计算方法

北京师范大学数学科学学院
主讲人：纪光华
Email：ghji@bnu.edu.cn

第七章　常微分方程数值解

本章主要内容

1. 初值问题
   - Euler公式
   - Runge-Kutta方法
   - 单步法的收敛性和稳定性
   - 线性多步法
2. 边值问题
   - 打靶法
   - 差分方法

为什么要研究数值解法?

1. 能写出解析解的表达式；但是计算量比较大；例

$$\begin{cases} y' &= 1-2xy, x\in[0,1] \\ y(0) &= 1 \end{cases}$$

   的解为$y(x)=e^{x^2}\left(1+\int_0^x e^{-t^2}dt\right)$
2. 线性常系数微分方程，只要求出所有特征根，通解就可以写出来，但是高次代数方程求根并不容易；
3. 一般非线性方程解析解很难求出。

初值问题

本章主要讨论一阶常微分方程初值问题

$$\begin{cases} y' & = & f(x,y)(a \le x \le b), \\ y(a) & = & \eta \end{cases} \tag{1}$$

的数值解。
假设：

1. $f(x,y), \dfrac{\partial f(x,y)}{\partial y}$连续。
2. 问题(1)存在唯一解$y(x)$，且在$[a,b]$上充分光滑。

离散化方法： 将$[a,b]$作n等分，记$h=(b-a)/n$，$x_i=a+ih$，$(i=0,1,\cdots,n)$. 称h为步长. 所谓(1)的数值解，是求初值问题(1)的解$y(x)$在离散点x_i处的近似值y_i，$(i=0,1,\cdots,n)$.

在计算y_{i+1}时，如果只用到前一步的值y_i，称这类方法为**单步法**.
如果计算y_{i+1}时需用到前r步的值$y_i,y_{i-1},\cdots,y_{i-r+1}$，称这类方法是$r$**步方法**.当$r\ge 2$时称为**多步方法**.

Euler公式

将方程(1)两边在$[x_i, x_{i+1}]$积分

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

得到

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx. \tag{2}$$

应用左矩形公式近似右端积分得

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) + R_{i+1}^{(1)}, \tag{3}$$

其中

$$R_{i+1}^{(1)} = \frac{1}{2}\frac{df(x, y(x))}{dx}\Big|_{x=\xi_i} h^2 = \frac{1}{2}y''(\xi_i)h^2, \quad \xi_i \in (x_i, x_{i+1}),$$

上式中忽略$R_{i+1}^{(1)}$有

$$y(x_{i+1}) \approx y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)), \quad 0 \le i \le n-1. \tag{4}$$

由初值条件有

$$y(x_0) = \eta \equiv y_0.$$

代入(4) 可得

$$y(x_1) \approx y(x_0) + hf(x_0, y(x_0)) = y_0 + hf(x_0, y_0). \tag{5}$$

一般地，若已知$y(x_i)$的近似值y_i,由(4)可得

$$y(x_{i+1}) \quad \approx y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) \approx y_i + hf(x_i, y_i) \equiv y_{i+1}. \tag{6}$$

综合(5)-(6)，得到

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad i = 0, 1, \cdots, n-1. \tag{7}$$

称(7)为Euler公式.由上式可依次得到

$$y_1, y_2, \cdots y_n.$$

将y_i作为$y(x_i)$的近似值.
Euler公式(7)也可这样得到:
在(3)中忽略$R^{(1)}_{i+1}$,并用y_i代替$y(x_i)$,y_{i+1}代替$y(x_{i+1})$得到.

Euler方法的几何意义

在区间$[x_0, x_1]$上，用过点$P_0(x_0, y_0)$，以$f(x_0, y_0)$为斜率的直线$y = y_0 + f(x_0, y_0)(x - x_0)$近似代替$y(x)$，用$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0)$作为$y(x_1)$的近似值。以此类推，在$[x_i, x_{i+1}]$上，用过点$P_i(x_i, y_i)$，以$f(x_i, y_i)$为斜率的直线$y = y_i + f(x_i, y_i)(x - x_i)$近似$y(x)$.

Euler方法又称折线法。

一般的单步显式公式为

$$y_{i+1} = y_i + h\varphi(x_i, y_i, h), \tag{8}$$
$$y_0 = \eta. \tag{9}$$

$\varphi(x, y, h)$称为**增量函数**.

定义7.1

称

$$R_{i+1} = y(x_{i+1}) - [y(x_i) + h\varphi(x_i, y(x_i), h)]$$

为单步显式公式(8)在点x_{i+1}处的**局部截断误差**.

由上述定义, Euler公式(7)的局部截断误差为

$$R_{i+1} = y(x_{i+1}) - [y(x_i) + hf(x_i, y(x_i))] = \frac{1}{2}h^2 y''(\xi_i),$$
$$\xi_i \in (x_i, x_{i+1}).$$

Backward Euler

(2)中的积分用右矩形公式近似得

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hf(x_{i+1}, y(x_{i+1})) + R_{i+1}^{(2)},$$

其中

$$R_{i+1}^{(2)} = -\frac{h^2}{2}\frac{df(x, y(x))}{dx}\Big|_{x=\xi_i} = -\frac{h^2}{2}y''(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_i, x_{i+1}). \quad (10)$$

在(10)中忽略$R_{i+1}^{(2)}$,并用y_i代替$y(x_i)$,y_{i+1}代替$y(x_{i+1})$,得到

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}), \quad , i = 0, 1, \cdots, n-1. \qquad (11)$$

称(11)为**后退Euler公式**.
后退Euler公式是单步隐式公式.

一般的单步隐式公式为

$$y_{i+1} = y_i + h\psi(x_i, y_i, y_{i+1}, h), \quad i = 0, 1, \cdots, n-1 \quad (12)$$

$$y_0 = \eta. \quad (13)$$

其中$\psi(x_i, y_i, y_{i+1}, h)$称为增量函数.

定义7.2

称

$$R_{i+1} = y(x_{i+1}) - [y(x_i) + h\psi(x_i, y(x_i), y(x_{i+1}), h)]$$

为单步隐式公式*(12)*的局部截断误差.

由定义7.2, 后退Euler公式的局部截断误差为

$$\begin{aligned} R_{i+1} &= y(x_{i+1}) - y(x_i) - hf(x_{i+1}, y(x_{i+1})) \\ &= -\frac{h^2}{2} y''(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_i, x_{i+1}). \end{aligned}$$

梯形公式

将(2)中积分用梯形公式近似得

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \frac{h}{2}[f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))] + R_{i+1}^{(3)}, \quad (14)$$

其中

$$\begin{aligned} R_{i+1}^{(3)} &= -\frac{h^3}{12}\frac{d^2 f(x, y(x))}{dx^2}\Big|_{x=\xi_i} \\ &= -\frac{1}{12}y'''(\xi_i)h^3, \quad \xi_i \in (x_i, x_{i+1}). \end{aligned}$$

在(14)中忽略$R_{i+1}^{(3)}$,并用y_i代替$y(x_i)$,y_{i+1}代替$y(x_{i+1})$,得到

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})], \; i = 0, 1, \cdots, n-1. \quad (15)$$

称(15)为**梯形公式**.

