

# Chapter 3

## 微积分问题的逼近方法

### 3.1 数值求积

#### 3.1.1 积分问题

积分的应用十分广泛，在各个领域都有一些应用，主要在以下几个方面：积分变换，如拉普拉斯变换，傅里叶变换、偏微分方程的有限元法和边界元法、积分方程和变分法、概率统计，其中总的许多基本概念，如概率分布、期望等由积分定义。

此外，在古典和量子物理中的系统能量定义。

定义3.1.1 (积分). 对区间 $[a, b]$ 上的函数 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , 现代积分定义

$$\mathbf{I}(f) = \int_a^b f(x) dx$$

是以形如下式的黎曼和为基础的

$$R_n = \sum_{i=1}^n (x_{i+1} - x_i) f(\xi_i),$$

其中 $a = x_1 < x_2 < \cdots < x_n < x_{n+1} = b$ ,  $\xi \in [x_i, x_{i+1}]$ .  
记 $h_n = \max_{i=1, \dots, n-1} \{x_{i+1} - x_i\}$ , 若

$$\lim_{h_n \rightarrow 0} R_n = R \neq \infty,$$

则称 $f$ 在区间上黎曼可积。

积分（模型/方法）的正则性（存在/唯一/条件数）是一个很重要的理论问题。  
存在性:  $f$  有界、连续  $\rightarrow$  Riemann可积。唯一性: 极限存在性与剖分无关、与 $\xi_i$ 取法无关。  
问题的刚性: 数据扰动/误差传播分析。我们通过如下两种途径来分析误差的扰动:

杆的分散载荷问题, 图 8.1 中, 若  $\rho(x)$  为载荷密度关于横坐标  $x$  的函数, 则杆受到的总载荷  $W$  为曲线  $\rho(x)$  所围区域的面积, 由积分

$$W = \int_0^L \rho(x) dx$$

给出. 而且, 等价的集中载荷的作用点为曲线所围区域的重心, 其横坐标  $\bar{x}$  由积分

$$\bar{x} = \frac{1}{W} \int_0^L x \rho(x) dx$$

给出.

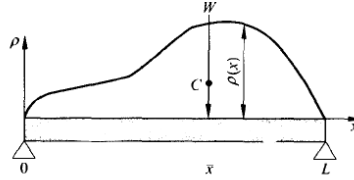


图 8.1 木杆上的分散载荷与集中载荷等价

很久以前就有人提出了近似计算不规则区域面积的方法, 其中包括阿基米德 (Archimedes), 他的方法是将区域用小正方形铺贴, 然后计算区域内小方块的个数.

### 被积函数的扰动

$$\Gamma\Gamma\Gamma\Gamma |I(\hat{f}) - I(f)| \leq \int_a^b |\hat{f}(x) - f(x)| dx \leq (b-a) \|\hat{f} - f\|_\infty \Gamma\Gamma\Gamma\Gamma$$

### 积分区间的扰动

$$\Gamma\Gamma\Gamma\Gamma \left| \int_a^{\hat{b}} f(x) dx - \int_a^b f(x) dx \right| \leq \int_b^{\hat{b}} f(x) dx \Gamma\Gamma\Gamma\Gamma \leq (\hat{b} - b) \|f\|_\infty \Gamma\Gamma\Gamma\Gamma$$

### 3.1.2 数值积分公式

定积分的数值求解称为数值求积。定积分：

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx,$$

数值求积的基本想法是，

定义 3.1.2 (数值积分).

寻找一个  $I(f)$  的近似:

$$Q_n(f) = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i),$$

其中  $a < x_1 < \cdots < x_n < b$ , 称为节点,  $\omega$  称为权。数值求积的目标则是选择节点和权, 利用合理的计算成本来求得达到满足要求的精度的近似  $Q_n(f)$ 。

MATLAB: `help quad` 提供了一些很好的

```
Q = quad(FUN,A,B,TOL) uses an absolute error tolerance of TOL
instead of the default, which is 1.e-6. Larger values of TOL
result in fewer function evaluations and faster computation,
but less accurate results. The quad function in MATLAB 5.3 used
a less reliable algorithm and a default tolerance of 1.e-3.

Example:
Q = quad(@myfun,0,2);
where the file myfun.m defines the function:
%-----%
function y = myfun(x)
y = 1./(x.^3-2*x-5);
%-----%

or, use a parameter for the constant:
Q = quad(@(x)myfun2(x,5),0,2);
where the file myfun2.m defines the function:
%-----%
function y = myfun2(x,c)
y = 1./(x.^3-2*x-c);
%-----%

See also integral, integral2, integral3, quadgk, quad2d, trapz,
```

### 3.1.3 插值型公式(Newton-Cotes系列)

求积公式的节点选择  $[a,b]$  上等距的节点, 即:

$$x_i = a + i(b-a)/(n+1), i = 1, 2, \dots, n.$$

#### 梯形(Trapzoid)公式

取两个节点, 取权值为两点函数值的平均值, 则可以得到:

$$Q_n(f) = (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

误差:

$$E_2 = \left| \int_a^b f(x) dx - Q_n(f) \right| = \int_a^b \frac{(b-1)^2}{8} f''(\xi) dx = \frac{(b-a)^3}{8} \|f''\|_\infty$$

求积公式可以由多项式插值得到. 事实上, 利用被积函数  $f$  在点  $x_i (i=1, \dots, n)$  上的值, 可以确定被积函数在这  $n$  个点上的  $n-1$  次插值多项式 (见第 7 章), 然后用插值多项式的积分作为原始函数积分的近似. 事实上, 具体计算积分时, 并不需要直接得到插值多项式. 相反, 可以用插值多项式确定求积公式的节点和权, 由节点和权可以计算积分区间上任何函数积分的近似值. 特别地, 若使用拉格朗日插值, 则对给定点集  $x_i (i=1, \dots, n)$ , 可用其相应的拉格朗日基函数的积分确定权,

$$w_i = \int_a^b l_i(x) dx, \quad i = 1, \dots, n.$$

可以看出, 对任何被积函数这些权都是相同的. 因此, 这种求积公式称为插值型的.

