第 6 章 常微分方程数值解

本章主要内容

(1) Euler 公式, 后退的 Euler 公式, 梯形公式, 改进的 Euler 公式, 局部截断误差和阶数

(2) Runge — Kutta 方法

(3) 单步法的收敛性和稳定性

(4) 线性多步法 (Admas 显式和隐式公式, 基于 Taylor 展开的线性多步法的构造)

本章讨论一阶常微分方程初值问题的数值解

$$\begin{cases} y' = f(x, y), & a \le x \le b, \\ y(a) = \eta. \end{cases} \tag{0.1}$$

假设

(1) $f(x, y), \dfrac{\partial f(x, y)}{\partial y}$ 连续.

(2) (0.1) 存在唯一解 $y(x)$ 且在 $[a, b]$ 上充分光滑.

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 (0.1) 的数值解, 是求初值问题 (0.1) 的解 $y(x)$ 在离散点 $x_i (i = 0, 1, \cdots, n)$ 处的近似值 y_i.

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 $y_i, y_{i-1}, \cdots, y_{i-r+1}$, 这类方法称为 $\boldsymbol{r}$ **步方法**.

1 Euler 公式

1.1 Euler 公式

将方程 (0.1) 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

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx. \tag{1.1}$$

应用 左矩形公式 近似右端积分得

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

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

$$y(x_{i+1}) \approx y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)), \quad 0 \le i \le n-1. \tag{1.2}$$

由初值条件有

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

代入 (1.2) 可得

$$y(x_1) \approx y(x_0) + hf(x_0, y(x_0)) = y_0 + hf(x_0, y_0). \tag{1.3}$$

一般地, 若已知 $y(x_i)$ 的近似值 y_i, 由 (1.2) 可得

$$y(x_{i+1}) \quad \approx y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) \approx y_i + hf(x_i, y_i) \equiv y_{i+1}. \tag{1.4}$$

综合 (1.3)-(1.4), 得到

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad i = 0, 1, \cdots, n-1. \tag{1.5}$$

称 (1.5) 为 Euler 公式. 由上式可依次得到

$$y_i, \quad 0 \leq i \leq n.$$

将 y_i 作为 $y(x_i)$ 的近似值. 其几何意义参见图2.1. Euler 公式是一个单步显式公式.

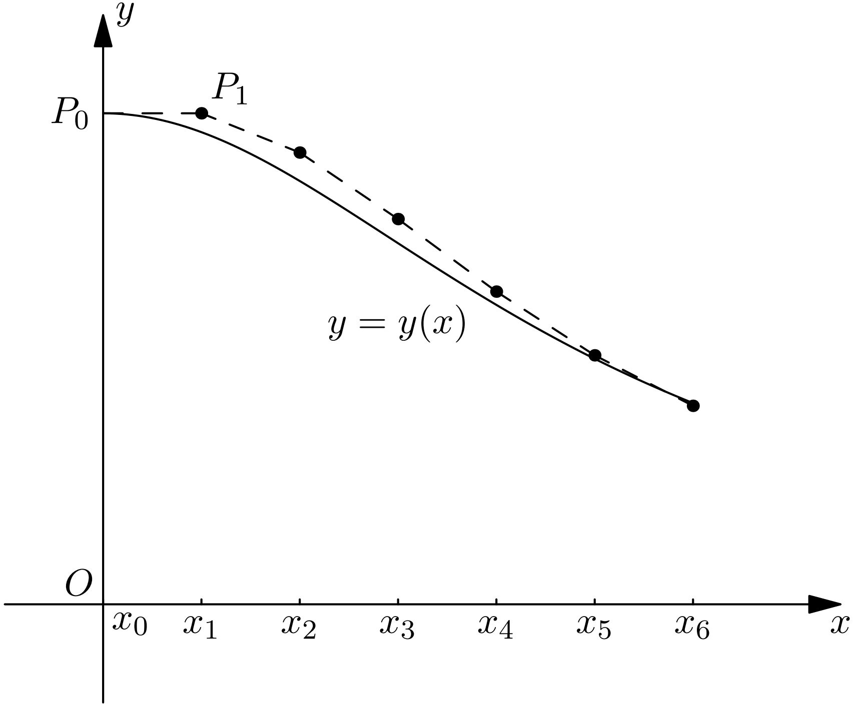

图 2.1　Euler 方法示意图

一般的单步显式公式为

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h\varphi(x_i, y_i, h), \\ y_0 = \eta, \end{cases} \tag{1.6}$$

其中, $\varphi(x, y, h)$ 称为**增量函数**.

定义 1.1 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 (1.6) 在点 x_{i+1} 处的**局部截断误差**.