梯形公式是一个单步隐式公式. 由单步隐式公式局部截断误差的定义得梯形公式的局部截断误差为

$$\begin{aligned} R_{i+1} &= y(x_{i+1}) - \left\{ y(x_i) + \frac{h}{2}[f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))] \right\} \\ &= -\frac{1}{12} y'''(\xi_i) h^3, \quad \xi_i \in (x_i, x_{i+1}). \end{aligned}$$

改进Euler公式

预测校正公式

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(p)} = y_i + hf(x_i, y_i) & \text{预测公式} \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(p)})] & \text{校正公式} \end{cases}$$

称上式为改进的Euler公式. 它是单步显式公式. 也可将上式写为如下两种形式

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

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(p)} = y_i + hf(x_i, y_i) \\ y_{i+1}^{(c)} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}^{(p)}) \\ y_{i+1} = \frac{1}{2}(y_{i+1}^{(p)} + y_{i+1}^{(c)}) \end{cases}$$

其局部截断误差为

$$\begin{aligned} R_{i+1} &= y(x_{i+1}) \\ &- \left\{ y(x_i) + \frac{h}{2}\left[f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, y(x_i) + hf(x_i, y(x_i))) \right] \right\}. \end{aligned}$$

截断误差估计

$$
\begin{aligned}
& R_{i+1} \\
& = y(x_{i+1}) - y(x_i) - \frac{h}{2}[f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))] \\
& + \frac{h}{2}[f(x_{i+1}, y(x_{i+1})) - f(x_{i+1}, y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)))] \\
& = -\frac{1}{12}y'''(\xi_i)h^3 \\
& \qquad + \frac{h}{2}\frac{\partial f(x_{i+1}, \eta_{i+1})}{\partial y}[y(x_{i+1}) - y(x_i) - hf(x_i, y(x_i))] \\
& = -\frac{1}{12}y'''(\xi_i)h^3 + \frac{h}{2} \times \frac{1}{2}\frac{\partial f(x_{i+1}, \eta_{i+1})}{\partial y}y''(\tilde{\xi}_i)h^2 \\
& = \left[-\frac{1}{12}y'''(\xi_i) + \frac{1}{4}\frac{\partial f(x_{i+1}, \eta_{i+1})}{\partial y}y''(\tilde{\xi}_i)\right]h^3, \quad \xi_i, \tilde{\eta}_i \in (x_i, x_{i+1}).
\end{aligned}
$$

Runge-Kutta方法–构造思想

由

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

可以得到

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hf(x_i + \theta h, y(x_i + \theta h)),$$

称$f(x_i + \theta h, y(x_i + \theta h))$为$y(x)$在$[x_i, x_{i+1}]$上的平均斜率，记为$k^*$.

记

$$k_1 = f(x_i, y_i), \quad k_2 = f(x_{i+1}, y_i + hk_1),$$

若用k_1近似k^*，则得一阶Euler公式，若用$\frac{k_1+k_2}{2}$近似k^*，则得2阶改进的Euler公式.

一般的r级Runge-Kutta方法为

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=1}^{r} \alpha_j k_j \\ k_1 = f(x_i, y_i) \\ k_j = f\left(x_i + \lambda_j h, y_i + h \sum_{l=1}^{j-1} \mu_{jl} k_l \right), \quad j = 2, 3, \cdots, r. \end{cases} \tag{16}$$

选择参数$\alpha_j, \lambda_j, \mu_{jl}$使其具有一定的阶数. 具体将局部截断误差

$$R_{i+1} = y(x_{i+1}) - y(x_i) - h \sum_{j=1}^{r} \alpha_j K_j,$$

其中

$$K_1 = f(x_i, y(x_i)),$$

$$K_j = f\left(x_i + \lambda_j h, y(x_i) + h \sum_{l=1}^{j-1} \mu_{jl} K_l \right), \quad j = 2, 3, \cdots, r,$$

展开为h的幂级数

$$R_{i+1} = c_0 + c_1 h + \cdots + c_p h^p + c_{p+1} h^{p+1} + \cdots$$

选择参数$\alpha_j, \lambda_j, \mu_{jl}$, 使得$c_0 = c_1 = \cdots = c_p = 0$, 而$c_{p+1} \neq 0$, 则公式(16)是$p$阶的.

称龙格库塔是**自洽**的如果$\lambda_i = \sum_{j=1}^{i-1} \mu_i, j, i = 2, \cdots, r$.

2阶Runge-Kutta方法

一般形式为

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h(\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2) \\ k_1 = f(x_i, y_i) \\ k_2 = f(x_i + \lambda_2 h, y_i + h\mu_{21} k_1) \end{cases} . \tag{17}$$

其局部截断误差是

$$\begin{cases} R_{i+1} = y(x_{i+1}) - y(x_i) - h(\alpha_1 K_1 + \alpha_2 K_2) \\ K_1 = f(x_i, y(x_i)) \\ K_2 = f(x_i + \lambda_2 h, y(x_i) + h\mu_{21} K_1) \end{cases}$$

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &= y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{1}{2}h^2 y''(x_i) + \frac{1}{3!}h^3 y'''(x_i) + O(h^4) \\ &= y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{1}{2}h^2 \left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_i, y(x_i)) \right. \\ &\quad \left. + y'(x_i)\frac{\partial f}{\partial y}(x_i, y(x_i))\right] + \frac{h^3}{6} y'''(x_i) + O(h^4) \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
K_1 &= y'(x_i), \\
K_2 &= f(x_i + \lambda_2 h, y(x_i) + h\mu_{21} K_1) = f(x_i + \lambda_2 h, y(x_i) + h\mu_{21} y'(x_i)) \\
&= f(x_i, y(x_i)) + \lambda_2 h \frac{\partial f}{\partial x}(x_i, y(x_i)) + h\mu_{21} y'(x_i) \frac{\partial f}{\partial y}(x_i, y(x_i)) \\
&\quad + \frac{1}{2}\left[(\lambda_2 h)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_i, y(x_i)) + 2\lambda_2 \mu_{21} h^2 y'(x_i) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_i, y(x_i)) \right. \\
&\quad \left. + (\mu_{21} h y'(x_i))^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_i, y(x_i))\right] + O(h^3)
\end{aligned}
$$

将K_1, K_2的表达式代入局部截断误差整理得

$$
\begin{aligned}
& R_{i+1} \\
&= h(1-\alpha_1-\alpha_2)y'(x_i) \\
&+h^2\left[\left(\frac{1}{2}-\alpha_2\lambda_2\right)\frac{\partial f}{\partial x}(x_i, y(x_i)) + \left(\frac{1}{2}-\alpha_2\mu_{21}\right)y'(x_i)\frac{\partial f}{\partial y}(x_i, y(x_i))\right] \\
&+h^3\left[\frac{1}{6}y'''(x_i) - \frac{1}{2}\alpha_2\left((\lambda_2)^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_i, y(x_i)) + 2\lambda_2\mu_{21}y'(x_i)\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}(x_i, y\right.\right. \\
&\left.\left.+(\mu_{21}y'(x_i))^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_i, y(x_i))\right)\right] + O(h^4).
\end{aligned}
$$

要使(17)具有2阶精度, 则

$$
\begin{cases}
1-\alpha_1-\alpha_2 = 0 \\
\frac{1}{2}-\alpha_2\lambda_2 = 0 \\
\frac{1}{2}-\alpha_2\mu_{21} = 0
\end{cases}
$$