复化梯形公式( $n+1$ 个节点):

$$T_n = h \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} = \frac{b-a}{n} \left[ \frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \cdots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2}f(x_n) \right]$$

此时的误差为:  $E_{rr}^T = -\frac{(b-a)\|f''\|_{\infty}}{12}h^2$

### 待定系数法

得到插值型求积公式的另一种方法是待定系数法,它是通过使积分公式对前  $n$  个多项式基函数精确成立,产生一个  $n$  元方程组,从而得到权.例如,若使用单项式基底,得到的是力矩方程组

$$\begin{aligned} w_1 \cdot 1 + w_2 \cdot 2 + \cdots + w_n \cdot 1 &= \int_a^b 1 dx = b-a, \\ w_1 \cdot x_1 + w_2 \cdot x_2 + \cdots + w_n \cdot x_n &= \int_a^b x dx = (b^2 - a^2)/2, \\ &\vdots \\ w_1 \cdot x_1^{n-1} + w_2 \cdot x_2^{n-1} + \cdots + w_n \cdot x_n^{n-1} &= \int_a^b x^{n-1} dx = (b^n - a^n)/n, \end{aligned}$$

例: 在区间  $[a, b]$  上构造三节点积分公式:

$$Q_3(f) = w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2) + w_3 f(x_3),$$

取三个节点分别为积分区间的两个端点及中点,即  $x_1 = a, x_2 = (a+b)/2, x_3 = b$ . 写成矩阵形式,力矩方程为范德蒙方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ a & (a+b)/2 & b \\ a^2 & ((a+b)/2)^2 & b^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b-a \\ (b^2 - a^2)/2 \\ (b^3 - a^3)/3 \end{bmatrix}.$$

用高斯消去法求解,得到权

$$w_1 = (b-a)/6, \quad w_2 = 2(b-a)/3, \quad w_3 = (b-a)/6.$$

### 辛普生(Simpson)公式

$$S(f) = \frac{b-a}{6} \left[ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]$$

误差:

$$E_3 = \left| \int_a^b f(x) dx - S(f) \right| = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta), a < \eta < b$$

复化Simpson公式( $n+1$ 个节点):

$$S_n = \frac{h}{6} \sum_{i=0}^{n-1} \left[ f(x_i) + 4f(x_{i+\frac{1}{2}}) + f(x_{i+1}) \right].$$

此时的误差为:  $E_{rr}^S = -\frac{(b-a)\|f^{(4)}\|_{\infty}}{2880}h^4$ .

**例 8.2 牛顿-柯特斯求积** 为说明牛顿-柯特斯求积公式的应用,用上面三种求积公式近似计算积分

$$I(f) = \int_0^1 e^{-x^2} dx.$$

$$M(f) = (1-0)\exp(-0.25) \approx 0.778801,$$

$$T(f) = \frac{1}{2}(\exp(0) + \exp(-1)) \approx 0.683940,$$

$$T(f) = \frac{1}{6}(\exp(0) + 4\exp(-0.25) + \exp(-1)) \approx 0.747180.$$

图 8.2 画出了被积函数及每个公式中的插值多项式. 这个问题的精确值为 0.746824. 令人惊讶的是梯形公式误差的绝对值(0.062884)大约是 midpoint 公式(0.031977)

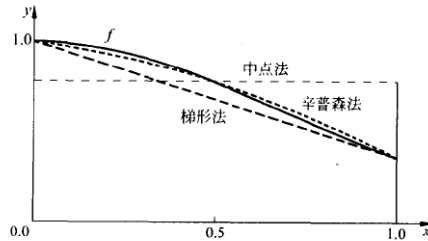


图 8.2 用牛顿-柯特斯求积公式计算  $f(x) = e^{-x^2}$  的积分

的两倍,而辛普森公式的误差仅为 0.000356,若再考虑积分区间的长度,可以看到辛普森公式已相当精确. ■

### 3.1.4 提高积分精度的方法

复化同理于分段插值

自适应方法- 区间分半递归

Richardson外推- Romberg积分法 (基于Newton-Cotes系列的外推)

其他典型积分相关问题. 基于表格化数据求积分- 先插值, 再积分. 奇异积分- 取极限、变量代换. 二/三重积分- 张量积、单纯型 高维积分- Monte Carlo方法. 积分方程- 通常是ill-conditioned.

### 3.1.5 最佳求积

固定节点的数值积分公式精度有限, 并没有充分利用已有的“信息”。

#### Clenshaw-Curtis求积

一些研究发现: 用Chebyshev多项式零点作为积分节点的时候可以证明: 积分权重总是正数! 其次, 有效的自包含求法: 不用事先求得权重. 可以利用FFT和递推算法, 代数精度不是最优阶!

#### 高斯求积

基本思想: 选择最佳的节点和权值, 使其代数精度最大化。

以构造 $[-1, 1]$ 上的两点公式 $G_2(f)$ 为例:

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx \omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2) := G_2(f),$$

令其对前四阶单项式精确成立：

$$\Gamma\Gamma\Gamma\Gamma \begin{cases} \Gamma\Gamma\Gamma\Gamma\omega_1 + \omega_2 = \int_{-1}^1 1dx = 2, \\ \Gamma\Gamma\Gamma\Gamma\omega_1x_1 + \omega_2x_2 = \int_{-1}^1 xdx = 0, \\ \Gamma\Gamma\Gamma\Gamma\omega_1x_1^2 + \omega_2x_2^2 = \int_{-1}^1 x^2dx = \frac{2}{3}, \\ \Gamma\Gamma\Gamma\Gamma\omega_1x_1^3 + \omega_2x_2^3 = \int_{-1}^1 x^3dx = \frac{2}{3}, \\ \Gamma\Gamma\Gamma\Gamma \end{cases} \quad \Gamma\Gamma\Gamma\Gamma$$

可解得

$$x_1 = -1/\sqrt{3}, x_2 = 1/\sqrt{3}, \omega_1 = 1, \omega_2 = 1$$

即得到了三阶两点高斯求积公式为：

$$G_2(f) = f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3}).$$

使用高斯求积公式也需要注意如下几点：如何通过Legendre多项式等典型的正交多项式零点计算；只在标准区间上给出，实际使用需放射变换；Gauss-Kronrod递推型高斯求积。

### 3.1.6 突破维数诅咒： Monte Carlo求积方法

## 3.2 两点边值问题 — 有限差分法

### 3.2.1 数值求导

求 $f'(x)$ 数值格式

微分是一个很敏感的问题，一些小扰动可能会产生很大的误差，在进行数值求导的过程中也需要考虑其稳定性。请用Taylor公式验证上述格式的精度分别为 $o(h)$ 以及 $o(h^2)$ 。

1. 向前（向后）一阶差商

$$f'(x) \approx D_h^+ := \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

2. 中心一阶差商

$$f'(x) \approx D_{2h} := \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

3. 单边差商

$$f'(x) \approx D_{2h}^+ := \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h}$$

求 $f''(x)$ 数值格式

中心二阶差商

$$f''(x) = (f(x+h) - 2f(x) + f(x-h))/h^2$$

假设  $D_h^2 f(x) = Af(x+h) + Bf(x) + Cf(x-h)$ , 则由 Taylor 展开:

$$\begin{cases} A + B + C = 0; \\ h(A - C) = 0; \\ \frac{h^2}{2}(A + C) = 1. \end{cases}$$

此时的误差为  $-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(x)$  (How to prove?)