由上述定义, Euler 公式 (1.5) 的局部截断误差为

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

1.2 后退的 Euler 公式

(1.1) 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

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

从而有

$$y(x_{i+1}) \approx y(x_i) + hf(x_{i+1}, y(x_{i+1})) \approx y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}),$$

得后退的 Euler 公式为

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}), \quad i = 0, 1, \cdots, n-1. \tag{1.7}$$

后退的 Euler 公式是单步隐式公式.

一般的单步隐式公式为

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h\psi(x_i, y_i, y_{i+1}, h), \quad i = 0, 1, \cdots, n-1, \\ y_0 = \eta, \end{cases} \tag{1.8}$$

其中 $\psi(x_i, y_i, y_{i+1}, h)$ 称为**增量函数**.

定义 1.2 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 (1.8) 的***局部截断误差***.

由定义 1.2, 后退的 Euler 公式的局部截断误差为

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

1.3 梯形公式

将 (1.1) 中积分用 梯形公式 近似得

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

其中

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

略去 $R_{i+1}^{(3)}$ 得

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &\approx y(x_i) + \frac{h}{2}[f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))] \\ &\approx y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})], \end{aligned}$$

所以得梯形公式

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})], \ i = 0, 1, \cdots, n-1. \tag{1.9}$$

它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

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

1.4 改进的 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

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

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

其局部截断误差为

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

用两种方法求上面的局部截断误差.

方法一: 由上式得

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

方法二 将 $y(x_{i+1})$ 在 x_i 点 Taylor 展开, 将 $f(x_{i+1}, y(x_i)+hf(x_i, y(x_i)))$ 在 $(x_i, y(x_i))$ 点 Taylor 展开

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

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

将上面两式代入误差式并利用 $y(x)$ 及其导数和 $f(x, y(x))$ 的关系

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

$$
\begin{aligned}
&- y(x_i) - \frac{1}{2}hy'(x_i) \\
&- \frac{1}{2}h\left[y'(x_i) + hy''(x_i) + \frac{1}{2}h^2\left(y'''(x_i) - y''(x_i)\frac{\partial f}{\partial y}(x_i, y(x_i))\right) + O(h^3)\right] \\
&= \left[-\frac{1}{12}y'''(x_i) + \frac{1}{4}y''(x_i)\frac{\partial f}{\partial y}(x_i, y(x_i))\right]h^3 + O(h^4).
\end{aligned}
$$

1.5 整体截断误差

设当步长为 h 时某种数值方法求得的数值解为 $y_1^{[h]}, y_2^{[h]}, \cdots, y_n^{[h]}$.

定义 1.3 设 $y(x_i), y_i^{[h]}, i = 1, 2, \cdots, n$, 分别为精确解和数值解, 则称

$$E(h) = \max_{1 \leq i \leq n} |y(x_i) - y_i^{[h]}| \tag{1.10}$$

为该数值方法的**整体截断误差**. 如果

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

则称该方法收敛.

定义 1.4 如果一个求解公式的局部截断误差为 $R_{i+1} = O(h^{p+1})$, 则称该公式是 $\boldsymbol{p}$ **阶的**, 或具有 $\boldsymbol{p}$ **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.

2 Runge-Kutta 方法

2.1 Runge-Kutta 方法的构造思想

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

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h\sum_{j=1}^{r}\alpha_j k_j, \\ k_1 = f(x_i, y_i), \\ k_j = f\left(x_i + \lambda_j h, y_i + h\sum_{l=1}^{j-1}\mu_{jl}k_l\right), \quad j = 2, 3, \cdots, r. \end{cases} \tag{2.1}$$

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 (2.1) 是 p 阶的.

2.2 2 阶 Runge-Kutta 公式

2 阶 Runge-Kutta 公式一般形式为

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h(\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2) \\ k_1 = f(x_i, y_i) \\ k_2 = f(x_i + \lambda_2 h, y_i + h\mu_{21} k_1) \end{cases} . \tag{2.2}$$

其局部截断误差是

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

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

$K_1 = y'(x_i)$,

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

将上面 3 式代入局部截断误差得

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

要使 (2.2) 具有 2 阶精度, 则

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

显然 α_2 不能为零. 当 $\alpha_2 \neq 0$, 可得

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

于是我们可以得到一类 2 阶 Runge-Kutta 公式

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

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

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

若 $\alpha_2 = \dfrac{3}{4}$, 则得

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

利用上述构造方法可以得到 3 阶或 4 阶等高阶 Runge-Kutta 公式.