显然α_2不能为零.
当$\alpha_2 \neq 0$可解得即

$$\begin{cases} \alpha_1 = 1 - \alpha_2 \\ \lambda_2 = \frac{1}{2\alpha_2} \\ \mu_{21} = \frac{1}{2\alpha_2}. \end{cases}$$

于是我们可以得到一类2阶Runge-Kutta公式

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h[(1-\alpha_2)k_1 + \alpha_2 k_2] \\ \\ k_1 = f(x_i, y_i) \\ \\ k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{2\alpha_2}h, y_i + \frac{1}{2\alpha_2}hk_1\right). \end{cases}$$

当$\alpha_2 = \dfrac{1}{2}$, 得改进的Euler公式. 当$\alpha_2 = 1$, 得变形的Euler公式:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + hk_2 \\ k_1 = f(x_i, y_i) \\ k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hk_1\right). \end{cases}$$

若$\alpha_2 = \dfrac{3}{4}$, 则得

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{4}(k_1 + 3k_2) \\ k_1 = f(x_i, y_i) \\ k_2 = f\left(x_i + \frac{2}{3}h, y_i + \frac{2}{3}hk_1\right). \end{cases}$$

利用上述构造方法可以得到3阶或4阶等高阶Runge-Kutta公式.

最常用的RK4

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

其中

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(x_n, y_n), \\
k_2 &= f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1), \\
k_3 &= f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2), \\
k_4 &= f(x_n + h, y_n + hk_3)
\end{aligned}$$

隐式Runge-Kutta

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{r} \alpha_i k_i,$$

其中$k_i = f\left(x_n + \lambda_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{r} \mu_{ij} k_j\right), i = 1, \cdots, r.$

整体截断误差

用某种数值方法(例如Euler公式,改进Euler公式)求得的数值解y_1, $y_2, \cdots, y_n$,一般来说与步长h有关.为了反映出这种关系，我们将其记为

$$y_1^{[h]}, y_2^{[h]}, \cdots, y_n^{[h]}.$$

求数值解的目的是用$y_i^{[h]}$作为$y(x_i)$的近似值.自然要关心近似值$y_i^{[h]}$与精确值$y(x_i)$之间的差

$$y(x_i) - y_i^{[h]}, \qquad i = 1, 2, \cdots n.$$

定义7.3

称

$$E(h) = \max_{1 \le i \le n} |y(x_i) - y_i^{[h]}|$$

为**整体截断误差**.如果

$$\lim_{h \to 0} E(h) = 0,$$

则称该方法收敛.

整体截断误差为所有节点上误差的最大值，它和局部截断误差是有紧密关系的．在一定条件下,如果局部截断误差

$$R_{i+1} = O(h^{p+1}), \quad i = 0, 2, \cdots n-1,$$

则有$E(h) = O(h^p)$.

定义7.4
如果一个求解公式的局部截断误差为

$$R_{i+1} = O(h^{p+1}), \quad i = 0, 2, \cdots n-1,$$

则称该公式是p阶的，或具有p阶精度．

根据这定义，Euler公式,后退的Euler公式是1阶的，梯形公式和改进的Euler公式是2阶的．

单步法的收敛性与稳定性

定义7.5

设$\{y(x_i)\}_{i=1}^n$是微分方程*(1)*的解，$\{y_i^{[h]}\}_{i=1}^n$是用某种数值方法得到的近似解. 则称

$$E(h) = \max_{1\le i\le n} |y(x_i) - y_i^{[h]}|$$

为该方法的整体截断误差. 如果

$$\lim_{h\to 0} E(h) = 0,$$

则称该方法收敛.

考虑单步显式公式

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h\varphi(x_i, y_i, h), \quad i = 0, 1, \cdots n-1, \\ y_0 = \eta. \end{cases} \tag{18}$$

定理7.1

设$y(x)$是微分方程*(1)*的解，$\{y_i\}_{i=0}^n$为单步显式公式*(18)*的解. 如果

1. 存在常数$c_0 > 0$，使得

$$|R_{i+1}| \le c_0 h^{p+1}, \quad i = 0, 1, \cdots, n-1,$$

2. 存在$h_0 > 0$, $L > 0$，使得

$$\max_{\substack{(x,y)\in D_\delta \\ 0\le h\le h_0}} \left|\frac{\partial\varphi(x,y,h)}{\partial y}\right| \le L.$$

则当$h \le \min\left\{h_0, \sqrt[p]{\frac{\delta}{c}}\right\}$时，有$E(h) \le ch^p$. 其中

$$D_\delta = \{(x,y) \mid a \le x \le b, y(x) - \delta \le y \le y(x) + \delta\},$$

$$c = \frac{c_0}{L}\left[e^{L(b-a)} - 1\right].$$

引理7.1

假设数列$\{x_n\}$满足不等式

$$|x_{i+1}| \leq A|x_i| + B \ (i = 0, 1, \cdots, k-1) \tag{19}$$

则有

$$|x_k| \leq A^k|x_0| + \begin{cases} \frac{A^k-1}{A-1}B & (A \neq 1), \\ kB & (A = 1) \end{cases}$$

其中A和B为非负常数。

相容性

定义7.6

单步方法(18)称为相容的，是指$\varphi(t,u,0)=f(x,u)$.

方法的阶与其相容性的简单关系：

1. 相容的单步方法至少是1阶的；
2. $q(q\geq 1)$阶的单步方法是相容的。

稳定性

定义7.7

对于初值问题*(1)*, 设$\{y_i\}_{i=0}^n$是由单步法*(18)*得到的的近似解, $\{z_i\}_{i=0}^n$ 是*(18)*扰动后的解, 即满足

$$\begin{cases} z_{i+1} = z_i + h[\varphi(x_i, y_i, h) + \delta_{i+1}], \quad i = 0, 1, \cdots n-1, \\ z_0 = \eta + \delta_0, \end{cases} \tag{20}$$

如果存在正常数C, ε_0, h_0, 使得对所有$\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$, $h \in (0, h_0]$, 当$\max\limits_{0 \le i \le n} |\delta_i| \le \varepsilon$时, 有

$$\max_{0 \le i \le n} |y_i - z_i| \le C\varepsilon,$$

则称单步法*(18)*稳定.

定理7.2

在定理*7.1*的条件下, 单步公式*(18)*是稳定的.