### 3.2.2 边值问题

的两点边值问题形如

$$y' = f(t, y), \quad a < t < b,$$

满足边界条件

$$g(y(a), y(b)) = 0,$$

其中  $f: \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}^n$ ,  $g: \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}^n$ . 如果  $g$  的任意分量只涉及解在  $a$  或  $b$  处的值, 并不同时涉及两者, 称边界条件为独立的. 如果边界条件形如

$$B_a y(a) + B_b y(b) = c,$$

其中  $B_a, B_b \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $c \in \mathbb{R}^n$ , 称边界条件为线性的. 如果边界条件既独立又线性, 则对每个  $i, 1 \leq i \leq n$ , 或者  $B_a$  的第  $i$  行或者  $B_b$  的第  $i$  行将仅有零元素. 如果常微分方程及边界条件都为线性, 则称边值问题为线性的.

#### 例 10.2 独立线性边界条件 二阶一维常微分方程的两点边值问题

$$u'' = f(t, u, u'), \quad a < t < b,$$

满足边界条件

$$u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta,$$

等价于下面的一阶常微分方程组

$$\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_2 \\ f(t, y_1, y_2) \end{bmatrix}, \quad a < t < b,$$

满足独立线性边界条件

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1(a) \\ y_2(a) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1(b) \\ y_2(b) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}.$$

例 3.2.1 (例).

上题中  $\beta$  不能随意给, 很容易造成存在性不成立! 存在性和唯一性比 IVP 困难得多! 举一例说明:

稳定性

例 3.2.2 (例).

### 3.2.3 边值问题常用数值方法

打靶法、有限差分法、配点法、Galerkin 方法

**例 10.3 存在性、惟一性** 考虑两点边值问题

$$u'' = -u, \quad 0 < t < b,$$

满足边界条件

$$u(0) = 0, \quad u(b) = \beta.$$

对这个常微分方程, 满足  $u(0) = 0$  的通解为  $u(t) = c \sin t$ ,  $c$  为任意常数. 如果  $b$  是  $\pi$  的整数倍, 则对任意  $c$ ,  $c \sin b = 0$ , 所以当  $\beta = 0$  时, 这个边值问题有无穷多个解, 而若  $\beta \neq 0$ , 则无解. ■

接下来考虑扰动问题

$$\hat{y}' = A(t)\hat{y} + \hat{b}(t), \quad a < t < b,$$

满足边界条件

$$B_a \hat{y}(a) + B_b \hat{y}(b) = \hat{c}.$$

则解的扰动  $z(t) = \hat{y}(t) - y(t)$ , 满足边值问题

$$z' = A(t)z + \Delta b(t), \quad a < t < b,$$

边界条件为

$$B_a y(a) + B_b y(b) = \Delta c,$$

其中  $\Delta b(t) = \hat{b}(t) - b(t)$ ,  $\Delta c = \hat{c} - c$ . 由此可以得到解的扰动估计式

$$\|z\|_{\infty} \leq \kappa \left( |\Delta c| + \int_a^b |\Delta b(s)| ds \right).$$

这样,  $\kappa$  是边值问题的关于常微分方程中非齐次项及边界条件扰动的绝对条件数.

**例 10.5 稳定边值问题** 考虑常微分方程的初值问题

$$\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & -\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}, \quad y(0) = y_0.$$

其中  $\operatorname{Re} \lambda \neq 0$ , 它的两种模式中的一个按指数增长, 所以是不稳定的. 但如果  $\operatorname{Re} \lambda < 0$ , 并且给出在区间  $[0, b]$  上的边界条件

$$y_1(0) = 1, \quad y_2(b) = 1,$$

则即使  $b$  非常大, 边值问题也是稳定的, 因为解的增长将受到约束条件的限制. ■



## 1. 打靶法

打靶法是将给定的边值问题用一系列的初值问题代替.  
一阶两点边值问题

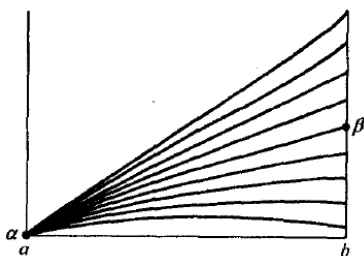
$$y' = f(t, y), \quad a < t < b,$$

满足约束条件

$$g(y(a), y(b)) = 0,$$

这等价于非线性代数方程组

$$h(x) \equiv g(x, y(b; x)) = 0,$$



## 2. 有限差分法

## 3. 配点 (Collocation) 法

对于边界条件  $u(a) = \alpha, u(b) = \beta$  下的一维两点边值问题

$$u'' = f(t, u, u'), \quad a < t < b,$$

我们要寻找形如

$$u(t) \approx v(t, x) = \sum_{i=1}^n x_i \phi_i(t)$$

的近似解, 其中  $\phi_i(t)$  是定义在  $[a, b]$  上的基函数,  $x$  是待定的  $n$  维参数向量.

由边界条件, 又得到两个附加的方程

$$v(t_1, x) = \alpha, \quad v(t_n, x) = \beta.$$

这样产生了含有  $n$  个未知数的  $n$  个方程. 这个方程组线性与否依赖于  $f$  关于  $u$  线性, 求解这个方程组, 确定出向量参数  $x$ , 就得到了近似解函数  $v$ .

## 4. Galerkin 方法

## 3.3 初值问题 - Runge Kutta

$n$  阶常微分方程

$$y^{(n)} = f(t, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)})$$

**例 10.6 打靶法** 我们用一维二阶常微分方程

$$u'' = 6t, \quad 0 < t < 1,$$

说明两点边值问题的打靶法, 边界条件为  $u(0) = 0, u(1) = 1$ .

