常微分方程数值解 (I)：单步法

Jiaxiang Li

2025 年 12 月 24 日

目录

1 基本理论：柯西问题

1.1 数学模型

考虑一阶常微分方程（ODE）初值问题（Cauchy Problem）：

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), \quad t \in [t_0, t_0 + T] \\ y(t_0) = y_0 \end{cases} \tag{1}$$

1.2 解的存在唯一性与适定性

- **Lipschitz 条件**: 若存在常数 $L > 0$，使得对任意 $t \in [t_0, t_0 + T]$，有：

  $$|f(t, y) - f(t, z)| \leq L|y - z|$$

  则称 f 关于 y 满足 Lipschitz 条件。

- **存在唯一性**: 若 f 连续且满足 Lipschitz 条件，则初值问题存在唯一解 $y(t) \in C^1$。

- **适定性 (Well-posedness)**: 如果解存在、唯一，且连续依赖于初始数据（即对初值扰动是 Lyapunov 稳定的，两个解之差 $\leq K\epsilon$ ），则称问题是适定的。

  适定性定理：如果函数$f(t, y)$满足Lipschitz条件，则初值问题对任何初始值 y_0 都是适定的。

2 基本单步法的构造

基于积分形式 $y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tau, y(\tau))d\tau$。

2.1 1. 向前欧拉法 (Forward Euler)

利用左矩形公式近似积分：

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_n, u_n) \tag{2}$$

类型: 显式格式。
精度: 1 阶 $(O(h))$。
特点: 计算简单，但条件稳定（步长受限）。

2.2 2. 向后欧拉法 (Backward Euler)

利用右矩形公式近似积分：

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_{n+1}, u_{n+1}) \tag{3}$$

类型: 隐式格式（需迭代求解非线性方程）。
精度: 1 阶 $(O(h))$。
特点: 无条件稳定 (A-stable)，适合刚性问题。

2.3 3. 梯形公式 / Crank-Nicolson

利用梯形公式近似积分：

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2}[f(t_n, u_n) + f(t_{n+1}, u_{n+1})] \tag{4}$$

类型: 隐式格式。
精度: 2 阶 ($O(h^2)$)。
特点: 无条件稳定，精度高于欧拉法。

2.4 4. 改进欧拉法 (Heun 方法)

预估-校正 (Predictor-Corrector) 策略：先用向前欧拉预估，再用梯形公式校正。

$$\begin{cases} \tilde{u}_{n+1} = u_n + hf(t_n, u_n) & \text{(预估)} \\ u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2}[f(t_n, u_n) + f(t_{n+1}, \tilde{u}_{n+1})] & \text{(校正)} \end{cases} \tag{5}$$

类型: 显式格式。
精度: 2 阶。

3 Runge-Kutta (RK) 方法

3.1 构造思想

在区间 $[t_n, t_{n+1}]$ 内多取几个点，用这些点上斜率的加权平均来逼近平均曲率，以提高精度。通用显式 s-级 RK 方法：

$$\begin{cases} K_1 = f(t_n, u_n) \\ K_i = f(t_n + c_i h, u_n + h\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j), \quad i = 2, \ldots, s \\ u_{n+1} = u_n + h\sum_{i=1}^{s} b_i K_i \end{cases} \tag{6}$$

需满足条件：$\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} = c_i$ 和 $\sum_{i=1}^{s} b_i = 1$。

3.2 经典 RK 格式

3.2.1 1. 二级二阶 RK (RK2)

包括 Heun 方法和中点公式。通式满足 $b_1 + b_2 = 1, b_2 c_2 = 1/2$。

3.2.2 2. 经典四级四阶 RK (RK4)

最常用的高阶单步法：

$$\begin{cases} K_1 = f(t_n, u_n) \\ K_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{h}{2}K_1) \\ K_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{h}{2}K_2) \\ K_4 = f(t_n + h, u_n + hK_3) \\ u_{n+1} = u_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \end{cases} \tag{7}$$

精度: 4 阶 ($O(h^4)$)。
级数与阶数: 对于 $s \leq 4$，级数 s 等于最高阶数 p。当 $s \geq 5$ 时， $s > p$ (例如 $s = 5$ 时只能达到 4 阶)。

