f \cdot f_y' \cdot h + O(h^2)$$

将上式带入$y(x_i) = y(x_{i-1}) + h(\omega_0 K_0 + \omega_1 K_1)$，得

$$y(x_i) = y(x_{i-1}) + (\omega_0 + \omega_1) f \cdot h + (\alpha_1 \omega_1 f_x' + \omega_1 \beta_{10} f \cdot f_y') \cdot h^2 + O(h^3)$$

（8.20）

比较(8.19)式与(8.20)式，得

$$\begin{cases} \omega_0 + \omega_1 = 1 \\ \alpha_1 \omega_1 = \dfrac{1}{2} \\ \omega_1 \beta_{10} = \dfrac{1}{2} \end{cases}$$

（8.21）

显然，由(8.21)式确定参数，并得到的二阶龙格 - 库塔公式在点 x_i 处的局部截断误差为 $O(h^3)$ ，故具有二阶精度，因此也称之为二阶龙格 - 库塔公式 .

方程组(8.21)有三个等式，四个未知量，故一般可以得到无穷多组解，相应地就有无穷多个二阶龙格－库塔公式．下面是两个较常用的公式．

(1) 取 $\omega_0=\omega_1=\dfrac{1}{2},\alpha_1=\beta_{10}=1$ ，以近似值 y_{i-1},y_i 代替精确值 $y(x_{i-1}),y(x_i)$ 得

$$\begin{cases} K_0=f(x_{i-1},y_{i-1}) \\ K_1=f(x_{i-1}+h,y_{i-1}+K_0h) \\ y_i=y_{i-1}+\dfrac{h}{2}(K_0+K_1) \end{cases} \qquad \textbf{(8.22)}$$

(8.22)式就是改进的欧拉公式．

(2) 取 $\omega_0=0,\omega_1=1,\alpha_1=\beta_{10}=\dfrac{1}{2}$ ，以近似值 y_{i-1},y_i 代替精确值 $y(x_{i-1}),y(x_i)$ ，得

$$\begin{cases} K_0=f(x_{i-1},y_{i-1}) \\ K_1=f(x_{i-1}+\dfrac{1}{2}h,y_{i-1}+\dfrac{1}{2}K_0h) \\ y_i=y_{i-1}+K_1h \end{cases} \tag{8.23}$$

(8.23)式称为中点公式．

用类似方法可以确定更高阶的龙格－库塔公式，只不过推导更繁杂．下面给出一个常用的标准四阶龙格－库塔公式．

$$\begin{cases} K_0 = f(x_{i-1}, y_{i-1}) \\ K_1 = f(x_{i-1} + \dfrac{h}{2}, y_{i-1} + \dfrac{h}{2} K_0) \\ K_2 = f(x_{i-1} + \dfrac{h}{2}, y_{i-1} + \dfrac{h}{2} K_1) \\ K_3 = f(x_{i-1} + h, y_{i-1} + hK_2) \\ y_i = y_{i-1} + \dfrac{h}{6}(K_0 + 2K_1 + 2K_2 + K_3) \end{cases} \qquad \textbf{(8.24)}$$

上式也称为经典四阶龙格 - 库塔公式．该公式具有四阶精度，在计算常微分方程初值问题数值解时，比欧拉公式和梯形公式更加精确．

例8.4 用中点公式求例8.1中初值问题的数值解，并同精确解相比较．

解 由已知条件，有

$$n=5, h=0.2$$

$$x_0=0, y_0=1$$

$$x_i=ih, i=1,2,\cdots,n$$

又 $f(x,y)=x+y$ ．由中点公式得

$$\begin{cases} K_0=x_{i-1}+y_{i-1} \\ K_1=(x_{i-1}+0.1)+(y_{i-1}+0.1K_0), i=1,2,\cdots,5 \\ y_i=y_{i-1}+0.2K_1 \end{cases}$$

计算结果如下：

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
y_i	1.0000	1.2400	1.5768	2.0317	2.6307	3.4054
$y(x_i)$	1.0000	1.2428	1.5836	2.0442	2.6511	3.4366
$y(x_i)-y_i$	0	0.0028	0.0068	0.0125	0.0204	0.0312

将例8.4与例8.3的结果比较，可知计算结果相同．

例8.5 利用经典四阶龙格 - 库塔公式，求例7.1中初值问题的数值解，并同精确解相比较 .