对每个  $u'(0)$  的假定值, 用经典的四阶龙格-库塔方法对常微分方程积分以确定数值解在  $t=1$  处与给定值的差距. 但首先, 将二阶常微分方程转化为一阶常微分方程组

$$\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_2 \\ 6t \end{bmatrix},$$

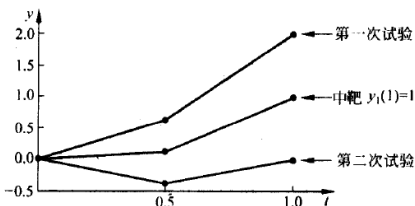


图 10.2 例 10.6 的两点边值问题的打靶法

打靶法思路简单, 并且使用现有的初值问题及非线性方程的软件容易实现, 但它也有严重的缺陷. 最重要的一点是打靶法将继承相关初值问题的稳定(或不稳定)性

的一维两点边值问题

$$u'' = f(t, u, u'), \quad a < t < b,$$

引入分割点  $t_i = a + ih, i = 0, 1, \dots, n+1$ , 其中  $h = (b-a)/(n+1)$ , 希望求得的是解的近似值  $y_i \approx u(t_i), i = 0, 1, \dots, n$ . 我们已经知道的是  $y_0 = u(a) = \alpha$  及  $y_{n+1} = u(b) = \beta$ . 接下来将常微分方程中的导数用有限差分近似代替(见 8.6.1 节), 如

$$u'(t_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \quad \text{及} \quad u''(t_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2},$$

由两点边值问题的有限差分法得到的代数方程组线性与否依赖于  $f$  关于  $u$  和  $u'$  是否线性. 如果方程组是非线性的, 则求解时需要使用牛顿法之类的迭代法, 这时需要在  $(a, \alpha), (b, \beta)$  之间的直线上选择一个合理的值作为迭代的初始值. 在以上给出的例子中, 每个方程都只含有三个相邻的未知数, 说明线性方程组的系数矩阵或非线性方程组的雅可比矩阵是三对角的, 因而, 与一般的方程组相比既可以节省存储量, 又可以节省工作量. 这种节约是有限差分法的特点; 由于每个方程只与分割点附近的几个变量有关, 所以这种方法产生的是一个稀疏矩阵.

**例 10.7 有限差分方法** 用例 10.6 的两点边值问题

$$u'' = 6t, \quad 0 < t < 1,$$

满足边界条件

$$u(0) = 0, \quad u(1) = 1,$$

来说明有限差分法.

为使计算量达到最小, 我们只计算一个内部分割点, 即区间  $[0, 1]$  的中点上的近似解. 加上边界点, 现在共有三个点  $t_0 = 0, t_1 = 0.5$  及  $t_2 = 1$ . 利用边界条件知  $y_0 = u(t_0) = 0, y_2 = u(t_2) = 1$ , 我们要求的是解的近似值  $y_1 = u(t_1)$ . 在点  $t_1$  处用有限差分代替导数, 得到方程

$$\frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{h^2} = f\left(t_1, y_1, \frac{y_2 - y_0}{2h}\right),$$

代入边界数据、分割长度及右端函数的具体表达式, 得

$$\frac{1 - 2y_1 + 0}{(0.5)^2} = 6t_1,$$

或

$$4 - 8y_1 = 6 \times 0.5 = 3,$$

所以  $u(0.5) \approx y_1 = \frac{1}{8} = 0.125$ , 这个结果与例 10.6 中用打靶法得到的结果是一致的. ■

为了确定参数向量  $\mathbf{x}$ , 我们定义  $n$  个点  $a < t_1 < \cdots < t_n = b$ , 称为配置点. 基函数后, 在每个内部配置点上将近似解及其导数代入常微分方程, 则得到程组

$$v''(t_i, \mathbf{x}) = f(t_i, v(t_i, \mathbf{x}), v'(t_i, \mathbf{x})), \quad i = 2, \dots, n-1,$$

**例 10.8 配置法** 用例 10.6 和例 10.7 的两点边值问题

$$u'' = 6t, \quad 0 < t < 1$$

满足边值条件  $u(0) = 0, u(1) = 1$  来说明配置法.

为减少计算量, 只取一个内部配置点, 即区间  $[a, b]$  的中点, 加上边界点, 共有三个配置点  $t_1 = 0, t_2 = 0.5, t_3 = 1$ , 所以要确定 3 个参数. 用前三个单项式作为基函数, 近似解的形式为

$$v(t, \mathbf{x}) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2.$$

结果与前面用打靶法(例 10.6)和有限差分法(例 10.7)得到的结果是一致的. 通常, 这三种方法得到的结果不一定完全相同, 但由于这个特殊问题的性质, 它们的结果是一致的. 容易看出这个问题的真解为  $u(t) = t^3$ , 所以值  $u(0.5) = (0.5)^3 = 0.125$  实际上是精确的. 注意到由配置法得到的二次多项式在  $t_1 = 0, t_2 = 0.5, t_3 = 1$  三个点与真解取值相同, 但在其他点上却不相同(为什么?), 图 10.3 画出了近似解和真解的图象.

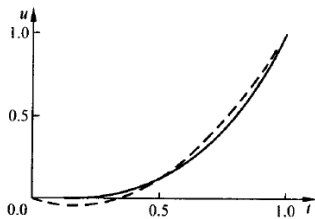


图 10.3 例 10.8 的真解(实线)和配置解(虚线)

我们要寻找的仍是基函数的线性组合形式的近似解

$$u(t) \approx v(t, \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n x_i \phi_i(t).$$

将近似解代入微分方程, 并定义残量

$$r(t, \mathbf{x}) = v''(t, \mathbf{x}) - f(t) = \sum_{i=1}^n x_i \phi_i''(t) - f(t).$$

用最小二乘法, 令函数

$$F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \int_a^b r(t, \mathbf{x})^2 dt$$

的梯度向量的每个分量都为零, 从而使  $F(\mathbf{x})$  极小化, 即对  $i = 1, \dots, n$ , 取

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial F}{\partial x_i} = \int_a^b r(t, \mathbf{x}) \frac{\partial r}{\partial x_i} dt = \int_a^b r(t, \mathbf{x}) \phi_i''(t) dt \\ &= \sum_{j=1}^n \left( \int_a^b \phi_j''(t) \phi_i''(t) dt \right) x_j - \int_a^b f(t) \phi_i''(t) dt, \end{aligned}$$

此式可看成为一个对称的线性代数方程组  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ , 其中

$$a_{ij} = \int_a^b \phi_j''(t) \phi_i''(t) dt, b_i = \int_a^b f(t) \phi_i''(t) dt,$$

方程组的解就是参数向量  $\mathbf{x}$ ,  $A$  和  $\mathbf{b}$  中的积分可以用解析或数值积分的方法

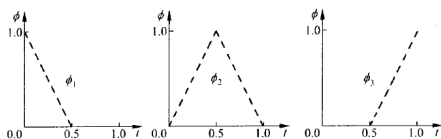
**例 10.9 伽辽金方法** 用例 10.6、例 10.7 和例 10.8 中的满足边界条件

$$y(0)=0, \quad y(1)=1$$

的两点边值问题

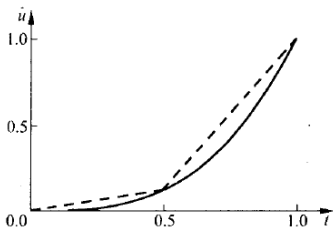
$$y''=6t, \quad 0 < t < 1,$$

来说明伽辽金方法.



$$u(t) \approx v(t, \mathbf{x}) = 0.125\phi_2(t) + \phi_3(t),$$

画出了近似解及精确解的图形. 注意到  $v(0.5, \mathbf{x}) = 0.125$ , 说明对这个近似解是精确的.