3 单步法的收敛性和稳定性

3.1 收敛性

考虑单步显式公式

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h\varphi(x_i, y_i, h), \quad i = 0, 1, \cdots n-1, \\ y_0 = \eta. \end{cases} \tag{3.1}$$

定理 3.1 设 $y(x)$ 是微分方程 (0.1) 的解, $\{y_i\}_{i=0}^{n}$ 为单步显式公式 (3.1) 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 $h \le \min\left\{h_0, \sqrt[p]{\dfrac{\delta}{c}}\right\}$ 时, 有

$$E(h) \le ch^p.$$

其中

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

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

3.2 稳定性

定义 3.1 对于初值问题 (0.1), 设 $\{y_i\}_{i=0}^n$ 是由单步法 (3.1) 得到的的近似解, $\{z_i\}_{i=0}^n$ 是 (3.1) 扰动后的解, 即满足

$$\begin{cases} z_{i+1} = z_i + h[\varphi(x_i, y_i, h) + \delta_{i+1}], \quad i = 0, 1, \cdots n-1, \\ z_0 = \eta + \delta_0, \end{cases} \tag{3.2}$$

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 (3.1) 稳定.

定理 3.2 在定理 3.1 的条件下, 单步公式 (3.1) 是稳定的.

4 线性多步法

一般的线性 k 步方法为

$$y_{i+1} = \sum_{j=0}^{k-1} a_j y_{i-j} + h \sum_{j=-1}^{k-1} b_j f(x_{i-j}, y_{i-j}). \tag{4.1}$$

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.

定义 4.1 称

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

为 k 步公式 (4.1) 在点 x_{i+1} 处的局部截断误差. 当

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

时, 称 (4.1) 是 p 阶公式.

定义 4.2 如果线性 k 步公式 (4.1) 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.

4.1 基于积分的构造方法 —-Adams 公式

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

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx. \tag{4.2}$$

(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 $L_{i,r}(x)$, 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

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

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

将上式代入 (4.2) 得

$$
\begin{aligned}
& y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_{i,r}(x) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} R_{i,r}(x) dx \\
= \quad & y(x_i) + \sum_{j=0}^{r} f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) \int_{x_i}^{x_{i+1}} \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq j}}^{r} \frac{x - x_{i-l}}{x_{i-j} - x_{i-l}} dx \\
& + \frac{1}{(r+1)!} \int_{x_i}^{x_{i+1}} y^{(r+2)}(\eta_i) \prod_{j=0}^{r} (x - x_{i-j}) dx \\
= \quad & y(x_i) + h \sum_{j=0}^{r} f(x_{i-j}, y(x_{i-j}) \int_0^1 \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq j}}^{r} \frac{l+t}{l-j} dt \quad (\text{令} x = x_i + th)
\end{aligned}
$$

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

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

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) = \quad & y(x_i) + h\sum_{j=0}^{r}\beta_{rj}f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) \\ & +\alpha_{r+1}h^{r+2}y^{(r+2)}(\xi_i). \end{aligned} \tag{4.3}$$

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:

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=0}^{r} \beta_{rj} f(x_{i-j}, y_{i-j}). \tag{4.4}$$

(4.4) 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 (4.4) 是 $(r+1)$ 步、$(r+1)$ 阶显式的 Adams 公式.

(a) $r = 0$, 得 Euler 公式

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

(b) $r = 1$, 得

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

$$R_{i+1} = \frac{5}{12} h^3 y^{(3)}(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

(c) $r = 2$, 得

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12}[23f(x_i, y_i) - 16f(x_{i-1}, y_{i_1}) + 5f(x_{i-2}, y_{i-2})],$$

$$R_{i+1} = \frac{3}{8} h^4 y^{(4)}(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-2}, x_{i+1}).$$

(d) $r = 3$, 得

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

$$R_{i+1} = \frac{251}{720} h^5 y^{(5)}(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-3}, x_{i+1}).$$

(2) Admas 隐式公式

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 $L_{i,r}(x)$, 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

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

$$= \quad L_{i,r}(x) + \frac{1}{(r+1)!} y^{(r+2)}(\bar{\eta}_i) \prod_{j=-1}^{r-1} (x - x_{i-j}).$$

将上式代入 (4.2) 得

$$y(x_{i+1}) = y_(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_{i,r}(x)dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} R_{i,r}(x)dx$$

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &= y(x_i) + h \sum_{j=-1}^{r-1} \bar{\beta}_{rj} f(x_{i-j}, y(x_{i-j})) \\ &\quad + \bar{\alpha}_{r+1} h^{r+2} y^{(r+2)}(\bar{\xi}_i). \end{aligned} \tag{4.5}$$

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:

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=-1}^{r-1} \bar{\beta}_{rj} f(x_{i-j}, y_{i-j}). \tag{4.6}$$

(4.6) 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 (4.6) 是 r 步、$(r+1)$ 阶隐式的 Adams 公式.