解 由已知条件，有

$$n = 5, h = 0.2$$
$$x_0 = 0, y_0 = 1$$
$$x_i = ih, i = 1, 2, \cdots, n$$

又 $f(x, y) = x + y$. 由经典四阶龙格 - 库塔公式，得

$$\begin{cases} K_0 = f(x_{i-1}, y_{i-1}) \\ K_1 = f(x_{i-1} + 0.1, y_{i-1} + 0.1K_0) \\ K_2 = f(x_{i-1} + 0.1, y_{i-1} + 0.1K_1) \\ K_3 = f(x_{i-1} + 0.2, y_{i-1} + 0.2K_2) \\ y_i = y_{i-1} + \dfrac{1}{30}(K_0 + 2K_1 + 2K_2 + K_3) \end{cases}, i = 1, 2, \cdots, 5$$

计算结果：

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
y_i	1.0000	1.2428	1.5836	2.0442	2.6510	3.4365
$y(x_i)$	1.0000	1.2428	1.5836	2.0442	2.6511	3.4366
$y(x_i)-y_i$	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001

可以看出，用经典四阶龙格 - 库塔法计算的结果与精确解非常接近. .

§8.3 线性多步法

单步法在计算时只用到前面一步近似值，有其简便的一面．但要想提高精度，则需要增加两步之间节点处函数值的计算，如龙格-库塔法．这样就加大了计算量．本节介绍多步法，它在计算 y_i 时，除了用到近似值 y_{i-1} 外，还用到

$$y_{i-k}(k=2,3,\cdots,r)$$

以及各点处导数的近似值．由于计算高阶导数比较困难，因此我们一般只利用前面各节点处的函数值及各节点处的一阶导数的近似值，来计算下一步的 $y(x)$．这种方法可在不增加步内节点的情况下提高计算精度．

线性多步法的一般形式为

$$y_i = (\alpha_1 y_{i-1} + \alpha_2 y_{i-2} + \cdots + \alpha_r y_{i-r}) + h(\beta_0 y_i' + \beta_1 y_{i-1}' + \beta_2 y_{i-2}' + \cdots + \beta_r y_{i-r}') \quad (8.25)$$

其中 $y_{i-k}' = f(x_{i-k}, y_{i-k})$

由于 $y_i' = f(x_i, y_i)$中含有未知的y_i，则当$\beta_0 = 0$时，(8.25)式是显式公式，当$\beta_0 \neq 0$时，(8.25)式是隐式公式．由(8.25)式计算的值 y_i ，是关于y_{i-k}, y_{i-k}' 的线性函数，所以称此方法为线性多步法(或线性r步法)．欧拉法及梯形法均为线性一步法．

下面介绍线性多步法的两种基本构造方法:(1)基于泰勒公式的待定系数法；(2)数值积分法．

8.3.2 数值积分法

下面我们采用数值积分的方法来推导线性多步法—阿达姆斯(Adams)法．

初值问题(8.1) ~ (8.2)可以写成如下等价式

$$\begin{cases} y(x_i) - y(x_{i-r}) = \int_{x_{i-r}}^{x_i} f(x, y(x))dx \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \qquad \textbf{(8.42)}$$

令 $F(x) = f(x, y(x))$．对上式中r取各种不同的值，并用各种不同的插值多项式去近似 $F(x)$ 时，就可以推导出不同的线性多步法，其中最常用的是四阶阿达姆斯公式，下面以此为例，来推导线性多步法的计算公式．