可以化成一阶方程组:

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}).$$

其分量形式为:

$$\mathbf{y}' := \begin{bmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \\ \vdots \\ y_n'(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(t, \mathbf{y}) \\ f_2(t, \mathbf{y}) \\ \vdots \\ f_n(t, \mathbf{y}) \end{bmatrix} := \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$$

定解条件:  $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$

**例 3.3.1.**  $F = ma$  在给定初始位置  $s(0)$  和初始速度  $s'(0)$  后位移  $s(t)$  可解.

**定理 3.3.1** (初值问题解的存在唯一性). 当  $\mathbf{f}: \mathbf{R}^{n+1} \rightarrow \mathbf{R}^n$  是区域  $D$  上是 *Lipschitz* 连续, 即

$$\|\mathbf{f}(t, \hat{\mathbf{y}}) - \mathbf{f}(t, \mathbf{y})\| \leq L \|\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y}\|$$

时, 对给定区域  $D$  内任意初始点, 初值问题存在唯一解.

稳定性

### 3.3.1 数值方法一览

Euler法、Taylor级数法、Runge-Kutta法、线性多步法

#### 1. 欧拉(Euler)法

考虑一维一阶常微分初值问题:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), x \in [a, b]$$

**例 10.2 独立线性边界条件** 二阶一维常微分方程的两点边值问题

$$u'' = f(t, u, u'), \quad a < t < b,$$

满足边界条件

$$u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta,$$

等价于下面的一阶常微分方程组

$$\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_2 \\ f(t, y_1, y_2) \end{bmatrix}, \quad a < t < b,$$

满足独立线性边界条件

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1(a) \\ y_2(a) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1(b) \\ y_2(b) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}.$$

**例 10.3 存在性、惟一性** 考虑两点边值问题

$$u'' = -u, \quad 0 < t < b,$$

满足边界条件

$$u(0) = 0, \quad u(b) = \beta.$$

对这个常微分方程, 满足  $u(0) = 0$  的通解为  $u(t) = c \sin t$ ,  $c$  为任意常数. 如果  $b$  是  $\pi$  的整数倍, 则对任意  $c$ ,  $c \sin b = 0$ , 所以当  $\beta = 0$  时, 这个边值问题有无穷多个解, 而若  $\beta \neq 0$ , 则无解. ■

**例 10.5 稳定边值问题** 考虑常微分方程的初值问题

$$\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & -\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}, \quad y(0) = y_0.$$

其中  $\operatorname{Re} \lambda \neq 0$ , 它的两种模式中的一个按指数增长, 所以是不稳定的. 但如果  $\operatorname{Re} \lambda < 0$ , 并且给出在区间  $[0, b]$  上的边界条件

$$y_1(0) = 1, \quad y_2(b) = 1,$$

则即使  $b$  非常大, 边值问题也是稳定的, 因为解的增长将受到约束条件的限制. ■

对初值问题来说, 问题的数据为初值  $y_0$  及函数  $f$ . 设  $\hat{y}(t)$  为初值问题  $\hat{y}' = f(t, \hat{y})$  的解, 带有扰动的初始条件为  $\hat{y}(t_0) = \hat{y}_0$ . 可以证明, 对任意  $t \geq t_0$ , 有

$$\|\hat{y}(t) - y(t)\| \leq e^{L(t-t_0)} \|\hat{y}_0 - y_0\|.$$

如果函数  $f$  也带有扰动, 初值问题变为  $\hat{y}' = \hat{f}(t, \hat{y})$ , 则对任意  $t \geq t_0$ , 有

$$\|\hat{y}(t) - y(t)\| \leq e^{L(t-t_0)} \|\hat{y}_0 - y_0\| + \frac{e^{L(t-t_0)} - 1}{L} \|\hat{f} - f\|,$$

其中  $\|\hat{f} - f\| = \max_{t, y \in D} \|\hat{f}(t, y) - f(t, y)\|$ . 上述关于扰动的估计表明初值问题的惟一解是关于问题数据的连续函数, 因而问题是适定的.

**例 9.6 解的稳定性** 对于例 9.2, 当  $n=1$  时, 常微分方程为  $y'=b$ ,  $b$  为给定常数, 它的解是一族斜率为  $b$  的平行直线, 如图 9.1 所示. 这个常微分方程的解是稳定的, 但并不渐近稳定. 进一步, 当  $\lambda$  为常数时, 常微分方程

$$y'=\lambda y$$

的解为

$$y(t)=y_0 e^{\lambda t},$$

其中  $t_0=0$  是初始时间,  $y(0)=y_0$  是初始值. 例 9.5 是这个常微分方程在  $\lambda=1$  时的特殊情形, 图 9.2 画出了它的部分解. 当  $\lambda>0$  时, 由于所有非零解都按指数递增, 如图 9.2 所示, 所以任何两个解之间都不相互收敛, 因而每个解都是不稳定的. 另一方面, 当  $\lambda<0$  时, 所有非零解都按指数下降, 如图 9.3 所示, 任何两个解都相互收敛. 因而在这种情形, 每个解不仅稳定, 而且渐近稳定. 如果  $\lambda=a+ib$  是复数, 则由 1.3.11 节知

$$e^{\lambda t}=e^{(a+ib)t}=e^{at}e^{ibt}=e^{at}(\cos(bt)+i\sin(bt)),$$

这样, 解是按指数增加还是减少将由  $\operatorname{Re}\lambda$  的符号确定. 特别地, 若  $\operatorname{Re}\lambda>0$ , 则解是不稳定的; 若  $\operatorname{Re}\lambda<0$ , 则解是渐近稳定的; 如果  $\operatorname{Re}\lambda=0$ , 则解是振荡的, 但由于相互之间保持一定距离, 所以虽然稳定, 但不渐近稳定. ■

