计 算 方 法

梅立泉

School of Mathematics and Statistics, Xi'an Jiaotong University

要求

1. 熟练掌握求解常微分方程的基本数值解法：数值微分法、数值积分法、泰勒展开法
2. 了解求解常微分方程的线性多步法，熟练掌握求解常微分方程的Runge-Kutta方法
3. 掌握求解常微分方程组和高阶方程的数值解法

本章介绍求解常微分方程初值问题和边值问题的数值解法.

一阶常微分方程初值问题为

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), \quad a \le x \le b, \\ y(a) = y_0. \end{cases}$$

初值是定解条件

其中y_0是已知常数，$f(x, y(x))$是已知函数.

常微分方程数值解法是求$y(x)$在一系列点x_i $(a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b)$ 处$y(x_i)$ 的近似值$y_i(i = 0, 1, \cdots, n)$ 的方法.

$y_i(i = 0, 1, \cdots, n)$ 称为**数值解**. 记$h_i = x_i - x_{i-1}$,

h_i称为x_{i-1} 到x_i 的**步长**, 通常步长取为常量h,

即取$h = (b - a)/n$, 这时$x_i = a + ih$ $(i = 0, 1, \cdots, n)$.

初值问题、边值问题

Lipschitz连续

Theorem

设$f(x,y)$在区域$D=\{(x,y)|a\le x\le b,\ -\infty<y<\infty\}$上连续且关于$y$满足利普希茨(Lipschitz)条件，即存在常数L，使得

$$|f(x,y)-f(x,\bar{y})|\le L|y-\bar{y}|,$$

对于任意的$x\in[a,b]$及任意的$y,\bar{y}$都成立，则初值问题在区间$[a,b]$上存在唯一的连续可微解$y=y(x)$.

下面介绍导出初值问题数值解法的三种方法：数值微分法，数值积分法和泰勒展开法.

1. 数值微分法 数值微分法是用数值微分公式替代常微分方程中的导数所建立的方法.

（1）欧拉（Euler）法

在$x = x_i$处，初值问题为

$$y'(x_i) = f(x_i, y(x_i)).$$

由数值微分公式有$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} - \frac{h}{2} y''(\xi_i)$. 代入得

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

略去误差项$\frac{h^2}{2} y''(\xi_i)$，得求解初值问题数值解的欧拉法

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i).$$

Definition

（局部截断误差）设$y(x_{i+1})$是初值问题的准确解$y(x)$在x_{i+1}处的值，假定前面各步计算均无误差（称为局部化假定），即$y_i = y(x_i)$，$y_{i-1} = y(x_{i-1}), \cdots$. 而$y_{i+1}$是由某一数值解法求得的$y(x_{i+1})$的近似值，则$R[y] = y(x_{i+1}) - y_{i+1}$称为该数值解法在$x_{i+1}$处的局部截断误差.

由定义可知所谓局部截断误差即在局部化假定下当前一步计算所产生的截断误差. 可见欧拉法的局部截断误差

$$R[y] = y(x_{i+1}) - y_{i+1} = \frac{h^2}{2} y''(\xi_i).$$

（2）后退欧拉法

在$x=x_{i+1}$处，初值问题为$y'(x_{i+1})=f(x_{i+1},y(x_{i+1}))$. 由数值微分公式有

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

将其代入得

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

同理可得后退欧拉法及其局部截断误差

$$y_{i+1}=y_i+hf(x_{i+1},y_{i+1}),$$

欧拉法和后退欧拉法的几何意义

（2）后退欧拉法

在$x = x_{i+1}$处，初值问题为$y'(x_{i+1}) = f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))$. 由数值微分公式有

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

将其代入得

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

同理可得后退欧拉法及其局部截断误差

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}),$$

$$R[y] = y(x_{i+1}) - y_{i+1} = -\frac{h^2}{2}y''(\xi_i).$$

（3）中点法

由数值微分公式有

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h} - \frac{h^2}{6} y'''(\xi_i).$$

代入得

$$y(x_{i+1}) = y(x_{i-1}) + 2hf(x_i, y(x_i)) + \frac{h^3}{3} y'''(\xi_i).$$

同理得中点法及其局部截断误差

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i),$$

(3)中点法

由数值微分公式有

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h} - \frac{h^2}{6} y'''(\xi_i).$$

代入得

$$y(x_{i+1}) = y(x_{i-1}) + 2hf(x_i, y(x_i)) + \frac{h^3}{3} y'''(\xi_i).$$

同理得中点法及其局部截断误差

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i),$$

$$R[y] = y(x_{i+1}) - y_{i+1} = \frac{h^3}{3} y'''(\xi_i).$$

例9.1 取步长$h=0.02$，分别用欧拉法，后退欧拉法，求解初值问题

$$\begin{cases} y' = -\frac{0.9y}{1+2x} & 0 \le x \le 0.1 \ , \\ y(0) = 1 \ . \end{cases}$$