1. 阿达姆斯外推公式(显式阿达姆斯方法)

取 $r=1$, 利用4个数据节点

$$(x_{i-1},F_{i-1}),(x_{i-2},F_{i-2}),(x_{i-3},F_{i-3}),(x_{i-4},F_{i-4})$$

其中 $F_{i-k}=F(x_{i-k})(k=1,2,3,4)$. 作 $F(x)$ 的三次拉格朗日插值多项式 $L_3(x)$ ，则有

$$\begin{aligned}F(x)&=L_3(x)+R_3(x)\\&=F_{i-1}\frac{(x-x_{i-2})(x-x_{i-3})(x-x_{i-4})}{(x_{i-1}-x_{i-2})(x_{i-1}-x_{i-3})(x_{i-1}-x_{i-4})}\\&+F_{i-2}\frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i-3})(x-x_{i-4})}{(x_{i-2}-x_{i-1})(x_{i-2}-x_{i-3})(x_{i-2}-x_{i-4})}\\&+F_{i-3}\frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i-2})(x-x_{i-4})}{(x_{i-3}-x_{i-1})(x_{i-3}-x_{i-2})(x_{i-3}-x_{i-4})}\\&+F_{i-4}\frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i-2})(x-x_{i-3})}{(x_{i-4}-x_{i-1})(x_{i-4}-x_{i-2})(x_{i-4}-x_{i-3})}\\&+\frac{F^{(4)}(\xi)}{4!}\omega_4(x),\end{aligned}$$

ξ 在 x_{i-4} 与 x_i 之间

所以

$$y(x_i)-y(x_{i-1})=\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x,y(x))dx=\int_{x_{i-1}}^{x_i} F(x)dx=\int_{x_{i-1}}^{x_i} L_3(x)dx+\int_{x_{i-1}}^{x_i} R_3(x)dx$$

$$=\frac{h}{24}(55F_{i-1}-59F_{i-2}+37F_{i-3}-9F_{i-4})+\int_{x_{i-1}}^{x_i}\frac{F^{(4)}(\xi)}{4!}\omega_4(x)dx$$

因为 $\omega_4(x)=(x-x_{i-1})(x-x_{i-2})(x-x_{i-3})(x-x_{i-4})$ 在区间$[x_{i-1},x_i]$ 上不变号，又设 $F^{(4)}(x)$在区间 $[x_{i-1},x_i]$ 上连续，所以由第一积分中值定理，可得

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i}\frac{F^{(4)}(\xi)}{4!}\omega_4(x)dx=\frac{F^{(4)}(\eta)}{4!}\int_{x_{i-1}}^{x_i}\omega_4(x)dx=\frac{251}{720}F^{(4)}(\eta)h^5,$$

η在 x_{i-1} 与 x_i 之间

即

$$y(x_i)-y(x_{i-1})=\int_{x_{i-1}}^{x_i}F(x)dx=\int_{x_{i-1}}^{x_i}L_3(x)dx+\int_{x_{i-1}}^{x_i}R_3(x)dx$$

$$y(x_i)=y(x_{i-1})+\frac{h}{24}(55F_{i-1}-59F_{i-2}+37F_{i-3}-9F_{i-4})+\frac{251}{720}F^{(4)}(\eta)h^5$$

$$y(x_i)=y(x_{i-1})+\frac{h}{24}\{55f[x_{i-1},y(x_{i-1})]-59f[x_{i-2},y(x_{i-2})]$$

$$+37f[x_{i-3},y(x_{i-3})]-9f[x_{i-4},y(x_{i-4})]\}+\frac{251}{720}F^{(4)}(\eta)h^5$$