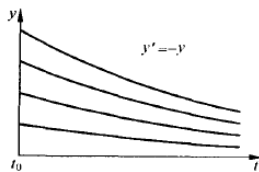


图 9.3  $y'=-y$  的部分解

$$y(a)=y_0,$$

**基本思想:** 从初值出发, 每一步都沿切线方向积分一步:

$$y(x_k)=y(x_{k-1})+(x_k-x_{k-1})y'(x_{k-1})=y(x_{k-1})+h_k f(x_{k-1}, y)$$

其中, 第  $k$  步的误差, 即截断误差可以定义为:

$$R_k=\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(s, y(s))ds-h_k f(x_{k-1}, y(x_{k-1})).$$

这里, 记  $h_k:=(x_k-x_{k-1})$  是步长. 整体误差和局部误差 整体误差不是简单的局部误差的和, 注意: 发散情形: 局部误差会被放大, 其和  $\geq$  整体误差; 收敛情形: 整体误差  $\leq$  局部误差的和.

隐式欧拉

$$y(x_k)=y(x_{k-1})+(x_k-x_{k-1})y'(x_k)$$

无条件稳定(对  $h$  无限制), 精度只有一阶:

$$\left|\frac{1}{1-h\lambda}\right|=1+h\lambda+(h\lambda)^2+\cdots<1$$

梯形/中点法

$$y(x_k)=y(x_{k-1})+(x_k-x_{k-1})(y'(x_{k-1})+y'(x_k))/2$$

(部分情形)无条件稳定, 二阶收敛(与  $e^{h\lambda}$  的展开式比较):

$$\left|\frac{1+h\lambda/2}{1-h\lambda/2}\right|=1+h\lambda+\frac{(h\lambda)^2}{2}+\frac{(h\lambda)^3}{4}+\cdots<1$$

刚性 ODE 的 Jacobi 矩阵特征值相互差别极大, 则称它是刚性的!

**例 9.8 欧拉方法** 例 9.5 考虑了初值问题  $y' = y$ , 初始时刻  $t_0 = 0$  时  $y$  的值为  $y_0$ . 这个问题的解析解极易求得, 现在用欧拉方法进行数值求解. 为简化, 取固定步长  $h$ , 从  $t_0 = 0$  开始, 计算  $t_1 = t_0 + h$  时解的值

$$y_1 = y_0 + h y'_0 = y_0 + h y_0 = y_0(1 + h).$$

可以看出所得  $t_1$  点的近似值  $y_1$  是不精确的 (即  $y_1 \neq y(t_1)$ ), 当  $t_0 = 0, y_0 = 1, h = 0.5$  时,  $y_1 = 1.5$ , 而关于这个初始值的精确解  $y(0.5) = \exp(0.5) \approx 1.649$ . 这样, 得到的  $y_1$  将落在另一个解上, 如图 9.4 所示.

可以看出, 另一方面, 对具有稳定解的方程来说, 数值解的误差并不增长. 像具有渐近稳定解的方程,  $y' = -y$ , 误差将随着时间增加而减少, 如图 9.5 所示.

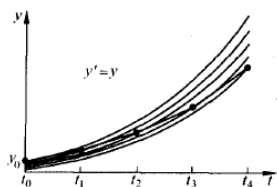


图 9.4 求解  $y' = y$  的欧拉方法

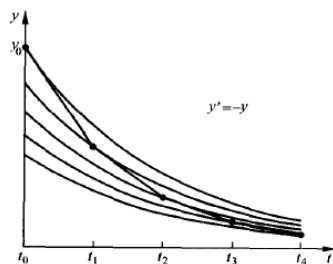


图 9.5 求解  $y' = -y$  的欧拉方法

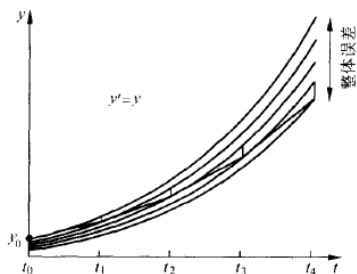


图 9.6 求解  $y' = y$  的欧拉方法的  
局部误差和整体误差

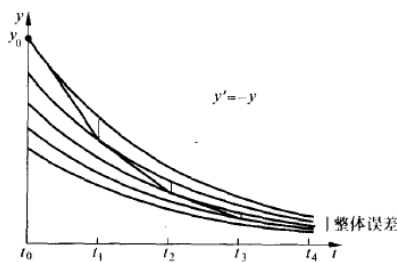


图 9.7 求解  $y' = -y$  的欧拉方法的  
局部误差和整体误差

**例 9.10 刚性** 为说明刚性常微分方程的数值求解, 考虑初值条件为  $y(0)=1$  的初值问题

$$y' = -100y + 100t + 101.$$

这个常微分方程的通解为  $y(t) = 1 + t + ce^{-100t}$ , 满足初始条件的特解为  $y(t) = 1 + t$  (即  $c=0$ ). 由于解是线性的, 所以这个问题的欧拉方法理论上是精确的. 为了说明截断误差或舍入误差的影响, 给初始值一个轻微的扰动. 取步长  $h=0.1$ , 对给定的初值, 结果为

$t$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4
精确解	1.00	1.10	1.20	1.30	1.40
欧拉解	0.99	1.19	0.39	8.59	-64.2
欧拉解	1.01	1.01	2.01	-5.99	67.0

**例 9.10 刚性** 为说明刚性常微分方程的数值求解, 考虑初值条件为  $y(0)=1$  的初值问题

$$y' = -100y + 100t + 101.$$

这个常微分方程的通解为  $y(t) = 1 + t + ce^{-100t}$ , 满足初始条件的特解为  $y(t) = 1 + t$  (即  $c=0$ ). 由于解是线性的, 所以这个问题的欧拉方法理论上是精确的. 为了说明截断误差或舍入误差的影响, 给初始值一个轻微的扰动. 取步长  $h=0.1$ , 对给定的初值, 结果为

$t$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4
精确解	1.00	1.10	1.20	1.30	1.40
欧拉解	0.99	1.19	0.39	8.59	-64.2
欧拉解	1.01	1.01	2.01	-5.99	67.0

多保留一项, 可得到二阶方法

$$y_{k+1} = y_k + h_k y'_k + \frac{h_k^2}{2} y''_k.$$

需要注意, 这种方法需要计算  $y$  的高阶导数. 我们可以通过链式法则对  $y' = f(t, y)$  求导, 即

$$y'' = f_t(t, y) + f_y(t, y) y' = f_t(t, y) + f_y(t, y) f(t, y),$$

其中的下标表示的是对给定变量求偏导. 随着阶数的增加, 导数的表达式将变得非常复杂而难于求得, 所以高阶泰勒级数方法并不实用. 但近年来由于符号操作以及自动求导系统的产生使得这类方法更加可行.