解 $x_i = ih = 0.02i \ (i = 0, 1, \cdots, 5), \quad y_0 = 1.$

（1）欧拉法　　由 $y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$ 有

$$y_{i+1} = y_i - 0.02\frac{0.9y_i}{1+2x_i} \ , \ i = 0, 1, 2, 3, 4.$$

由此算得$y_0 = 1.0000$，$y_1 = 0.9820$,

$$y_2 = 0.9650, \ y_3 = 0.9489, \ y_4 = 0.9337, \ y_5 = 0.9192 \ .$$

（2）后退欧拉法　　由 $y_{i+1}=y_i+hf(x_{i+1},y_{i+1})$有

$$y_{i+1}=y_i-0.02\frac{0.9y_{i+1}}{1+2x_{i+1}}\ ,\ \ i=0,1,2,3,4.$$

解之得

$$y_{i+1}=\frac{1+2x_{i+1}}{1.018+2x_{i+1}}y_i\ ,\ \ i=0,1,2,3,4.$$

由此算得$y_0=1.0000$，$y_1=0.9830$,

$$y_2=0.9669,\ \ y_3=0.9516,\ \ y_4=0.9370\ ,\ \ y_5=0.9232\ .$$

（2）后退欧拉法　　由 $y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1})$有

$$y_{i+1} = y_i - 0.02\frac{0.9y_{i+1}}{1+2x_{i+1}}\ ,\ i = 0,1,2,3,4.$$

解之得

$$y_{i+1} = \frac{1+2x_{i+1}}{1.018+2x_{i+1}}y_i\ ,\ i = 0,1,2,3,4.$$

由此算得$y_0 = 1.000\,0$, $y_1 = 0.983\,0$,

$$y_2 = 0.966\,9,\ y_3 = 0.951\,6,\ y_4 = 0.937\,0\ ,\ y_5 = 0.923\,2\ .$$

（3）中点法　　由 $y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i)$有

$$y_{i+1} = y_{i-1} - 0.04\frac{0.9y_i}{1+2x_i}\ ,\ i = 0,1,2,3,4.$$

已知$y_0 = 1$，按后退欧拉法取$y_1 = 0.983\,0$, 由此算得

$$y_2 = 0.966\,0,\ y_3 = 0.950\,8,\ y_4 = 0.935\,4,\ y_5 = 0.921\,8\ .$$

1）梯形法

在区间$[x_i, x_{i+1}]$上对微分方程$y' = f(x, y)$ 两端积分，得

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

对右端积分利用梯形求积公式计算，得

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

由此得梯形法及其局部截断误差

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

$$R[y] = y(x_{i+1}) - y_{i+1} = -\frac{h^3}{12}y'''(\xi_i).$$

2）辛普生法

在区间$[x_{i-1},x_{i+1}]$上对微分方程$y'=f(x,y)$ 两端积分，得

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

用辛普生求积公式计算右端积分，得

$$y(x_{i+1}) = y(x_{i-1}) + \frac{x_{i+1}-x_{i-1}}{6}\Big[f(x_{i-1},y(x_{i-1})) + 4f(x_i,y(x_i)) + f(x_{i+1},y(x_{i+1}))\Big] - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi_i,y(\xi_i)).$$

由此得辛普生法及其局部截断误差

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

$$R[y] = y(x_{i+1}) - y_{i+1} = -\frac{h^5}{90}y^{(5)}(\xi_i).$$

3）**阿达姆斯（Adams）显式法** 线性多步法

给定$k+1$个数据点$(x_{i-j}, f_{i-j})(j=0,1,\cdots,k)$，其中节点$x_{i-j}$等距分布，$f_{i-j}=f(x_{i-j}, y_{i-j})$. 作$k$次拉格朗日插值多项式$L_k(x)$，则$f(x,y)=L_k(x)+R_k(x)$．在区间$[x_i, x_{i+1}]$上对$y'=f(x,y)$两端积分得

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

取$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y'(x)dx \approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_k(x)dx$. 可得求解初值问题的**阿达姆斯（Adams）显式公式（也称为Adams-Bashforth公式）**

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{A}(b_0 f_i + b_1 f_{i-1} + \cdots + b_k f_{i-k}), \quad i \geq k.$$

$$R[y] = B_k h^{k+2} y^{(k+2)}(\xi_i).$$

表9.1 阿达姆斯显式公式系数表

k	A	b_0	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5	B_k
0	1	1						1/2
1	2	3	-1					5/12
2	12	23	-16	5				3/8
3	24	55	-59	37	-9			251/720
4	720	1 901	-2 774	2 616	-1 274	251		95/288

例如，当 $k=0$ 时，$y_{i+1}=y_i+hf_i$ Euler法

当 $k=1$ 时,$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{2}(3f_i-f_{i-1})$

当 $k=3$ 时,阿达姆斯显式公式及其局部截断误差为

$$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{24}(55f_i-59f_{i-1}+37f_{i-2}-9f_{i-3}),$$

$$R[y]=\frac{251}{720}h^5y^{(5)}(\xi_i).$$

4) 阿达姆斯（Adams）隐式法

给定$k+1$个数据点$(x_{i-j}, f_{i-j})(j=-1,0,1,\cdots,k-1)$，可得阿达姆斯（Adams）隐式公式（也称为Adams-Monlton公式）

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{A^*}(b_0^* f_{i+1} + b_1^* f_i + \cdots + b_k^* f_{i-k+1}), \quad i \geq k-1.$$

$$R[y] = B_k^* h^{k+2} y^{(k+2)}(\xi_i).$$

k	A^*	b_0^*	b_1^*	b_2^*	b_3^*	b_4^*	b_5^*	B_k^*
0	1	1						-1/2
1	2	1	1					-1/12
2	12	5	8	-1				-1/24
3	24	9	19	-5	1			-19/720
4	720	251	646	-264	106	-19		-3/160
5	1 440	475	1 427	-798	482	-173	27	-863/60 480

例如，当$k=0$时，$y_{i+1}=y_i+hf_{i+1}$ 后退Euler法

当$k=1$时,$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{2}(f_{i+1}+f_i)$ 梯形法

当$k=2$时,$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{12}(5f_{i+1}+8f_i-f_{i-1})$

当$k=3$时,阿达姆斯隐式公式为

$$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{24}(9f_{i+1}+19f_i-5f_{i-1}+f_{i-2}),$$

$$R[y]=-\frac{19}{720}h^5y^{(5)}(\xi_i).$$

比较表9.1与表9.2 中局部截断误差的系数可见$|B_k^*|<|B_k|$ $(k\geq 1)$，这说明隐式法的局部截断误差小于显式法的局部截断误差.