略去余项，并用 $y_{i-1},y_{i-2},y_{i-3},y_{i-4}$ 代替精确值 $y(x_{i-1}),y(x_{i-2}),$ $y(x_{i-3}),y(x_{i-4})$ 可以得到计算 $y(x_i)$ 的近似公式

$$y_i = y_{i-1} + \frac{h}{24}\left[55f(x_{i-1}, y_{i-1}) - 59f(x_{i-2}, y_{i-2}) + 37f(x_{i-3}, y_{i-3}) - 9f(x_{i-4}, y_{i-4})\right], i = 4, 5, \cdots$$

（8.43）

上式是线性四步法，称为阿达姆斯外推公式．

阿达姆斯外推公式具有四阶精度．称作外推公式是因为插值多项是在 $[x_{i-4}, x_{i-1}]$ 上作出的，而积分区间是$[x_{i-1}, x_i]$.

要用外推公式必须用其它方法求出前四个点上的函数近似值．

2. 阿达姆斯内插公式(隐式阿达姆斯方法)

取 $r=1$, 但用数据点

$$(x_i, F_i), (x_{i-1}, F_{i-1}), (x_{i-2}, F_{i-2}), (x_{i-3}, F_{i-3})$$

作 $F(x)$ 的三次拉格朗日插值多项式 $L_3(x)$, 则有

$$\begin{aligned}
F(x) &= L_3(x) + R_3(x) \\
&= F_i \frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i-2})(x-x_{i-3})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i-2})(x_i-x_{i-3})} \\
&+ F_{i-1} \frac{(x-x_i)(x-x_{i-2})(x-x_{i-3})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i-2})(x_{i-1}-x_{i-3})} \\
&+ F_{i-2} \frac{(x-x_i)(x-x_{i-1})(x-x_{i-3})}{(x_{i-2}-x_i)(x_{i-2}-x_{i-1})(x_{i-2}-x_{i-3})} \\
&+ F_{i-3} \frac{(x-x_i)(x-x_{i-1})(x-x_{i-2})}{(x_{i-3}-x_i)(x_{i-3}-x_{i-1})(x_{i-3}-x_{i-2})} \\
&+ \frac{F^{(4)}(\xi)}{4!} \omega_4(x), \quad \xi \text{ 在} x_{i-3} \text{与} x_i \text{之间}
\end{aligned}$$

所以

$$y(x_i)-y(x_{i-1})=\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x,y(x))dx=\int_{x_{i-1}}^{x_i} F(x)dx=\int_{x_{i-1}}^{x_i} L_3(x)dx+\int_{x_{i-1}}^{x_i} R_3(x)dx$$

$$=\frac{h}{24}(9F_i+19F_{i-1}-5F_{i-2}+F_{i-3})+\int_{x_{i-1}}^{x_i}\frac{F^{(4)}(\xi)}{4!}\omega_4(x)dx$$

因为 $\omega_4(x)=(x-x_{i-1})(x-x_{i-2})(x-x_{i-3})(x-x_{i-4})$ 在区间$[x_{i-1},x_i]$上不变号，且设$F^{(4)}(x)$ 在区间$[x_{i-1},x_i]$上连续，同样由第一积分中值定理，可得

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i}\frac{F^{(4)}(\xi)}{4!}\omega_4(x)dx=\frac{F^{(4)}(\eta)}{4!}\int_{x_{i-1}}^{x_i}\omega_4(x)dx=-\frac{19}{720}F^{(4)}(\eta)h^5,$$

η在x_{i-1}与x_i 之间

即

$$y(x_i)-y(x_{i-1})=\int_{x_{i-1}}^{x_i}F(x)dx=\int_{x_{i-1}}^{x_i}L_3(x)dx+\int_{x_{i-1}}^{x_i}R_3(x)dx$$

$$y(x_i)=y(x_{i-1})+\frac{h}{24}(9F_i+19F_{i-1}-5F_{i-2}+F_{i-3})-\frac{19}{720}F^{(4)}(\eta)h^5$$

$$\begin{aligned}y(x_i)&=y(x_{i-1})\\&\quad+\frac{h}{24}\{9f[x_i,y(x_i)]+19f[x_{i-1},y(x_{i-1})]-5f[x_{i-2},y(x_{i-2})]+f[x_{i-3},y(x_{i-3})]\}\\&\quad-\frac{19}{720}F^{(4)}(\eta)h^5\end{aligned}$$