**例 9.11 泰勒级数法** 为说明泰勒级数法, 我们用它来求解一维非线性常微分方程

$$y'(t) = f(t, y) = -2ty^2,$$

初值  $y(0)=1$ . 对  $f$  求导, 得

$$y'' = f_t(t, y) + f_y(t, y) f(t, y) = -2y^2 + (-4ty)(-2ty^2) = 2y^2(4t^2y - 1).$$

从  $t_0=0$  开始, 取  $h=0.25$ , 则  $t_1=0.25$ , 得

$$y_1 = y_0 + h y'_0 + \frac{h^2}{2} y''_0 = 1 + 0 - 0.0625 = 0.9375.$$

继续下一步, 从  $t_1=0.25$  到  $t_2=0.5$ , 得

$$y_2 = y_1 + h y'_1 + \frac{h^2}{2} y''_1 = 0.9375 - 0.1099 - 0.0421 = 0.7856.$$

这个问题的精确解为  $y(t) = 1/(1+t^2)$ , 因此积分点上的真值为  $y(0.25) = 0.9412$ ,  $y(0.5) = 0.8$ . ■



## 2. Taylor级数法

### 3. Runge-Kutta方法- 显式

记 $a_{i,j}, c_i (i = 2, 3, \dots, s; j < i)$ 和 $b_i (i = 1, 2, \dots, s)$ 是一些待定的实数权值。则s级显Runge-Kutta方法:

$$y_{m+1} = y_m + h(b_1 k_1 + \dots + b_s k_s),$$

其中,

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_m, y_m), \\ k_2 &= f(x_m + c_2 h, y_m + h a_{2,1} k_1), \\ k_3 &= f(x_m + c_3 h, y_m + h(a_{3,1} k_1 + a_{3,2} k_2)), \\ &\dots\dots\dots \\ k_s &= f(x_m + c_s h, y_m + h(a_{s,1} k_1 + \dots + a_{s,s-1} k_{s-1})) \end{aligned}$$

可以按Taylor公式确定系数。由于定解条件少于参数个数, 因此这里公式中的参数的值不唯一, 常用的有Heun公式、Gill公式等。此外, 我们也既避免计算y的高阶导数, 也保证差分的高精度。

**例 9.12 Heun 方法** 为说明 Heun 方法的使用, 求解例 9.11 的一维非线性常微分方程

$$y' = -2ty^2,$$

初始条件为  $y(0) = 1$ . 从  $t_0 = 0$  到  $t_1 = 0.25$  取步长  $h = 0.25$ , 得

$$k_1 = f(t_0, y_0) = 0, \quad k_2 = f(t_0 + h, y_0 + h k_1) = -0.5,$$

因此

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) = 1 + 0.125 \times (-0.5) = 0.9375.$$

从  $t_1 = 0.25$  到  $t_2 = 0.5$ , 继续下一步, 得

$$k_1 = f(t_1, y_1) = -0.4395, \quad k_2 = f(t_1 + h, y_1 + h k_1) = -0.6850,$$

因此

$$y_2 = y_1 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) = 0.9375 + 0.125 \times (-1.1245) = 0.7969.$$

这个问题的精确解为  $y(t) = 1/(1+t^2)$ , 因此积分点上的真值为  $y(0.25) = 0.9412$ ,  $y(0.5) = 0.8$ . ■

经典四阶RK格式, 在matlab中 `help ode45`。

最著名的龙格-库塔法是四阶经典格式

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h_k}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

其中

$$k_1 = f(t_k, y_k),$$

$$k_2 = f(t_k + h_k/2, y_k + h_k k_1/2),$$

$$k_3 = f(t_k + h_k/2, y_k + h_k k_2/2),$$

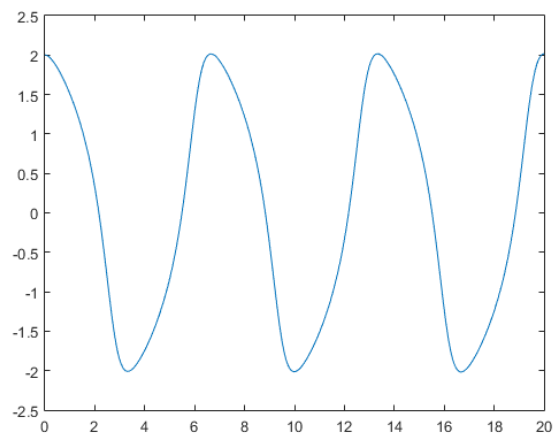
$$k_4 = f(t_k + h_k, y_k + h_k k_3).$$

Example

```
[t,y]=ode45(@vdp1,[0 20],[2 0]);  
plot(t,y(:,1));  
solves the system  $y' = \text{vdp1}(t,y)$ , using the default relative error  
tolerance  $1e-3$  and the default absolute tolerance of  $1e-6$  for each  
component, and plots the first component of the solution.
```

Class support for inputs `ISPAN`, `Y0`, and the result of `ODEFUN(I,Y)`:  
float: double, single

See also [ode23](#), [ode113](#), [ode15s](#), [ode23s](#), [ode23t](#), [ode23tb](#), [ode15i](#),



### 3. Runge-Kutta方法- 隐式

如果 $k_i$ 的计算中用到了所有的 $k$ 值, 即:

$$y_{m+1} = y_m + h(b_1 k_1 + \cdots + b_s k_s),$$

其中 $k_i$ 满足:

$$k_i = f(x_m + c_i h, y_m + h(a_{i,1} k_1 + \cdots + a_{i,s} k_s))$$

常用的隐式方法有: 隐式中点公式, Hammer 和 Hollingsworth 公式, Kuntzmann 和 Butcher 公式等。

单步法。以上的方法都属于单步法, 即形如:

$$y_{m+1} = y_m + h\varphi(x_m, y_m, h),$$

其中 $\varphi$ 被称为单步法的增量函数。单步法的截断误差可表示为

$$R_m = y_{m+1} - y_m - h\varphi$$

稳定性与收敛性

**定义3.3.1 (相容性).** 如果单步法的增量函数 $\varphi$ 满足:

$$\varphi(x, y, 0) = f(x, y)$$

则称单步法与微分方程是相容的。

**定义3.3.2 (稳定性).** 如果 $\varphi$ 对于任意 $(x, y) \in \Omega$ 以及小于某个步长 $h$ 时关于 $y$ 满足Lipschitz条件, 则单步方法是稳定的。

**定义3.3.3 (收敛性).** 由增量函数 $\varphi(x, y, h)$ 所确定的单步法是收敛的, 若

$$\lim_{h \rightarrow 0} y_m = y(x), x = x_m$$

若 $\varphi$ 关于 $x$ 、 $h$ 满足Lipschitz条件, 则收敛性与相容性等价

### 4. 线性多步法

对于 $y' = f(x, y)$ , 记 $y_m = y(x_m)$ ,  $f_m = f(x_m, y_m)$ , 则:

$$y_{m+1} = \sum_{i=1}^k \alpha_i y_{m-i+1} + h\Phi(x_{m+1}, x_m, \dots, x_{m-k+1}, y'_{m+1}, \dots, y'_{m-k+1}; h),$$