泰勒级数法

设函数f充分可导，将$y(x_{i+1})$在x_i处泰勒展开，有

$$y(x_{i+1}) = y(x_i+h) = y(x_i) + y'(x_i)h + \frac{1}{2}y''(x_i)h^2 + \frac{1}{3!}y'''(x_i)h^3 + \cdots$$
$$+\frac{1}{p!}y^{(p)}(x_i)h^p + \frac{1}{(p+1)!}y^{(p+1)}(\xi_i)h^{p+1}, \quad x_i < \xi_i < x_{i+1}.$$

略去上式中的误差项，用$y_i^{(k)}$代替$y^{(k)}(x_i)$，则得p阶泰勒级数法

$$y_{i+1} = y_i + y_i'h + \frac{1}{2}y_i''h^2 + \frac{1}{3!}y_i'''h^3 + \cdots + \frac{1}{p!}y_i^{(p)}h^p,$$

其中$y_i^{(k)}$的计算公式为：

$$\begin{cases} y_i' = f(x_i, y_i) \\ y_i'' = (f_x' + f_y' f)|_{(x_i,y_i)} \\ y_i''' = (f_{xx}'' + 2f_{xy}'' f + f_{yy}'' f^2 + f_x' f_y' + f_y'^2 f)|_{(x_i,y_i)} \\ \vdots \end{cases}$$

泰勒级数法

局部截断误差

$$R[y]=y(x_{i+1})-y_{i+1}=\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}y^{(p+1)}(\xi_i).$$

取$p=1$，即欧拉法. 取$p=2$得

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

其局部截断误差

$$R[y]=y(x_{i+1})-y_{i+1}=\frac{h^3}{6}y'''(\xi_i).$$

当$p>2$时需要计算高阶导数，当$f(x,y)$的表达式比较复杂时，计算其高阶导数往往相当困难. 因而，泰勒级数法适用于求解比较简单的常微分方程.

名词介绍

Definition

p阶方法 若某一数值解法的局部截断误差$R[y] = O(h^{p+1})$，则称该法是p阶方法或称该法具有p阶精度. 例如，欧拉法，后退欧拉法是一阶方法，中点法、梯形法是二阶方法，辛普生法是四阶方法.

显式法 由数值求解公式可以直接计算y_{i+1}的方法，即求解公式中的$f(x, y)$不含y_{i+1}的方法. 例如，欧拉法，中点法.

隐式法 由数值求解公式不能直接计算y_{i+1}的方法，即求解公式中的$f(x, y)$含有y_{i+1}. 例如，后退欧拉法，梯形法，辛普生法. 一般地，$f(x, y)$是非线性函数，y_{i+1}不能显化，计算y_{i+1}需要解方程.

名词介绍

Definition

单步法 计算y_{i+1}只需要一个y_i值的方法. 例如，欧拉法，后退欧拉法，梯形法.

多步法 计算y_{i+1}需要$y_i, y_{i-1}, \cdots$多个值的方法. 一般k步法要用到$y_i, y_{i-1}, \cdots, y_{i-k+1}$的值. 例如，中点法，辛普生法，阿达姆斯显（隐）式法$k > 0 (k > 1)$. 算法的启动，初始值的给定

隐式法的求解

预估–校正法

隐式法的求解一般采用非线性方程求根的方法. 下面以梯形法

难以求得显式格式

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

为例来说明隐式法的求解.

(i) 简单迭代法

记 $\phi(y_{i+1}) = y_i + \frac{h}{2}\left[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})\right]$, 则有$y_{i+1} = \phi(y_{i+1})$.

给定y_{i+1}的初始值$y_{i+1}^{(0)}$（例如，由欧拉法$y_{i+1}^{(0)} = y_i + hf(x_i, y_i)$给出$y_{i+1}^{(0)}$）后，由迭代公式

$$y_{i+1}^{(k+1)} = \phi(y_i^{(k)}) = y_i + \frac{h}{2}\left[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k)})\right], \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

计算y_{i+1}. 当h充分小, 且当$|y_{i+1}^{(k+1)} - y_{i+1}^{(k)}| \le \epsilon$时,

取$y_{i+1} \approx y_{i+1}^{(k+1)}$.

(ii) 牛顿法

记$F(y_{i+1}) = y_{i+1} - y_i - \frac{h}{2}\Big[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})\Big]$,
梯形法即解方程$F(y_{i+1}) = 0$. 由非线性方程求根的牛顿法有

$$y_{i+1}^{(k+1)} = y_{i+1}^{(k)} - \frac{F(y_{i+1}^{(k)})}{F'(y_{i+1}^{(k)})}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

即

$$y_{i+1}^{(k+1)} = y_{i+1}^{(k)} - \frac{y_{i+1}^{(k)} - y_i - \frac{h}{2}\Big[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k)})\Big]}{1 - \frac{h}{2} f'_y(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k)})}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

当 $|y_{i+1}^{(k+1)} - y_{i+1}^{(k)}| \leq \epsilon$时，取$y_{i+1} \approx y_{i+1}^{(k+1)}$.

(iii) 改进欧拉法

所谓改进欧拉法就是用简单迭代法求解y_{i+1}，且只迭代一次即可.

只要步长h取得足够小，欧拉法就可以算出y_{i+1}较好的迭代初始值$y_{i+1}^{(0)}$，再用梯形法计算一次就可以得到y_{i+1}更好的近似值. 即

$$\boxed{\begin{cases} y_{i+1}^{(0)} = y_i + hf(x_i, y_i), \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(0)})\right]. \end{cases}}$$

或

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

称为改进欧拉法. 式中的第一式称为**预测公式**，第二式称为**校正公式**. 一般地，由显式公式做预测，同阶的隐式公式做校正的两个公式组成的方法称为**预测-校正法**.

利用泰勒展开可以导出**龙格-库塔(Runge-Kutta)法**（简称**R-K方法**）. m级的龙格-库塔法的一般形式为:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2 + \cdots + \lambda_m K_m, \\ K_1 = hf(x_i, y_i), \\ K_2 = hf(x_i + \alpha_2 h, y_i + \beta_{21} K_1), \\ K_3 = hf(x_i + \alpha_3 h, y_i + \beta_{31} K_1 + \beta_{32} K_2), \\ \quad \vdots \\ K_m = hf(x_i + \alpha_m h, y_i + \beta_{m1} K_1 + \beta_{m2} K_2 + \cdots + \beta_{m,m-1} K_{m-1}). \end{cases}$$

其中 $\lambda_i, \alpha_i, \beta_{j,k}$均是常数，由待定系数法确定.确定的原则是将局部截断误差$R[y] = y(x_{i+1}) - y_{i+1}$在$x_i$ 处泰勒展开，适当选取h的系数，使得局部截断误差$R[y]$的阶尽可能的高.