单步方法的自适应算法

对于一个p阶方法(18)，设用步长h算得的值记为$y_i^{[h]}$。当f和φ满足适当条件时，其解有如下渐近展开式：

$$y_i^{[h]} = y(x_i)+c_p(x_i)h^p+c_{p+1}(x_i)h^{p+1}+\cdots+C_N(x_i)h^N+C_{N+1}(x_i,h)h^{N+1}. \tag{21}$$

其中$c_p(x),\cdots,v_N(x)$是x的连续函数且与h无关；$c_{N+1}(x,h)$关于$x\in[a,b], h\in(0,h_0]$ 一致有界。

对于同一点$x_i=a+ih$，用步长h计算得到的值为$y_i^{[h]}$，用步长$\frac{h}{2}$计算得到的值为$y_{2i}^{[\frac{h}{2}]}$，当h很小时，则有如下近似等式

$$y_i^{[h]} \approx y(x_i)+c_p(x_i)h^p, \tag{22}$$

$$y_{2i}^{[\frac{h}{2}]} \approx y(x_i)+c_p(x_i)\left(\frac{h}{2}\right)^p \tag{23}$$

由以上两个近似式可得

$$y(x_i) - y_{2i}^{[\frac{h}{2}]} \approx \frac{1}{2^p - 1} \left(y_{2i}^{[\frac{h}{2}]} - y_i^{[h]} \right)$$

实际计算时采用反复二分步长的方法进行计算，对于给定的精度ε，当

$$\frac{1}{2^p - 1} \max_{1 \le i \le n} |y_{2i}^{[\frac{h}{2}]} - y_i^{[h]}| < \varepsilon$$

时计算终止，并以$y_{2i}^{[\frac{h}{2}]}$或$\frac{1}{2^p - 1} \left(2^p y_{2i}^{[\frac{h}{2}]} - y_i^{[h]} \right)$作为$y(x_i)$的近似值。

单步方法的加速

设一个线性单步公式(18)有

$$y(x_{i+1}) - [y(x_i) + h\varphi(x, y(x_i), h)] = C(x_i)h^{p+1} + O(h^{p+2}), \quad (24)$$

其中$C(x)$有一阶连续的导数，则下列单步法

$$\left\{\begin{array}{lcl} y_{i+1} & = & \frac{2^p}{2^p-1} y_{i+1}^{[\frac{h}{2}]} - \frac{1}{2^p-1} y_{i+1}^{[h]}, \\ y_{i+1}^{[h]} & = & y_i + h\varphi(x_i, y_i, h), \\ y_{i+\frac{1}{2}}^{[\frac{h}{2}]} & = & y_i + \frac{h}{2}\varphi(x_i, y_i, \frac{h}{2}), \\ y_{i+1}^{[\frac{h}{2}]} & = & y_{i+\frac{1}{2}}^{[\frac{h}{2}]} + \frac{h}{2}\varphi(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{i+\frac{1}{2}}^{[\frac{h}{2}]}, \frac{h}{2}), \end{array}\right. \quad (25)$$

是$(p+1)$阶的，其中$x_{i+\frac{1}{2}} = x_i + \frac{h}{2}$.

$$
\begin{aligned}
y_{i+1} &= \frac{2^p}{2^p-1}\left[y_i + \frac{h}{2}\varphi(x_i, y_i, \frac{h}{2}) + \frac{h}{2}\varphi(x_{i+\frac{1}{2}}, y_i + \frac{h}{2}\varphi(x_i, y_i, \frac{h}{2}), \frac{h}{2})\right] \\
&\quad - \frac{1}{2^p-1}[y_i + h\varphi(x_i, y_i, h)],
\end{aligned}
$$

其局部截断误差为

$$
\begin{aligned}
R_{i+1} &= y(x_{i+1}) - \frac{2^p}{2^p-1}\left[y(x_i) + \frac{h}{2}\varphi(x_i, y(x_i), \frac{h}{2})\right. \\
&\quad \left. + \frac{h}{2}\varphi(x_{i+\frac{1}{2}}, y(x_i) + \frac{h}{2}\varphi(x_i, y(x_i), \frac{h}{2}), \frac{h}{2})\right] \\
&\quad + \frac{1}{2^p-1}[y(x_i) + h\varphi(x_i, y(x_i), h)]
\end{aligned}
$$

由(24)可得

$$\begin{aligned}
&y(x_{i+\frac{1}{2}}) - \left[y(x_i) + \frac{h}{2}\varphi(x_i, y(x_i), \frac{h}{2})\right] \\
&= C(x_i)\left(\frac{h}{2}\right)^{p+1} + O(h^{p+2}), \qquad (26) \\
&y(x_{i+1}) - \left[y(x_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{h}{2}\varepsilon(x_{i+\frac{1}{2}}, y(x_{i+\frac{1}{2}}), \frac{h}{2})\right] \\
&= C(x_{i+\frac{1}{2}})\left(\frac{h}{2}\right)^{p+1} + O(h^{p+2}) \\
&= C(x_i)\left(\frac{h}{2}\right)^{p+1} + O(h^{p+2}) \qquad (27)
\end{aligned}$$

线性多步法

一般的线性k步方法为

$$y_{i+1} = \sum_{j=0}^{k-1} a_j y_{i-j} + h \sum_{j=-1}^{k-1} b_j f(x_{i-j}, y_{i-j}). \tag{28}$$

其中a_{k-1}, b_{k-1}不同时为零.

- 当$b_{-1} = 0$时为显式公式; 当$b_{-1} \neq 0$时为隐式公式;
- 当$k = 1, a_0 = b_0 = 1, b_{-1} = 0$时是Euler公式;
- 当$k = 1, a_0 = 1, b_0 = b_{-1} = \frac{1}{2}$时是梯形公式;

定义7.8

称

$$R_{i+1}=y(x_{i+1})-\left[\sum_{j=0}^{k-1}a_jy(x_{i-j})+h\sum_{j=-1}^{k-1}b_jf(x_{i-j},y(x_{i-j}))\right]$$

为k步公式(28)在点x_{i+1}处的局部截断误差．当

$$R_{i+1}=O(h^{p+1})$$

时，称(28)是p阶公式．

定义7.9

如果线性k步公式(28)至少是1阶的，则称是相容的；如果是$p(p\geq 1)$阶的，则称是p阶相容的．

基于数值积分的构造方法—-Adams公式

将方程$y'(x) = f(x, y(x))$在$[x_i, x_{i+1}]$上积分，得

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx. \qquad (29)$$

1 Adams显式公式：
作$f(x, y(x))$以$x_i, x_{i-1}, \cdots, x_{i-r}$为插值节点的$r$次Lagrange插值多项式 $L_r(x)$，有

$$\begin{aligned} L_{i,r}(x) &= \sum_{j=0}^{r} f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) l_{i-j}(x) \\ &= \sum_{j=0}^{r} f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq j}}^{r} \frac{x - x_{i-l}}{x_{i-j} - x_{i-l}}. \end{aligned}$$

我们有

$$f(x, y(x)) = L_{i,r}(x) + R_{i,r}(x) \qquad (30)$$

$$
\begin{aligned}
f(x,y(x)) &= L_{i,r}(x) + \frac{1}{(r+1)!}\frac{d^{r+1}f(x,y(x))}{dx^{r+1}}\Big|_{x=\eta_i}\prod_{j=0}^{r}(x-x_{i-j}) \\
&= L_{i,r}(x) + \frac{1}{(r+1)!}y^{(r+2)}(\eta_i)\prod_{j=0}^{r}(x-x_{i-j}).
\end{aligned}
$$

将上式代入(29)得

$$
y(x_{i+1}) = y(x_i) + \sum_{j=0}^{r} f(x_{i-j}, y(x_{i-j}))\int_{x_i}^{x_{i+1}}\prod_{\substack{l=0\\ l\neq j}}^{r}\frac{x-x_{i-l}}{x_{i-j}-x_{i-l}}dx
$$

$$
+\frac{1}{(r+1)!}\int_{x_i}^{x_{i+1}} y^{(r+2)}(\eta_i)\prod_{j=0}^{r}(x-x_{i-j})dx
$$

$$
= y(x_i) + h\sum_{j=0}^{r} f(x_{i-j}, y(x_{i-j}))\int_0^1\prod_{\substack{l=0\\ l\neq j}}^{r}\frac{l+t}{l-j}dt \quad (\text{令} x = x_i + th)
$$

$$
+h^{r+2}y^{(r+2)}(\xi_i)\frac{1}{(r+1)!}\int_0^1\prod_{j=0}^{r}(j+t)dt. \quad (\text{积分中值定理})
$$