3.2.3 Butcher Array

	$t_n + c_i h$	预报: $\tilde{u}_i = u_n + h\sum_{j=1}^{i-1}(a_{ij}h)K_j$						关系
K_1	c_1	a_{11}						$c_1 = a_{11} = 0$
K_2	c_2	a_{21}	0					$a_{21} = c_2$
K_3	c_3	a_{31}	a_{32}	0				$\sum_{j=1}^{2} a_{3j} = c_3$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$			$\vdots$
K_i	c_i	a_{i1}	a_{i2}	$\cdots$	$a_{i,i-1}$	0		$\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} = c_i$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\ddots$		$\vdots$
K_s	c_s	a_{s1}	a_{s2}	$\cdots$	$\cdots$	$a_{s,s-1}$	0	$\sum_{j=1}^{s-1} a_{sj} = c_s$
$\sum_{j=1}^{s}(b_j h)K_j$		b_1	b_2	$\cdots$	$\cdots$	b_{s-1}	b_s	$\sum_{j=1}^{s} b_s = 1$

$$u_{n+1} = u_n + h\sum_{i=1}^{s} b_i K_i$$

$$K_i = f(t_n + c_i h, u_n + h\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}K_j)$$

4 单步法的数值分析

将单步法统一写为：$u_{n+1} = u_n + h\Phi(t_n, u_n, f, h)$，其中 Φ 为增量函数。

4.1 1. 局部截断误差与相容性

- **局部截断误差** (τ_{n+1}): 假设 $u_n = y(t_n)$ (上一步是精确的)，这一步产生的误差。

$$\tau_{n+1}(h) = y(t_{n+1}) - [y(t_n) + h\Phi(t_n, y(t_n), f, h)]$$

- **相容性 (Consistency)**:

$$\lim_{h \to 0} \frac{\tau_{n+1}(h)}{h} = 0 \iff \lim_{h \to 0} \Phi = f$$

- **精度阶**: 若 $\tau_{n+1}(h) = O(h^{p+1})$，则称格式具有 p 阶精度。

4.2 2. 零稳定性 (Zero-Stability)

定义: 考察当 $h \to 0$ 时，格式对初值扰动的敏感性。

- 只要增量函数 Φ 关于 u 满足 Lipschitz 条件，单步法就是零稳定的。
- 常见的单步法（欧拉、RK）都是零稳定的。

4.3 3. 收敛性 (Convergence)

整体截断误差: $e_n = y(t_n) - u_n$。

> **Lax 等价定理**: 对于单步法，
> **相容性** + **零稳定性** $\iff$ **收敛性**

误差估计: 若局部误差为 $O(h^{p+1})$，则整体误差为 $O(h^p)$。

5 绝对稳定性 (Absolute Stability)

背景: 实际计算中 h 是固定的，且不能无限小。对于刚性问题，需要考察误差是否会随步数增长。

5.1 模型方程与稳定域

考虑试验方程：$y' = \lambda y, \mathrm{Re}(\lambda) < 0$。代入数值格式得到：

$$u_{n+1} = E(h\lambda)u_n \tag{8}$$

其中 $E(z)$ 称为**稳定函数** $(z = h\lambda)$。

- **绝对稳定条件**: $|E(h\lambda)| < 1$（**注意**是 $<$ ，而不是 $\leq$ ）。
- **绝对稳定域**: 复平面上满足 $|E(z)| < 1$ 的区域 $\mathcal{A}$。
- **绝对稳定区间**: 稳定域与负实轴的交集。

5.2 常见格式的稳定性

格式	稳定函数 $E(z)$	绝对稳定区间
向前欧拉	$1+z$	$(-2,0)$ (条件稳定)
向后欧拉	$\frac{1}{1-z}$	$(-\infty,0)\cup(2,+\infty)$ (A-稳定)
Crank-Nicolson	$\frac{1+z/2}{1-z/2}$	$(-\infty,0)$ (A-稳定)
RK2	$1+z+\frac{z^2}{2}$	$(-2,0)$
RK4	$1+z+\frac{z^2}{2}+\frac{z^3}{6}+\frac{z^4}{24}$	$\approx(-2.78,0)$

注意： 显式 RK 方法的稳定域总是有限的，不适合刚性问题。