下面以$m=2$级R-K法为例来说明R-K法的导出思想.

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2, \\ K_1 = hf(x_i, y_i), \\ K_2 = hf(x_i + \alpha h, y_i + \beta K_1). \end{cases}$$

将$y(x_{i+1})$在x_i处泰勒展开，有

$$y(x_{i+1}) = y(x_i+h) = y(x_i)+y'(x_i)h+\frac{1}{2!}y''(x_i)h^2+\frac{1}{3!}y'''(x_i)h^3+O(h^4)$$

由$y'(x) = f(x, y(x))$知

$$\begin{aligned} y''(x) &= f'_x + f'_y y' = f'_x + f'_y f, \\ y'''(x) &= f''_{xx} + 2f''_{xy} f + f''_{yy} f^2 + f'_x f'_y + f'^2_y f. \end{aligned}$$

所以,

$$y(x_{i+1}) = y(x_i)+fh+\frac{1}{2}(f'_x+f'_y f)h^2+\frac{1}{6}(f''_{xx}+2f''_{xy}f+f''_{yy}f^2+f'_x f'_y+f'^2_y f)h^3+O$$

上式中的f是$f(x_i, y(x_i))$的简写.

又由二元函数的泰勒展开式有

$$\begin{aligned} K_2 &= hf(x_i+\alpha h, y_i+\beta K_1) \\ &= h(f+\alpha f'_x h+\beta f'_y fh+\tfrac{1}{2}\alpha^2 f''_{xx}h^2+\alpha\beta f''_{xy}fh^2+\tfrac{1}{2}\beta^2 f''_{yy}f^2h^2+\cdots) \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i+\lambda_1 K_1+\lambda_2 K_2 \\ &= y_i+\lambda_1 fh+\lambda_2 h(f+\alpha f'_x h+\beta f'_y fh+\tfrac{1}{2}\alpha^2 f''_{xx}h^2 \\ &\quad +\alpha\beta f''_{xy}fh^2+\tfrac{1}{2}\beta^2 f''_{yy}f^2h^2+\cdots) \\ &= y_i+(\lambda_1+\lambda_2)fh+\lambda_2(\alpha f'_x+\beta f'_y f)h^2 \\ &\quad +\lambda_2(\tfrac{1}{2}\alpha^2 f''_{xx}+\alpha\beta f''_{xy}f+\tfrac{1}{2}\beta^2 f''_{yy}f^2)h^3+O(h^4) \end{aligned}$$

得局部截断误差

$$
\begin{aligned}
R[y] = y(x_{i+1}) - y_{i+1} = &(1-\lambda_1-\lambda_2)f \\
&h + \left[(\tfrac{1}{2}-\alpha\lambda_2)f_x' + (\tfrac{1}{2}-\beta\lambda_2)f_y' f\right]h^2 + \left[(\tfrac{1}{6}-\tfrac{1}{2}\alpha^2\lambda_2)f_{xx}''\right. \\
&\left.+(\tfrac{1}{3}-\alpha\beta\lambda_2)f_{xy}''f + (\tfrac{1}{6}-\tfrac{1}{2}\beta^2\lambda_2)f_{yy}''f^2 + \tfrac{1}{6}(f_x'f_y' + {f_y'}^2 f)\right]h^3 + O(h^4)
\end{aligned}
$$

为使$R[y]$的阶尽可能的高，由于f的任意性，应选

取$\alpha, \beta, \lambda_1, \lambda_2$使$h, h^2$的系数为零，

得局部截断误差

$$R[y]=y(x_{i+1})-y_{i+1}=(1-\lambda_1-\lambda_2)f$$
$$h+\left[(\tfrac{1}{2}-\alpha\lambda_2)f'_x+(\tfrac{1}{2}-\beta\lambda_2)f'_yf\right]h^2+\left[(\tfrac{1}{6}-\tfrac{1}{2}\alpha^2\lambda_2)f''_{xx}\right.$$
$$\left.+(\tfrac{1}{3}-\alpha\beta\lambda_2)f''_{xy}f+(\tfrac{1}{6}-\tfrac{1}{2}\beta^2\lambda_2)f''_{yy}f^2+\tfrac{1}{6}(f'_xf'_y+{f'_y}^2f)\right]h^3+O(h^4)$$

为使$R[y]$的阶尽可能的高，由于f的任意性，应选

取$\alpha,\beta,\lambda_1,\lambda_2$使$h,h^2$的系数为零，即得方程组

$$\begin{cases}1-\lambda_1-\lambda_2=0,\\ \frac{1}{2}-\alpha\lambda_2=0,\\ \frac{1}{2}-\beta\lambda_2=0.\end{cases}$$

由此解出$\alpha,\beta,\lambda_1,\lambda_2$，便得到相应公式. 注意到$\alpha,\beta,\lambda_1,\lambda_2$无论怎样选取，$h^3$的系数中$f'_xf'_y+{f'_y}^2f\neq 0$，故$R[y]=O(h^3)$. 所以，通过解上方程组得到的方法均是二阶方法. 方程组含有三个方程，四个未知量，其解有无穷多个.

（1）取$\lambda_1=\lambda_2=1/2, \alpha=\beta=1$，代入得

$$\begin{cases} y_{i+1}=y_i+h(\frac{1}{2}K_1+\frac{1}{2}K_2) \\ K_1=f(x_i,y_i) \\ K_2=f(x_i+h,y_i+hK_1) \end{cases}$$

即改进欧拉法.

（2）取$\lambda_1=0$, 则$\lambda_2=1, \alpha=\beta=1/2$，则得

$$\begin{cases} y_{i+1}=y_i+K_2 \\ K_1=hf(x_i,y_i) \\ K_2=hf(x_i+\frac{1}{2}h,y_i+\frac{1}{2}K_1). \end{cases}$$

称为变形欧拉法.