其中$\xi_i \in (x_{i-r}, x_{i+1})$. 记

$$\beta_{rj} = \int_0^1 \prod_{\substack{l=0 \\ l\neq j}}^{r} \frac{l+t}{l-j} dt, \quad j = 0, 1, \cdots, r,$$

$$\alpha_{r+1} = \frac{1}{(r+1)!} \int_0^1 \prod_{j=0}^{r} (j+t) dt,$$

则

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) = \quad & y(x_i) + h \sum_{j=0}^{r} \beta_{rj} f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) \\ & + \alpha_{r+1} h^{r+2} y^{(r+2)}(\xi_i). \end{aligned} \tag{31}$$

忽略$\alpha_{r+1} h^{r+2} y^{(r+2)}(\xi_i)$, 并用$y_{i-j}$代替$y(x_{i-j})$得$(r+1)$步Adams显式公式:

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=0}^{r} \beta_{rj} f(x_{i-j}, y_{i-j}). \tag{32}$$

(32)的局部截断误差是

$$
\begin{aligned}
R_{i+1} &= y(x_{i+1}) - \left[y(x_i) + h \sum_{j=0}^{r} \beta_{rj} f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) \right] \\
&= \alpha_{r+1} h^{r+2} y^{(r+2)}(\xi_i).
\end{aligned}
$$

故(32)是$(r+1)$步、$(r+1)$阶显式的Adams公式.

1.1 $r=0$, 得Euler公式

$$
\begin{aligned}
y_{i+1} &= y_i + hf(x_i, y_i), \\
R_{i+1} &= \frac{1}{2} h^2 y''(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_i, x_{i+1}).
\end{aligned}
$$

1.2 $r=1$, 得

$$
\begin{aligned}
y_{i+1} &= y_i + \frac{h}{2}[3f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_{i-1})], \\
R_{i+1} &= \frac{5}{12} h^3 y^{(3)}(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1}).
\end{aligned}
$$

1.3 $r=2$, 得

$$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{12}[23f(x_i,y_i)-16f(x_{i-1},y_{i_1})+5f(x_{i-2},y_{i-2})],$$
$$R_{i+1}=\frac{3}{8}h^4y^{(4)}(\xi_i),\quad \xi_i\in(x_{i-2},x_{i+1}).$$

1.4 $r=3$, 得

$$\begin{aligned} y_{i+1}=y_i+\frac{h}{24}&[55f(x_i,y_i)-59f(x_{i-1},y_{i-1})\\ &+37f(x_{i-2},y_{i-2})-9f(x_{i-3},y_{i-3})],\end{aligned}$$
$$R_{i+1}=\frac{251}{720}h^5y^{(5)}(\xi_i),\quad \xi_i\in(x_{i-3},x_{i+1}).$$

Remark: 以上推导Adams显式公式时，被插值点$x\in[x_i,x_{i+1}]$在插值节点所决定的最大区间$[x_{i-r},x_i]$的外面，所以式(32)又称为Adams外推公式或Adams开型公式（Adams-Bashforth，AB_4方法）。

2 Adams隐式方法：

作$f(x,y(x))$ 以x_{i+1}，x_i，x_{i-1}，$\cdots$，x_{i-r+1} 为插值节点的r次Lagrange 插值多项式$L_r(x)$，有

$$\begin{aligned} L_{i,r}(x) = & \sum_{j=-1}^{r-1} f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) l_{i-j}(x) \\ = & \sum_{j=-1}^{r-1} f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) \prod_{\substack{l=-1 \\ l\neq j}}^{r-1} \frac{x - x_{i-l}}{x_{i-j} - x_{i-l}}. \end{aligned}$$

我们有

$$\begin{aligned} f(x,y(x)) = & L_{i,r}(x) + R_{i,r}(x) \\ = & L_{i,r}(x) + \frac{1}{(r+1)!} \frac{d^{r+1} f(x,y(x))}{dx^{r+1}}\Big|_{x=\eta_i} \prod_{j=-1}^{r-1} (x - x_{i-j}) \\ = & L_{i,r}(x) + \frac{1}{(r+1)!} y^{(r+2)}(\bar{\eta}_i) \prod_{j=-1}^{r-1} (x - x_{i-j}). \end{aligned}$$

将上式代入(29)得

$$
\begin{aligned}
y(x_{i+1}) &= y_(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_{i,r}(x)dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} R_{i,r}(x)dx \\
&= \sum_{j=-1}^{r-1} f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) \int_{x_i}^{x_{i+1}} \prod_{\substack{l=-1 \\ l\neq j}}^{r-1} \frac{x - x_{i-l}}{x_{i-j} - x_{i-l}} dx \\
&+ \frac{1}{(r+1)!} \int_{x_i}^{x_{i+1}} y^{(r+2)}(\overline{\eta}_i) \prod_{j=-1}^{r-1} (x - x_{i-j}) dx \\
&= y(x_i) + h \sum_{j=-1}^{r-1} f(x_{i-j}, y(x_{i-j}) \int_0^1 \prod_{\substack{l=-1 \\ l\neq j}}^{r-1} \frac{l+t}{l-j} dt \quad (\text{令} x = x_i + th) \\
&+ h^{r+2} y^{(r+2)}(\bar{\xi}_i) \frac{1}{(r+1)!} \int_0^1 \prod_{j=-1}^{r-1} (j+t) dt. \quad (\text{积分中值定理})
\end{aligned}
$$

其中$\bar{\xi}_i \in (x_{i-r+1}, x_{i+1})$.

$$\bar{\beta}_{rj} = \int_0^1 \prod_{\substack{l=-1\\ l\neq j}}^{r-1} \frac{l+t}{l-j} dt, \quad j = 0, 1, \cdots, r,$$

$$\bar{\alpha}_{r+1} = \frac{1}{(r+1)!} \int_0^1 \prod_{j=-1}^{r-1} (j+t) dt,$$

则

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &= y(x_i) + h \sum_{j=-1}^{r-1} \bar{\beta}_{rj} f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) \\ &\quad + \bar{\alpha}_{r+1} h^{r+2} y^{(r+2)}(\bar{\xi}_i). \end{aligned} \tag{33}$$

忽略$\bar{\alpha}_{r+1} h^{r+2} y^{(r+2)}(\xi_i)$, 并用$y_{i-j}$代替$y(x_{i-j})$得$r$步Adams隐式公式:

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=-1}^{r-1} \bar{\beta}_{rj} f(x_{i-j}, y_{i-j}). \tag{34}$$

(34)的局部截断误差是

$$\begin{aligned} R_{i+1} &= y(x_{i+1}) - \left[y(x_i) + h \sum_{j=-1}^{r-1} \bar{\beta}_{rj} f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) \right] \\ &= \bar{\alpha}_{r+1} h^{r+2} y^{(r+2)}(\bar{\xi}_i). \end{aligned}$$

故(34)是r步、$(r+1)$阶隐式的Adams公式.