略去余项，并用 $y_i,y_{i-1},y_{i-2},y_{i-3}$ 代替精确值 $y(x_i),y(x_{i-1}),y(x_{i-2}),y(x_{i-3})$ ，可以得到计算 $y(x_i)$ 的近似公式

$$y_i = y_{i-1} + \frac{h}{24}\left[9f(x_i, y_i) + 19f(x_{i-1}, y_{i-1}) - 5f(x_{i-2}, y_{i-2}) + f(x_{i-3}, y_{i-3})\right], i = 3, 4, \cdots$$

（8.44）

上式是线性三步法，称为阿达姆斯内插公式．显然阿达姆斯内插公式也具有四阶精度．

内插公式与外推公式的主要区别在于，内插公式是隐式的，外推公式是显式的，因此用内插公式计算时要进行迭代，通常将阿达姆斯外推公式与阿达姆斯内插公式结合起来使用，由前者提供初值，然后再用后者进行修正，即：

$$\begin{cases} y_i^{(0)} = y_{i-1} + \dfrac{h}{24}(55 f_{i-1} - 59 f_{i-2} + 37 f_{i-3} - 9 f_{i-4}) \\ y_i^{(k+1)} = y_{i-1} + \dfrac{h}{24}[9 f(x_i, y_i^{(k)}) + 19 f_{i-1} - 5 f_{i-2} + f_{i-3}],\ k = 0,1,2,\cdots \end{cases}$$

(8.45)

其中 $f_{i-r} = f(x_{i-r}, y_{i-r})\ (r = 1,2,3,4).$

8.3.3 出发值的计算

阿达姆斯外推公式不能独立使用，要首先知道初值 y_0, y_1, y_2, y_3 . 一般地，使用线性 r 步法求解初值问题，要求知道 r 个出发值 $y_0, y_1, \cdots, y_{r-1}$ ，而其中仅初值 y_0 已知，其余 $r-1$ 个需用其它方法计算，通常这种计算可采用一步法 . 为了保证多步法的精确度，计算出发值的一步法的精度应不低于多步法的精度，龙格-库塔法是常用方法之一 .

§8.4 一阶微分方程组与高阶微分方程的数值解法

前面介绍了一阶常微分方程的各种数值解法，对一阶微分方程组和高阶微分方程，这些解法仍然适用．这里以含两个未知函数的微分方程组和二阶微分方程为例说明这些方法的计算公式．

8.4.1 一阶微分方程组

考虑以下方程组

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x, y, z), y(x_0) = y_0 \\ \dfrac{dz}{dx} = g(x, y, z), z(x_0) = z_0 \end{cases}$$

1．欧拉方法计算公式：

$$\begin{cases} y_i = y_{i-1} + hf(x_{i-1}, y_{i-1}, z_{i-1}) \\ z_i = z_{i-1} + hg(x_{i-1}, y_{i-1}, z_{i-1}) \end{cases}, i = 1, 2, \cdots$$

2．经典四阶龙格-库塔法计算公式：

$$\begin{cases} y_i = y_{i-1} + \dfrac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ z_i = z_{i-1} + \dfrac{h}{6}(M_1 + 2M_2 + 2M_3 + M_4) \end{cases}, i = 1, 2, \cdots$$