类似于上述二阶方法的推导，可得多种四级四阶R-K法. 应用最广泛的是如下**标准（经典）的四级四阶R-K**法：

$$\boxed{\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4), \\ K_1 = hf(x_i, y_i) \\ K_2 = hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}K_1), \\ K_3 = hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}K_2), \\ K_4 = hf(x_i + h, y_i + K_3). \end{cases}}$$

R-K方法的优缺点：

优点 精度高，它是显式单步法，计算y_{i+1}只需要y_i一个值，每一步的步长可根据精度的要求单独考虑其大小.

缺点 需要计算多个函数值，当$f(x, y)$比较复杂时，计算量大.

R-K方法也常用于线性多步法开始值的计算.

除了以上介绍的显式R-K法以外，还有隐式R-K法.
由于隐式R-K法的计算比较复杂，故此处从略.

例9.2 用标准龙格-库塔法求解初值问题

$$\begin{cases} y' = -\frac{0.9y}{1+2x} & 0 \le x \le 0.1\ , \\ y(0) = 1\ . \end{cases}$$

解 $f(x,y) = -\frac{0.9y}{1+2x}$ ，$y_0 = 1$ ，$h = 0.02$.

当$i = 0$时，

$$K_1 = hf(x_0, y_0) = -h\frac{0.9y_0}{1+2x_0} = -0.02 \times 0.9 = -0.018.$$

$$\begin{aligned} K_2 &= hf(x_0 + h/2, y_0 + K_1/2) = hf(h/2, 1 - 0.018/2) \\ &= 0.02f(0.01, 0.991) = 0.02\left(-\frac{0.9 \times 0.991}{1+0.02}\right) \\ &= -0.017\,488\,235. \end{aligned}$$

$$K_3 = hf(x_0 + h/2, y_0 + K_2/2) = hf(h/2, 1 - 0.017\,488\,235/2)$$
$$= 0.02f(0.01, 0.991\,255\,882) = 0.02\Big(-\frac{0.9 \times 0.991\,255\,882}{1 + 0.02}\Big)$$
$$= -0.017\,492\,751.$$

$$K_4 = hf(x_0 + h, y_0 + K_3) = hf(0.02, 1 - 0.017\,492\,751)$$
$$= 0.02f(0.02, 0.982\,507\,249) = 0.02\Big(-\frac{0.9 \times 0.982\,507\,249}{1 + 0.04}\Big)$$
$$= -0.017\,004\,933.$$

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) = 0.982\,505\,515.$$

$$y2 = \cdots$$

另两个常用的四级四阶R-K法的计算公式为：

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(K_1 + 4K_3 + K_4), \\ K_1 = hf(x_i, y_i), \\ K_2 = hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}K_1), \\ K_3 = hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{4}K_1 + \frac{1}{4}K_2), \\ K_4 = hf(x_i + h, y_i - K_2 + 2K_3). \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{1}{8}(K_1 + 3K_2 + 3K_3 + K_4), \\ K_1 = hf(x_i, y_i), \\ K_2 = hf(x_i + \frac{1}{3}h, y_i + \frac{1}{3}K_1), \\ K_3 = hf(x_i + \frac{2}{3}h, y_i - \frac{1}{3}K_1 + K_2), \\ K_4 = hf(x_i + h, y_i + K_1 - K_2 + K_3). \end{cases}$$

六级五阶英格兰（England）公式：

$$
\begin{cases}
y_{i+1} = y_i + \frac{1}{24}K_1 + \frac{5}{48}K_4 + \frac{27}{56}K_5 + \frac{125}{336}K_6, \\
K_1 = hf(x_i, y_i), \\
K_2 = hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}K_1), \\
K_3 = hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{4}K_1 + \frac{1}{4}K_2), \\
K_4 = hf(x_i + h, y_i - K_2 + 2K_3), \\
K_5 = hf\left(x_i + \frac{2}{3}h, y_i + \frac{7}{27}K_1 + \frac{10}{27}K_2 + \frac{1}{27}K_4\right), \\
K_6 = hf\left(x_i + \frac{1}{5}h, y_i + \frac{1}{625}(28K_1 - 125K_2 + 546K_3 + 54K_4 - 378K_5)\right)
\end{cases}
$$

1. 用待定系数法建立线性多步法

线性多步法一般形式如下

$$y_{i+1}=\sum_{j=0}^{k}\alpha_j y_{i-j}+h\sum_{j=-1}^{k}\beta_j f_{i-j},$$

其中α_j,β_j是常数，$f_{i-j}=f(x_{i-j},y_{i-j})$. **当$\beta_{-1}=0$时，是显式公式（法）；当$\beta_{-1}\neq 0$时，是隐式公式（法）**.局部截断误差为

$$\begin{aligned}R[y]&=y(x_{i+1})-y_{i+1}=y(x_{i+1})-\sum_{j=0}^{k}\alpha_j y_{i-j}-h\sum_{j=-1}^{k}\beta_j f_{i-j}\\&=y(x_{i+1})-\sum_{j=0}^{k}\alpha_j y(x_{i-j})-h\sum_{j=-1}^{k}\beta_j y'(x_{i-j}).\end{aligned}$$

待定系数法建立线性多步法的思想是：用待定系数法确定局部截断误差$R[y]$中的系数α_j,β_j，应使它的阶尽可能的高，然后用广义佩亚诺定理确定其误差项 .

例9.3 确定以下求解公式的系数和局部截断误差.

$$y_{i+1} = \alpha_0 y_i + \alpha_1 y_{i-1} + \alpha_2 y_{i-2} + h(\beta_{-1} f_{i+1} + \beta_0 f_i + \beta_1 f_{i-1}).$$

解

$$\begin{aligned} R[y] &= y(x_{i+1}) - y_{i+1} \\ &= y(x_i + h) - \alpha_0 y(x_i) - \alpha_1 y(x_i - h) - \alpha_2 y(x_i - 2h) \\ &\quad - h\big[\beta_{-1} y'(x_i + h) + \beta_0 y'(x_i) + \beta_1 y'(x_i - h)\big]. \end{aligned}$$