2.1 $r=1$, 得梯形公式

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + \frac{h}{2}[f(x_{i+1}, y_{i+1}) + f(x_i, y_i)], \\ R_{i+1} &= -\frac{1}{12} h^3 y'''(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_i, x_{i+1}). \end{aligned}$$

2.2 $r=2$, 得

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + \frac{h}{12}[5f(x_{i+1}, y_{i+1}) + 8f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_{i-1})], \\ R_{i+1} &= -\frac{1}{24} h^4 y^{(4)}(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1}). \end{aligned}$$

2.3 $r=3$, 得

$$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{24}\Big[9f(x_{i+1},y_{i+1})+19f(x_i,y_i)$$
$$-5f(x_{i-1},y_{i_1})+f(x_{i-2},y_{i-2})\Big]$$
$$R_{i+1}=-\frac{19}{720}h^5y^{(5)}(\xi_i),\quad \xi_i\in(x_{i-2},x_{i+1}).$$

Remark:以上推导Adams隐式公式时，被插值点$x\in[x_i,x_{i+1}]$在插值点所决定的最大区间$[x_{i-r+1},x_{i+1}]$内，故又称式(34)为Adams内插公式或Adams闭型公式（Adams-Moulton,AM_4方法）

Adams预测矫正方法

同阶Adams显隐格式相比

1. 显格式使用方便，计算量较小；
2. 隐格式截断误差较小，稳定性较好；

将同阶的显式Admas公式和隐式Admas公式结合起来，组成预测校正公式. 如将2阶显式Admas公式和2阶隐式Asmas公式结合起来，得下面的预测校正公式:

$$y_{i+1}^{(p)} = y_i + \frac{h}{2}[3f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_{i-1})],$$
$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(p)}) + f(x_i, y_i)].$$

局部截断误差：

$$\begin{aligned} R_{i+1} &= y(x_{i+1}) - y(x_i) - \frac{h}{2}\Big\{f\Big(x_{i+1}, y(x_i) + \frac{h}{2}[3f(x_i, y(x_i)) \\ &\quad - f(x_{i-1}, y(x_{i-1}))]\Big) + f(x_i, y(x_i))\Big\} \end{aligned}$$

同理将4阶显式Admas公式和4阶隐式Admas公式组成下面的预测校正公式:

$$y_{i+1}^{(p)} = y_i + \frac{h}{24}[55f(x_i, y_i) - 59f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 37f(x_{i-2}, y_{i-2}) \\ -9f(x_{i-3}, y_{i-3})],$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}\Big[9f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(p)}) + 19f(x_i, y_i) \\ -5f(x_{i-1}, y_{i_1}) + f(x_{i-2}, y_{i-2})\Big].$$

$$R_{i+1} = -\frac{19}{720}h^5 y^{(5)}(\xi_i) + O(h^6).$$

Richardson外推法

Richardson外推法是以低阶公式产生高精度收敛效果的一种方法。它是由英国数学家、物理学家、气象学家Lewis Fry Richardson于20世纪前期提出的。我们已经在数值积分这章里的Romberg积分公式中利用了这种技巧。
Richardson外推加速的原理如下：

定理7.3

设$f(x) \in C^{\infty}[a,b]$，如果成立

$$T(h) = I + a_1 h^2 + a_2 h^4 + a_3 h^6 + \cdots + a_k h^{2k} + \cdots ,$$

式中系数$a_k (k = 1, 2, \cdots)$与h无关，按上式有

$$T\left(\frac{h}{2}\right) = I + \frac{a_1}{4} h^2 + \frac{a_2}{16} h^4 + \cdots$$

将以上两个式子做线性组合：$T_1(h) = \frac{4}{3} T\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3} T(h)$，
则$T_h(h) = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \cdots$.

Adams公式的加速

对Adams显式公式和隐式公式采用Richardson外推技术，可得到带改进的预测矫正公式

$$
\begin{aligned}
y_{i+1}^{(p)} &= y_i + \frac{h}{24}[55f(x_i, y_i) - 59f(x_{i-1}, y_{i-1}) \\
&\qquad\qquad +37f(x_{i-2}, y_{i-2}) - 9f(x_{i-3}, y_{i-3})], \\
y_{i+1}^{(c)} &= y_i + \frac{h}{24}[9f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(p)}) + 19f(x_i, y_i) \\
&\qquad\qquad -5f(x_{i-1}, y_{i-1}) + f(x_{i-2}, y_{i-2})], \\
R_{i+1}^{p} &= = \frac{251}{720}h^5 + O(h^6), \\
R_{i+1}^{c} &= = -\frac{19}{720}h^5 + O(h^6), \\
y_{i+1} &= \frac{251}{270}y_{i+1}^{(c)} + \frac{19}{270}y_{i+1}^{(p)}
\end{aligned}
$$

可证局部截断误差为$O(h^6)$,四步显式公式。

基于Taylor展开的待定系数方法

要构造下面的线性k步方法

$$y_{i+1} = \sum_{j=0}^{k-1} a_j y_{i-j} + h \sum_{j=-1}^{k-1} b_j f(x_{i-j}, y_{i-j}). \tag{35}$$

求系数a_j, b_j, 使公式具有一定的阶数. 局部截断误差为:

$$R_{i+1} \qquad = y(x_{i+1}) - \left[\sum_{j=0}^{k-1} a_j y(x_{i-j}) + h \sum_{j=-1}^{k-1} b_j f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) \right]$$

利用方程(1)和Taylor展开得

$$
\begin{aligned}
R_{i+1} &= y(x_{i+1}) - \sum_{j=0}^{k-1} a_j y(x_{i-j}) - h \sum_{j=-1}^{k-1} b_j y'(x_{i-j}) \\
&= \sum_{l=0}^{p+1} \frac{1}{l!} y^{(l)}(x_i) h^l + O(h^{p+2}) \\
&\quad - \sum_{j=0}^{k-1} a_j \left[\sum_{l=0}^{p+1} \frac{1}{l!} y^{(l)}(x_i)(-jh)^l + O(h^{p+2}) \right] \\
&\quad - h \sum_{j=-1}^{k-1} \left[b_j \sum_{l=0}^{p} \frac{1}{l!} y^{(l+1)}(x_i)(-jh)^l + O(h^{p+1}) \right] \\
&= \left(1 - \sum_{j=0}^{k-1} a_j\right) y(x_i) + \\
&\quad \sum_{l=1}^{p+1} \frac{1}{l!} \left[1 - \sum_{j=0}^{k-1} (-j)^l a_j - l \sum_{j=-1}^{k-1} (-j)^{l-1} b_j \right] h^l y^{(l)}(x_i) + O(h^{p+2
\end{aligned}
$$

要使公式(35)为p阶，则

$$1-\sum_{j=0}^{k-1}a_j=0$$

$$1-\sum_{j=0}^{k-1}(-j)^l a_j-l\sum_{j=-1}^{k-1}(-j)^{l-1}b_j=0,\quad l=1,2\cdots,p.$$

这时局部截断误差为

$$\begin{aligned}R_{i+1} &= \frac{1}{(p+1)!}\left[1-\sum_{j=0}^{k-1}(-j)^{p+1}a_j-(p+1)\sum_{j=-1}^{k-1}(-j)^p b_j\right]\\ &\quad\times h^{p+1}y^{(p+1)}(x_i)+O(h^{p+2}).\end{aligned}$$

例7.1

给定微分方程初值问题

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), & a \le x \le b, \\ y(a) = \eta, \end{cases}$$

取正整数n, 并记$h = (b-a)/n$, $x_i = a + ih$, $0 \le i \le n$. 试确定两步公式

$$y_{i+1} = \alpha y_{i-1} + h\Big[\beta_0 f(x_{i+1}, y_{i+1}) + \beta_1 f(x_i, y_i) + \beta_2 f(x_{i-1}, y_{i-1})\Big]$$

中的参数$\alpha, \beta_0, \beta_1, \beta_2$, 使其具有尽可能高的精度, 并指出能达到的阶数.