其中 $k \in N^+$ ,  $\{\alpha_i\}$ 是给定实数,  $h$ 是步长。则截断误差为:

$$R(x_m, y_m, h) = y_{m+1} - \sum_{i=1}^k \alpha_i y_{m-i+1} - h\Phi$$

$p$ 阶: 使误差等于 $O(h^{p+1})$ 成立的最大整数!

多步法的典型构造方法是多样的。Adams外插法是一种显式方法。相应的有Adams内插法是一种隐式方法。待定系数法求 $p$ 阶 $m$ 步线性多步法

## 软件包与参考材料

## Exercise

**例 9.13 多步法的推导** 为说明多步法的其他推导方法,我们导出形如

$$y_{k+1} = \alpha_1 y_k + h(\beta_1 y'_k + \beta_2 y'_{k-1})$$

的显式两步法,其中  $\alpha_1, \beta_1$  和  $\beta_2$  是待定参数. 为使符号简化,只考虑一维情形,结果可推广到方程组的向量情形. 用待定系数法,令公式对前三个单项式精确成立. 若  $y(t) = 1$ , 则  $y'(t) = 0$ , 得到方程

$$1 = \alpha_1 \cdot 1 + h(\beta_1 \cdot 0 + \beta_2 \cdot 0),$$

若  $y(t) = t$ , 则  $y'(t) = 1$ , 得到方程

$$t_{k+1} = \alpha_1 t_k + h(\beta_1 \cdot 1 + \beta_2 \cdot 1).$$

若  $y(t) = t^2$ , 则  $y'(t) = 2t$ , 得到方程

$$t_{k+1}^2 = \alpha_1 t_k^2 + h(\beta_1 \cdot 2t_k + \beta_2 \cdot 2t_{k-1}).$$

由于这三个方程对任何  $t_k$  都成立,不妨取  $t_{k-1} = 0, h = 1$  (因而  $t_k = 1, t_{k+1} = 2$ ), 求解相应的  $3 \times 3$  线性方程组,得  $\alpha_1 = 1, \beta_1 = \frac{3}{2}, \beta_2 = -\frac{1}{2}$ . 这样,两步显式法为

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}(3y'_k - y'_{k-1}),$$

由约束条件,它是二阶的. 类似地,还可以推导出形如

$$y_{k+1} = \alpha_1 y_k + h(\beta_0 y'_{k+1} + \beta_1 y'_k)$$

的隐式两步法. 同样,用待定系数法,令公式对前三个单项式精确成立,得到三个方程

$$\begin{cases} 1 = \alpha_1 \cdot 1 + h(\beta_0 \cdot 0 + \beta_1 \cdot 0), \\ t_{k+1} = \alpha_1 \cdot t_k + h(\beta_0 \cdot 1 + \beta_1 \cdot 1), \\ t_{k+1}^2 = \alpha_1 \cdot t_k^2 + h(\beta_0 \cdot 2t_{k+1} + \beta_1 \cdot 2t_k). \end{cases}$$

为简化,取  $t_k = 0, h = 1$  (从而  $t_{k+1} = 1$ ), 求解相应的  $3 \times 3$  线性方程组,得  $\alpha_1 = 1, \beta_1 = \frac{1}{2},$

$\beta_0 = \frac{1}{2}$ . 这样,隐式两步法为

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}(y'_{k+1} + y'_k).$$

可以看出,这就是梯形方法,由约束条件知道,它是二阶的. 用同样的方法,还可以得到更高阶的方法,只需令公式对前若干个单项式精确成立,单项式的个数要与公式中待定参数的个数相同,然后求解相应的线性方程组,得到参数的值即可. ■

**例 9.14 预估-校正方法** 为说明预估-校正方法,我们用例 9.13 中得到的两步法来解例 9.11 和例 9.12 中的一维非线性常微分方程

$$y' = -2ty^2,$$

初值为  $y(0) = 1$ . 由于二阶显式格式需要两个初值,所以除了  $t_0 = 0$  时的初值  $y_0 = 1$  外,还要使用例 9.12 中用单步 Heun 法得到的  $t_1 = 0.25$  时的值  $y_1 = 0.9375$ . 从  $t_1 = 0.25$  到  $t_2 = 0.5$ ,取步长  $h = 0.25$ ,使用二阶显式方法,得到预估值

$$\hat{y}_2 = y_1 + \frac{h}{2}(3y'_1 - y'_0) = 0.9375 + 0.125(-1.3184 + 0) = 0.7727.$$

计算  $f$  在预估值  $\hat{y}_2$  处的值,得到相应的导数值  $\hat{y}'_2 = -0.5971$ . 在相应的隐式方法中(在这里为梯形公式)将这些预估值代入,得到解的校正值

$$y_2 = y_1 + \frac{h}{2}(y'_2 + y'_1) = 0.9375 + 0.125(-0.5971 - 0.4395) = 0.8079.$$

用这个新的  $y_2$  再计算  $f$  的值,得到改进值  $y'_2 = -0.6528$ ,以便在下一步计算时使用. 到这里,完成了 PECE 程序的一步. 如果需要的话,还可以反复校正,直到收敛. 这个问题的精确解为  $y(t) = 1/(1+t^2)$ ,因而在积分点上的真值为  $y(0.25) = 0.9412, y(0.5) = 0.8$ . ■

最常用的成对多步方法之一是显式四阶 Adams-Bashforth 预估格式

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24}(55y'_k - 59y'_{k-1} + 37y'_{k-2} - 9y'_{k-3})$$

和隐式四阶 Adams-Moulton 校正格式

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24}(9y'_{k+1} + 19y'_k - 5y'_{k-1} + y'_{k-2}).$$