取 $x_i = 0$, 令 $R[x^k] = 0, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4.$ 得

$$\begin{cases} 1 - \alpha_0 - \alpha_1 - \alpha_2 = 0, \\ h\big[1 + \alpha_1 + 2\alpha_2 - (\beta_{-1} + \beta_0 + \beta_1)\big] = 0, \\ h^2\big[1 - \alpha_1 - 4\alpha_2 - 2(\beta_{-1} - \beta_1)\big] = 0, \\ h^3\big[1 + \alpha_1 + 8\alpha_2 - 3(\beta_{-1} + \beta_1)\big] = 0, \\ h^4\big[1 - \alpha_1 - 16\alpha_2 - 4(\beta_{-1} - \beta_1)\big] = 0. \end{cases}$$

方程组含有五个方程，六个未知量，故有一个未知量可以任意选取. 设α_1任意，则可解得

$$\alpha_0=\tfrac{9}{8}(1-\alpha_1),\ \alpha_2=-\tfrac{1}{8}(1-\alpha_1),\ \beta_{-1}=\tfrac{1}{24}(9-\alpha_1),$$
$$\beta_0=\tfrac{1}{12}(9+7\alpha_1),\ \beta_2=\tfrac{1}{24}(-9+17\alpha_1).$$

（1）取$\alpha_1=1$，则

$$\alpha_0=0,\ \alpha_2=0,\ \beta_{-1}=1/3,\ \beta_0=4/3,\ \beta_1=1/3$$

得辛普生公式

$$y_{i+1}=y_{i-1}+\frac{h}{3}(f_{i+1}+4f_i+f_{i-1}).$$

$$R[y]=y(x_{i+1})-y_{i+1}=-\frac{h^5}{90}y^{(5)}(\xi_i).$$

（2）取$\alpha_1=0$，则

$$\alpha_0=9/8,\ \alpha_2=-1/8,\ \beta_{-1}=3/8,\ \beta_0=6/8,\ \beta_1=-3/8.$$

则得**哈明（Hamming）公式**

$$y_{i+1}=\frac{1}{8}\Big[9y_i-y_{i-2}+3h(f_{i+1}+2f_i-f_{i-1})\Big].$$

下面估计哈明公式的局部截断误差.

$$\begin{aligned}
R[y]&=y(x_{i+1})-y_{i+1}\\
&=y(x_{i+1})-\tfrac{1}{8}\Big\{9y(x_i)-y(x_{i-2})+3h\big[y'(x_{i+1})+2y'(x_i)-y'(x_{i-1})\big]\Big\}\\
&=y(x_i+h)-\tfrac{1}{8}\Big\{9y(x_i)-y(x_i-2h)+3h\big[y'(x_i+h)+2y'(x_i)\\
&\quad-y'(x_i-h)\big]\Big\}.
\end{aligned}$$

取$x_i=0$，令$y=x^5$，则$R[y]=-3h^5\neq0$. 所以哈明公式的代数精度$m=4$.

取$e(x)=\frac{1}{5!}y^{(5)}(\xi)(x-x_{i-1})^2(x-x_i)(x-x_{i+1})^2$. 注意到$e(x_{i-1})=e'(x_{i-1})=e(x_i)=e(x_{i+1})=e'(x_{i+1})=0$. 根据广义佩亚诺定理,

$$
\begin{aligned}
R[y] &= R[e(x)] \\
&= e(x_{i+1})-\tfrac{1}{8}\{9e(x_i)-e(x_{i-2})+3h[e'(x_{i+1})+2e'(x_i)-e'(x_{i-1})]\} \\
&= \tfrac{1}{8}e(x_{i-2})-\tfrac{3}{4}he'(x_i) \\
&= \tfrac{1}{8}\times\tfrac{1}{5!}y^{(5)}(\xi)h^2(-2h)(-3h)^2-\tfrac{3}{4}\times\tfrac{1}{5!}y^{(5)}(\xi)h^5 \\
&= -\tfrac{h^5}{40}y^{(5)}(\xi).
\end{aligned}
$$

同样，用待定系数法可以导出**米尔恩（Milne）公式**

$$y_{i+1}=y_{i-3}+\frac{4}{3}h(2f_i-f_{i-1}+2f_{i-2}).$$

$$R[y]=\frac{14}{45}h^5y^{(5)}(\xi).$$

待定系数法、预测-校正公式

实际应用中常将显式公式与同阶的隐式公式联合使用，用显式公式计算的结果作出y_{i+1} 的估计（称为预测），将其代入隐式法的等式右端后算出y_{i+1}的值（称为校正）. 通常，将Adams显式公式与同阶的adams隐式公式联合使用，构成预测-校正公式.

如取$k=1$，得预测-校正公式

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(0)} = y_i + \frac{h}{2}(3f_i - f_{i-1}), \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left[f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(0)}) + f_i\right]. \end{cases}$$

取$k=2$，则得预测-校正公式

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(0)} = y_i + \frac{h}{12}(23f_i - 16f_{i-1} + 5f_{i-2}), \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12}\left[5f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(0)}) + 8f_i - f_{i-1}\right]. \end{cases}$$

$k=3$，则得预测-校正公式

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(0)} = y_i + \frac{h}{24}(55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}), \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}\left[9f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(0)}) + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}\right]. \end{cases}$$

又如用米尔恩公式作预测，用哈明公式作校正，构成最常用的一个预测-校正公式

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(0)} = y_{i-3} + \frac{4}{3}h(2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}), \\ y_{i+1} = \frac{1}{8}(9y_i - y_{i-2}) + \frac{3}{8}h\left[f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(0)}) + 2f_i - f_{i-1}\right]. \end{cases}$$

3. 预测-修正-校正-修正公式

$$p_{i+1} = y_{i-3} + \tfrac{4}{3}h(2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}) \quad R[y] = \tfrac{14}{45}h^5 y^{(5)}(\xi).$$

$$y_{i+1} = \frac{1}{8}\left[9y_i - y_{i-2} + 3h(f_{i+1} + 2f_i - f_{i-1})\right] \quad R[y] = -\frac{h^5}{40}y^{(5)}(\xi).$$

$$y_{i+1} - p_{i+1} = \frac{121}{360}h^5 y^{(5)}(\xi) \Rightarrow \begin{array}{l} y(x_{i+1}) \approx p_{i+1} + \frac{112}{121}(y_{i+1} - p_{i+1}), \\ y(x_{i+1}) \approx y_{i+1} - \frac{9}{121}(y_{i+1} - p_{i+1}). \end{array}$$

修正哈明预测-校正公式:

$$\begin{cases} p_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4}{3}h(2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}), \\ m_{i+1} = p_{i+1} + \frac{112}{121}(c_i - p_i), \\ c_{i+1} = \frac{1}{8}(9y_i - y_{i-2}) + \frac{3}{8}h\left[f(x_{i+1}, m_{i+1}) + 2f_i - f_{i-1}\right], \\ y_{i+1} = c_{i+1} - \frac{9}{121}(c_{i+1} - p_{i+1}). \end{cases}$$

其中m_{i+1}为p_{i+1}的修正值，c_{i+1}为校正值，y_{i+1}为c_{i+1}的修正值.