解 局部截断误差为

$$\begin{aligned} R_{i+1} = & \, y(x_{i+1}) - \alpha y(x_{i-1}) - h[\beta_0 f(x_{i+1}, y(x_{i+1})) \\ & + \beta_1 bf(x_i, y(x_i)) + \beta_2 f(x_{i-1}, y(x_{i-1}))] \\ = & \, y(x_{i+1}) - \alpha y(x_{i-1}) - \beta_0 hy'(x_{i+1}) - \beta_1 hy'(x_i) - \beta_2 hy'(x_{i-1}) \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
= \quad & y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2} y''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} y^{(4)}(x_i) \\
& + \frac{h^5}{5!} y^{(5)}(x_i) + O(h^6) \\
& - \alpha \Big[y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2} y''(x_i) - \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} y^{(4)}(x_i) \\
& - \frac{h^5}{5!} y^{(5)}(x_i) + O(h^6) \Big] \\
& - \beta_0 h \Big[y'(x_i) + hy''(x_i) + \frac{h^2}{2} y'''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y^{(4)}(x_i) \\
& + \frac{h^4}{4!} y^{(5)}(x_i) + O(h^5) \Big] - \beta_1 h y'(x_i) \\
& - \beta_2 h \Big[y'(x_i) - hy''(x_i) + \frac{h^2}{2} y'''(x_i) - \frac{h^3}{3!} y^{(4)}(x_i) \\
& + \frac{h^4}{4!} y^{(5)}(x_i) + O(h^5) \Big]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
= \quad & (1-\alpha)y(x_i) + (1+\alpha-\beta_0-\beta_1-\beta_2)hy'(x_i) \\
& +\Big(\frac{1}{2}-\frac{\alpha}{2}-\beta_0+\beta_2\Big)h^2y''(x_i) \\
& +\Big(\frac{1}{6}+\frac{\alpha}{6}-\frac{\beta_0}{2}-\frac{\beta_2}{2}\Big)h^3y'''(x_i) + \left(\frac{1}{24}-\frac{\alpha}{24}-\frac{\beta_0}{6}+\frac{\beta_2}{6}\right)h^4y^{(4)}(x \\
& +\left(\frac{1}{120}+\frac{\alpha}{120}-\frac{\beta_0}{24}-\frac{\beta_2}{24}\right)h^5y^{(5)}(x_i) + O(h^6).
\end{aligned}
$$

要使公式精度尽量高, 则

$$
\begin{aligned}
& 1-\alpha = 0 \\
& 1+\alpha-\beta_0-\beta_1-\beta_2 = 0 \\
& \frac{1}{2}-\frac{\alpha}{2}-\beta_0+\beta_2 = 0 \\
& \frac{1}{6}+\frac{\alpha}{6}-\frac{\beta_0}{2}-\frac{\beta_2}{2} = 0
\end{aligned}
$$

解得$\alpha = 1, \beta_0 = \frac{1}{3}, \beta_1 = \frac{4}{3}, \beta_2 = \frac{1}{3}$.

此时局部截断误差为

$$R_{i+1} = -\frac{1}{90}h^5 y^{(5)}(x_i) + O(h^6).$$

所以该公式是4阶公式(Simpson公式).
Milne公式（4步4阶显式）

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4h}{3}[2f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 2f(x_{i-2}, y_{i-2})], \quad (36)$$

局部截断误差:

$$R_{i+1} = \frac{14}{45}h^5 y^{(5)}(x_i) + O(h^5).$$

Milne-Simpson预测校正公式

$$\begin{aligned} y_{i+1}^{(p)} &= y_{i-3} + \frac{4h}{3}[2f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 2f(x_{i-2}, y_{i-2})], \\ y_{i+1} &= y_{i-1} + \frac{h}{3}[f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(p)}) + 4f(x_i, y_i) + f(x_{i-1}, y_{i-1})]. \end{aligned}$$

多步法的收敛性

考虑求解初值问题(1)的线性k步方法

$$y_{i+1} = \sum_{j=0}^{k-1} a_j y_{i-j} + h \sum_{j=-1}^{k-1} b_j f(x_{i-j}, y_{i-j}), \tag{37}$$

记

$$\begin{aligned}
\rho(\lambda) &= \lambda^k - \sum_{j=0}^{k-1} a_j \lambda^{k-1-j}, \\
\sigma(\lambda) &= \sum_{j=-1}^{k-1} b_j \lambda^{k-1-j}
\end{aligned}$$

称$\rho(\lambda), \sigma(\lambda)$为式(37)的第一、第二特征多项式。

定义7.10

如果线性k步公式(37)的第一特征多项式$\rho(\lambda)$的零点的模均不超过*1*，并且模为*1*的零点为单零点，则称k步公式(37)满足根条件。

- Adams显、隐式公式：$\rho(\lambda) = \lambda - 1$
- Simpson公式：$\rho(\lambda) = \lambda^2 - 1$
- Hamming公式：$\rho(\lambda) = \lambda^3 - \frac{9}{8}\lambda^2 + \frac{1}{8}$

多步法的收敛性

线性多步法求解的计算公式：

$$
\begin{aligned}
y_{i+1} &= \sum_{j=0}^{k-1} a_j y_{i-j} + h \sum_{j=-1}^{k-1} b_j f(x_{i-j}, y_{i-j}), (i = k-1, \cdots, n-1), \\
y_\mu &= \eta_\mu(h), (\mu = 0, 1, \cdots, k-1).
\end{aligned}
\tag{38}
$$

定义7.11

设$\{y_i\}_{i=0}^{n}$为式(38)的解$y(x)$在节点处的值。
记$E(h) = \max\limits_{0 \le x \le n} |y(x_i) - y_i|$，设

$$
\lim_{h \to 0} \eta_\mu(h) = \eta \ (\mu = 0, 1, \cdots, k-1)
$$

如果$\lim\limits_{h \to 0} E(h) = 0$，则称式(38)是收敛的。

定义7.12

线性k步方法(37)是$p(p \ge 1)$阶相容的，则其收敛的充分必要条件是根条件满足。

线性多步法的稳定性

定理7.4

对于初值问题(1)，设$\{y_i\}_{i=0}^{n}$是(38)的解，$\{z_i\}_{i=0}^{n}$是如下扰动问题的解：

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= \sum_{j=0}^{k-1} a_j y_{i-j} + h \sum_{j=-1}^{k-1} b_j f(x_{i-j}, y_{i-j}) + \delta_{i+1}, (i = k-1, \cdots, n-1 \\ y_\mu &= \eta_\mu(h) + \delta_\mu, (\mu = 0, 1, \cdots, k-1). \end{aligned} \quad (3$$