其中

$$\begin{cases} K_1 = f(x_{i-1}, y_{i-1}, z_{i-1}) \\ M_1 = g(x_{i-1}, y_{i-1}, z_{i-1}) \\ K_2 = f(x_{i-1} + \dfrac{h}{2}, y_{i-1} + \dfrac{h}{2} K_1, z_{i-1} + \dfrac{h}{2} M_1) \\ M_2 = g(x_{i-1} + \dfrac{h}{2}, y_{i-1} + \dfrac{h}{2} K_1, z_{i-1} + \dfrac{h}{2} M_1) \\ K_3 = f(x_{i-1} + \dfrac{h}{2}, y_{i-1} + \dfrac{h}{2} K_2, z_{i-1} + \dfrac{h}{2} M_2) \\ M_3 = g(x_{i-1} + \dfrac{h}{2}, y_{i-1} + \dfrac{h}{2} K_2, z_{i-1} + \dfrac{h}{2} M_2) \\ K_4 = f(x_{i-1} + h, y_{i-1} + hK_3, z_{i-1} + hM_3) \\ M_4 = g(x_{i-1} + h, y_{i-1} + hK_3, z_n + hM_3) \end{cases}$$

3．四阶阿达姆斯外推公式计算公式：

$$\begin{cases} y_i = y_{i-1} + \dfrac{h}{24}(55f_{i-1} - 59f_{i-2} + 37f_{i-3} - 9f_{i-4}) \\ z_i = z_{i-1} + \dfrac{h}{24}(55g_{i-1} - 59g_{i-2} + 37g_{i-3} - 9g_{i-4}) \end{cases} \quad (8.46)$$

4．阿达姆斯内插公式与阿达姆斯外推公式联合使用的计算公式：

$$\begin{cases} y_i^{(0)} = y_{i-1} + \dfrac{h}{24}(55f_{i-1} - 59f_{i-2} + 37f_{i-3} - 9f_{i-4}) \\ z_i^{(0)} = z_{i-1} + \dfrac{h}{24}(55g_{i-1} - 59g_{i-2} + 37g_{i-3} - 9g_{i-4}) \\ y_i^{(k+1)} = y_{i-1} + \dfrac{h}{24}(9f_i^{(k)} + 19f_{i-1} - 5f_{i-2} + f_{i-3}) \\ z_i^{(k+1)} = z_{i-1} + \dfrac{h}{24}(9g_i^{(k)} + 19g_{i-1} - 5g_{i-2} + g_{i-3}) \end{cases}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots \quad (8.47)$$

在(8.46)和(8.47)中

$$f_{i-r} = f(x_{i-r}, y_{i-r}, z_{i-r}), g_{i-r} = g(x_{i-r}, y_{i-r}, z_{i-r}), r = 1, 2, 3, 4$$

$$f_i^{(k)} = f(x_i, y_i^{(k)}, z_i^{(k)}), g_i^{(k)} = g(x_i, y_i^{(k)}, z_i^{(k)})$$

需指出的是，使用上述公式时必须用精度一致的一步法计算出发值：

$$y_i, z_i (i = 1, 2, 3).$$

8.4.2 高阶常微分方程

由常微分方程理论知，含一个未知函数的高阶微分方程的初值问题总可以转化为含多个未知函数的一阶常微分方程组的形式．下面以二阶微分方程初值问题为例．

$$\begin{cases} \dfrac{d^2y}{dx^2} = f(x, y, \dfrac{dy}{dx}) \\ y(x_0) = y_0, \ \left.\dfrac{dy}{dx}\right|_{x=x_0} = z_0 \end{cases} \qquad (8.48)$$

令 $z(x)=\dfrac{dy}{dx}$，则(8.48)式转化为如下一阶方程组

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx}=z, & y(x_0)=y_0 \\ \dfrac{dz}{dx}=f(x,y,z), & z(x_0)=z_0 \end{cases}$$

由此可见二阶微分方程可化为一阶微分方程组的形式．

最后指出，前述常微分方程初值问题数值解法的公式皆为递推公式，因此计算过程中就需要考虑误差的传播问题．关于这方面的详细讨论可参阅其它教材．