例9.3 待定系数法确定以下求解公式使其具有4阶精度.

$$y_{i+1} = \alpha_0 y_i + \alpha_1 y_{i-1} + \alpha_2 y_{i-2} + h(\beta_{-1} f_{i+1} + \beta_0 f_i + \beta_1 f_{i-1}).$$

解 泰勒展开

$$y(x_i + jh) = y(x_i) + jy'(x_i)h + \frac{1}{2!}y''(x_i)j^2h^2 + \frac{1}{3!}y'''(x_i)j^3h^3$$

$$+\frac{1}{4!}y^{(4)}(x_i)j^4h^4 + O(h^5) \qquad j = 1, -1, -2$$

$$f_{i+j} = y'(x_i+jh) = y'(x_i)+jy''(x_i)h+\frac{1}{2!}y'''(x_i)j^2h^2+\frac{1}{3!}y^{(4)}(x_i)j^3h^3$$

$$+O(h^4) \qquad j = 1, -1$$

待定系数法

$$
\begin{aligned}
R[y] &= y(x_i+h) - \alpha_0 y(x_i) - \alpha_1 y(x_i-h) - \alpha_2 y(x_i-2h) \\
&\quad - h\big[\beta_{-1} y'(x_i+h) + \beta_0 y'(x_i) + \beta_1 y'(x_i-h)\big] \\
&= [1-\alpha_0-\alpha_1-\alpha_2] y(x_i) + h\big[1+\alpha_1+2\alpha_2-(\beta_{-1}+\beta_0+\beta_1)\big] y'(x_i) \\
&\quad + \frac{h^2}{2}\big[1-\alpha_1-4\alpha_2-2(\beta_{-1}-\beta_1)\big] y''(x_i) \\
&\quad + \frac{h^3}{3!}\big[1+\alpha_1+8\alpha_2-3(\beta_{-1}+\beta_1)\big] y'''(x_i) \\
&\quad + \frac{h^4}{4!}\big[1-\alpha_1-16\alpha_2-4(\beta_{-1}-\beta_1)\big] + O(h^5) = 0 + O(h^5).
\end{aligned}
$$

得

$$
\begin{cases}
1-\alpha_0-\alpha_1-\alpha_2 = 0, \\
\big[1+\alpha_1+2\alpha_2-(\beta_{-1}+\beta_0+\beta_1)\big] = 0, \\
\big[1-\alpha_1-4\alpha_2-2(\beta_{-1}-\beta_1)\big] = 0, \\
\big[1+\alpha_1+8\alpha_2-3(\beta_{-1}+\beta_1)\big] = 0, \\
\big[1-\alpha_1-16\alpha_2-4(\beta_{-1}-\beta_1)\big] = 0.
\end{cases}
$$

一阶常微分方程组的初值问题：

$$
\begin{cases}
y_1'(x) = f_1\big(x, y_1(x), y_2(x), \cdots, y_n(x)\big), \\
y_2'(x) = f_2\big(x, y_1(x), y_2(x), \cdots, y_n(x)\big), \\
\vdots \\
y_n'(x) = f_n\big(x, y_1(x), y_2(x), \cdots, y_n(x)\big), \\
y_1(x_0) = y_{10},\ y_2(x_0) = y_{20},\ \cdots,\ y_n(x_0) = y_{n0}.
\end{cases}
$$

其中 $a \le x \le b$.

一阶微分方程组

若记

$$\mathbf{y}(x)=\left(y_1(x),y_2(x),\cdots,y_n(x)\right)^T,\quad \mathbf{y}_0=\left(y_{10},y_{20},\cdots,y_{n0}\right)^T,$$

$$\mathbf{f}(x,\mathbf{y})=(f_1(x,\mathbf{y}),f_2(x,\mathbf{y}),\cdots,f_n(x,\mathbf{y}))^T.$$

则微分方程组可以写成向量形式

$$\begin{cases} \mathbf{y}'(x)=\mathbf{f}(x,\mathbf{y}(x)), & a\le x\le b, \\ \mathbf{y}(a)=\mathbf{y}_0. \end{cases}$$

微分方程组初值问题在形式上与单个微分方程初值问题完全相同，只是数量函数在此变成了向量函数. 因此，求解单个一阶微分方程初值问题的数值方法，可以完全平移到求解一阶微分方程组的初值问题中，只不过是将单个方程中的函数换为向量函数即可.

一阶微分方程组

$$
\begin{cases}
\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + \frac{1}{6}(\mathbf{K}_1 + 2\mathbf{K}_2 + 2\mathbf{K}_3 + \mathbf{K}_4), \\
\mathbf{K}_1 = h\mathbf{f}(x_i, \mathbf{y}_i), \\
\mathbf{K}_2 = h\mathbf{f}(x_i + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_i + \frac{1}{2}\mathbf{K}_1), \\
\mathbf{K}_3 = h\mathbf{f}(x_i + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_i + \frac{1}{2}\mathbf{K}_2), \\
\mathbf{K}_4 = h\mathbf{f}(x_i + h, \mathbf{y}_i + \mathbf{K}_3).
\end{cases}
\tag{2}
$$