若存在正常数C, ε_0, h_0，使得对所有的$\varepsilon \in (0, \varepsilon_0], h \in (0, h_0]$，当$\max\limits_{0 \le i \le n} |\delta_i| \le \varepsilon$时有$\max\limits_{0 \le i \le n} |y_i - z_i| \le C\varepsilon$，则称式(37)是稳定的或称为零稳定的。

定理7.5

线性k步方法(37)稳定的充要条件是它满足根条件。

绝对稳定性和绝对稳定区域

对于无穷区间$[a,\infty)$上的问题，步长h不能太小，所以前面关于收敛性、稳定性的结论不一定有效。通常要求其解满足

$$\lim_{x\to\infty} y(x) = y^*,$$

考虑模型方程

$$\begin{cases} y' = \lambda y (a \le x < \infty), \\ y(a) = \eta \end{cases} \tag{40}$$

其中λ为负实数。易得方程的解为

$$y(x) = \eta e^{\lambda(x-a)},$$
$$\lim_{x\to\infty} y(x) = 0.$$

定义7.13

一个数值方法用于解模型方程(40)，对于给定的步长h得到近似解$\{y_i\}_{i=0}^{\infty}$。如果当$i \to \infty$时$y_i \to 0$，则称该数值方法对步长h的绝对稳定的；如果当$i \to \infty$时y_i无界，则称该数值方法不稳定。

例7.2

用*Euler*方法求解模型问题(40)，得

$$\begin{cases} y_{i+1} &= y_i + h\lambda y_i = (1+h\lambda)y_i, (i = 0, 1, \cdots), \\ y_0 &= \eta \end{cases}$$

递推得$y_i = \eta(1+h\lambda)^i \ (i = 0, 1, 2, \cdots)$，记$\mu = h\lambda$，则

$$y_i = \eta(1+\mu)^i \ (i = 0, 1, 2, \cdots)$$

$\lim\limits_{i \to \infty} y_i = 0$的充要条件为$|1+\mu| < 1$，即$\mu \in (-2, 0)$。

绝对稳定区间

定义7.14

一个数值方法用于解模型问题(40)，若$\mu = h\lambda$在实轴上某一个区域D中该方法是绝对稳定的，而在区域D外该方法是不稳定的，则称区域D为该方法的绝对稳定区域（或区间）

1. Euler公式、改进的Euler公式的绝对稳定区间为$(-2, 0)$;
2. 经典Runge-Kutta公式的绝对稳定区间为$(-2.78, 0)$;
3. 后退Euler公式、梯形公式和2级Runge-Kutta隐式公式的绝对稳定区间为$(-\infty, 0)$.

一阶微分方程组、高阶微分方程、刚性问题

1. 把单个方程中y, f和η理解成向量，即可以得到1阶方程组的情形；
2. 高阶微分方程可以化为1阶微分方程组；
3. 刚性问题（病态常微分方程组），采用隐式Runger-Kutta方法，Newton迭代求解非线性方程组

例7.3

$$\begin{aligned} y_1' &= -0.01y_1 - 99.99y_2, \\ y_2' &= -100y_2, \\ y_1(0) &= 2, y_2(0) = 1. \end{aligned}$$

其解为

$$\begin{aligned} y_1(x) &= e^{-100x} + e^{-x/100} \\ y_2(x) &= e^{-100x} \end{aligned}$$

边值问题

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

边界条件

1. 第一边界条件：$y(a) = \alpha, y(b) = \beta$;
2. 第二边界条件：$y'(a) = \alpha, y'(b) = \beta$;
3. 第三边界条件：$\alpha_0 y(a) + \alpha_1 y'(a) = \alpha, \beta_0 y(b) + \beta_1 y'(b) = \beta$

其中$\alpha, \beta, \alpha_0, \alpha_1, \beta_0, \beta_1$为已知常数，且

$$|\alpha_0| + |\alpha_1| \neq 0, |\beta_0| + |\beta_1| \neq 0.$$

试射法–打靶法

求解2阶常微分方程边值问题

$$\begin{cases} y'' = f(x,y,y'), \\ y(a) = \alpha, y(b) = \beta. \end{cases} \tag{41}$$

把边值问题作初值问题来求解，从满足左端条件$y(a)=\alpha$的解的曲线中寻找也满足右端条件$y(b)=\beta$的解。求解步骤：

1. 先按问题的性质或凭经验选取一斜率m_1，把边值问题(41)化为初值问题

   $$y'' - f(x,y,y'), y(a) = \alpha, y'(a) = m_1$$

   求得一数值解$y_1(x)$;若$y_1(b)=\beta$或$|y_1(b)-\beta|<\varepsilon$，则$y_1(x)$即为所求的数值解；否则，根据$y_1(b)=\beta_1$与$\beta$之差，适当修改$m_1$为$m_2$，例如$m_2=\frac{\beta}{\beta_1}m_1$.
2. 以m_2代替m_1,得到数值解$y_2(x)$，如果$|y_2(b)-\beta|<\varepsilon$，则$y_2(x)$为数值解；否则，由$m_1,m_2,\beta_1,\beta_2$用线性插值法求出$m_3=m_1+\frac{m_2-m_1}{\beta_2-\beta_1}(\beta-\beta_1)$;
3. 以m_3代替m_2,得到数值解$y_3(x)$,一直下去，直到满足右端条件为止。

差分法

把区间$[a,b]$离散，在各个节点上用差商代替导数，把微分方程边值问题转化为离散的差分方程。具体方法如下：将$[a,b]$作n等分，步长$h=(b-a)/n$。
记$x_i=a+ih(i=0,1,\cdots,n)$称$x_i(i=1,2,\cdots,n-1)$为内节点，称x_0,x_n为边界点。在内节点x_i处考虑微分方程，有

$$y''(x_i)=f(x_i,y(x_i),y'(x_i))\ (i=1,2,\cdots,n-1) \tag{42}$$

由数值微分得

$$\begin{aligned} y'(x_i) &= \frac{1[y(x_{i+1})-y(x_{i-1})]}{2h}-\frac{h^2}{6}y'''(\xi_i)\ \ (x_{i-1}<\xi_i<x_{i+1}) \\ y''(x_i) &= \frac{1}{h^2}[y(x_{i+1})-2y(x_i)+y(x_{i-1})]-\frac{h^2}{12}y^{(4)}(\eta_i)\ \eta_i\in(x_{i-1},x_{i+1} \end{aligned}$$

将以上两式代入(42)得

$$\begin{aligned} &\frac{1}{h^2}[y(x_{i+1})-2y(x_i)+y(x_{i-1})]-\frac{h^2}{12}y^{(4)}(\eta_i)er \qquad (43) \\ &=f\left(x_i,y(x_i),\frac{1}{2h}[y_(x_{i+1})-y(x_{i-1})]-\frac{h^2}{6}y'''(\xi_i)\right) \end{aligned}$$

略去$O(h^2)$项，并以y_i代替$y(x_i)$，得到如下差分方程：

$$\frac{1}{h^2}(y_{i+1}-2y_i+y_{i-1})=f\left(x_i,y_i,\frac{1}{2h}(y_{i+1}-y_{i-1})\right) \quad (44)$$

$$(i=1,2,\cdots,n-1)$$

$$y_0=\alpha, y_n=\beta \quad (45)$$