其分量形式为：

$$
\begin{cases}
y_{i+1,j} = y_{i,j} + \frac{1}{6}(K_{1j} + 2K_{2j} + 2K_{3j} + K_{4j}), \\
K_{1j} = hf_j(x_i; y_{i1}, y_{i2}, \cdots, y_{in}), \\
K_{2j} = hf_j(x_i + \frac{h}{2}; y_{i1} + \frac{K_{11}}{2}, y_{i2} + \frac{K_{12}}{2}, \cdots, y_{in} + \frac{K_{1n}}{2}), \quad j = 1, 2, \cdots, n \\
K_{3j} = hf_j(x_i + \frac{h}{2}; y_{i1} + \frac{K_{21}}{2}, y_{i2} + \frac{K_{22}}{2}, \cdots, y_{in} + \frac{K_{2n}}{2}), \\
K_{4j} = hf_j(x_i + h; y_{i1} + K_{31}, y_{i2} + K_{32}, \cdots, y_{in} + K_{3n}).
\end{cases}
$$

高阶常微分方程

m阶常微分方程初值问题为

$$\begin{cases} y^{(m)} = f(x, y, y', y'', \cdots, y^{(m-1)}), & a \leq x \leq b, \\ y(a) = y_0,\ y'(a) = y_0', \cdots,\ y^{(m-1)}(a) = {y_0}^{(m-1)}. \end{cases}$$

求解高阶微分方程初值问题是将其转化为一阶微分方程组来求解. 为此引进新的变量$y_1 = y$, $y_2 = y'$, $\cdots$, $y_m = y^{(m-1)}$, 即可将m 阶微分方程转化为如下的一阶微分方程组.

$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ y_2' = y_3, \\ \cdots \\ y_{m-1}' = y_m, \\ y_m' = f(x, y_1, y_2, \cdots, y_m), \\ y_1(a) = y_0, y_2(a) = y_0', \cdots, y_m(a) = y_0^{(m-1)}. \end{cases}$$

例：将下列高阶微分方程化为一阶微分方程组初值问题：

$$\begin{cases} y'' - 2y' + 2y = e^{2x}\sin x, \quad 0 \le x \le 1, \\ y(0) = -0.4, \quad y'(0) = -0.6. \end{cases}$$

解 令$y_1 = y, y_2 = y'$,则原二阶微分方程化为一阶微分方程组

$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ y_2' = e^{2x}\sin x - 2y_1 + 2y_2, \\ y_1(0) = -0.4, \quad y_2(0) = -0.6. \end{cases}$$

再用标准的四级四阶龙格-库塔法求解

$$\mathbf{K}_1 = h\mathbf{f}(x_i, \mathbf{y}_i) = h\begin{pmatrix} y_{2i} \\ e^{2x_i}\sin x_i - 2y_{1i} + 2y_{2i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_{11} \\ K_{12} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{K}_2 = h\mathbf{f}(x_i + \tfrac{1}{2}h, \mathbf{y}_i + \tfrac{1}{2}\mathbf{K}_1) = \begin{pmatrix} K_{21} \\ K_{22} \end{pmatrix}$$

$$= h\begin{pmatrix} y_{2i} + \frac{1}{2}K_{12} \\ e^{2(x_i+h/2)}\sin(x_i + \frac{h}{2}) - 2(y_{1i} + \frac{K_{11}}{2}) + 2(y_{2i} + \frac{K_{12}}{2}) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{K}_3 = h\mathbf{f}(x_i + \tfrac{1}{2}h, \mathbf{y}_i + \tfrac{1}{2}\mathbf{K}_2) = \begin{pmatrix} K_{31} \\ K_{32} \end{pmatrix}$$

$$= h\begin{pmatrix} y_{2i} + \frac{1}{2}K_{22} \\ e^{2(x_i+h/2)}\sin(x_i + \frac{h}{2}) - 2(y_{1i} + \frac{K_{21}}{2}) + 2(y_{2i} + \frac{K_{22}}{2}) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{K}_4 = h\mathbf{f}(x_i + h, \mathbf{y}_i + \mathbf{K}_3)$$

$$= h\begin{pmatrix} y_{2i} + K_{32} \\ e^{2(x_i+h)}\sin(x_i + h) - 2(y_{1i} + K_{31}) + 2(y_{2i} + K_{32}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_{41} \\ K_{42} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + \tfrac{1}{6}(\mathbf{K}_1 + 2\mathbf{K}_2 + 2\mathbf{K}_3 + \mathbf{K}_4)$$

二阶常微分方程

$$y'' = f(x, y, y'), \quad a < x < b.$$

第一边值条件 $y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta.$

第二边值条件 $y'(a) = \alpha, \quad y'(b) = \beta.$

第三边值条件 $y'(a) - \alpha_0 y(a) = \alpha_1, \quad y'(b) + \beta_0 y(b) = \beta_1.$

其中$\alpha_0 \geq 0, \ \beta_0 \geq 0, \ \alpha_0 + \beta_0 > 0.$
微分方程分别结合第一、第二、第三边值条件，则称其为第一、第二、第三边值问题.

有限差分法是求解常微分方程边值问题的一种基本数值方法，该法用数值微分公式替代微分方程和边界条件中的导数，略去误差项，把微分方程离散化成一个差分方程组. 求解这个差分方程组，将差分方程组的解作为微分方程边值问题的近似解. 这种解称为差分解.

求解第一边值问题

$$\begin{cases} y''(x) - q(x)y(x) = f(x), \quad a < x < b, \\ y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta. \end{cases}$$

其中$q(x), f(x)$是已知函数且$q(x) \geq 0, \alpha, \beta$是已知常数.

小　结

1. 对于初值问题，介绍了数值微分法、数值积分法、基于泰勒展开的龙格-库塔法、待定系数法.
2. 讨论了显式单步法的收敛性和稳定性. 通常隐式法的绝对稳定性都比同类同阶的显式法好.
3. 四级四阶龙格-库塔法的精度高，是显式单步法，易于调节步长，计算过程稳定. 但它计算$f(x,y)$ 函数值的次数较多. 因此，适用于求解函数$f(x,y)$ 的表达式较简单的问题.
4. 线性多步法和由它构成的预测-校正公式，每一步计算函数值的次数少，但它需借助于其他方法提供开始值