(a) $r=1$, 得梯形公式

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

$$R_{i+1} = -\frac{1}{12} h^3 y'''(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_i, x_{i+1}).$$

(b) $r=2$, 得

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12}[5f(x_{i+1}, y_{i+1}) + 8f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_{i-1})],$$

$$R_{i+1} = -\frac{1}{24} h^4 y^{(4)}(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

(c) $r=3$, 得

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

$$R_{i+1}=-\frac{19}{720}h^5y^{(5)}(\xi_i),\quad \xi_i\in(x_{i-2},x_{i+1}).$$

(3) Admas 预测校正方法

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:

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

又如将 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:

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(p)} = y_i + \dfrac{h}{24}[55f(x_i, y_i) - 59f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 37f(x_{i-2}, y_{i-2}) \\ \qquad - 9f(x_{i-3}, y_{i-3})], \\ y_{i+1} = y_i + \dfrac{h}{24}\Big[9f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(p)}) + 19f(x_i, y_i) \\ \qquad - 5f(x_{i-1}, y_{i-1}) + f(x_{i-2}, y_{i-2})\Big]. \end{cases}$$

4.2 基于 Taylor 展开的待定系数法

要构造下面的线性 k 步方法

$$y_{i+1}=\sum_{j=0}^{k-1}a_jy_{i-j}+h\sum_{j=-1}^{k-1}b_jf(x_{i-j},y_{i-j}). \tag{4.7}$$

求系数 a_j,b_j, 使公式具有一定的阶数. 局部截断误差为:

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

利用方程 (0.1) 和 Taylor 展开得

$$\begin{aligned}R_{i+1}&=y(x_{i+1})-\sum_{j=0}^{k-1}a_jy(x_{i-j})-h\sum_{j=-1}^{k-1}b_jy'(x_{i-j})\\&=\sum_{l=0}^{p+1}\frac{1}{l!}y^{(l)}(x_i)h^l+O(h^{p+2})\end{aligned}$$

$$-\sum_{j=0}^{k-1} a_j \left[\sum_{l=0}^{p+1} \frac{1}{l!} y^{(l)}(x_i)(-jh)^l + O(h^{p+2})\right]$$

$$-h \sum_{j=-1}^{k-1} \left[b_j \sum_{l=0}^{p} \frac{1}{l!} y^{(l+1)}(x_i)(-jh)^l + O(h^{p+1})\right]$$

$$= (1 - \sum_{j=0}^{k-1} a_j) y(x_i)$$

$$+ \sum_{l=1}^{p+1} \frac{1}{l!} \left[1 - \sum_{j=0}^{k-1} (-j)^l a_j - l \sum_{j=-1}^{k-1} (-j)^{l-1} b_j\right] h^l y^{(l)}(x_i) + O(h^{p+2}).$$

要使公式 (4.7) 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

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

例 4.1 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

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

$$= y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2} y''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} y^{(4)}(x_i)$$

$$+ \frac{h^5}{5!} y^{(5)}(x_i) + O(h^6)$$

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

$$+\left(\frac{1}{120}+\frac{\alpha}{120}-\frac{\beta_0}{24}-\frac{\beta_2}{24}\right)h^5y^{(5)}(x_i)+O(h^6).$$

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

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

所以该公式是 4 阶公式.

5 习 题

p.305-307
1, 3, 4, 6, 7, 8, 10, 23(上机题)

数值积分公式

左矩形公式

$$\int_a^b g(x)dx = (b-a)g(a) + \frac{(b-a)^2}{2}g'(\xi), \quad \xi \in (a,b).$$

右矩形公式

$$\int_a^b g(x)dx = (b-a)g(b) - \frac{(b-a)^2}{2}g'(\xi), \quad \xi \in (a,b).$$

中矩形公式

$$\int_a^b g(x)dx = (b-a)g\left(\frac{a+b}{2}\right) - \frac{(b-a)^3}{24}g''(\xi), \quad \xi \in (a,b).$$

梯形公式

$$\int_a^b g(x)dx = \frac{b-a}{2}[g(a)+b(b)] - \frac{(b-a)^3}{12}g''(\xi), \quad \xi \in (a,b).$$

一元函数 Taylor 展开

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \frac{h^3}{3!}y'''(x) + \cdots$$

二元函数 Taylor 展开

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

常用的几个公式

$$
\begin{aligned}
y'(x) &= f(x, y(x)) \\
y''(x) &= \frac{\partial f}{\partial x}(x, y(x)) + y'(x)\frac{\partial f}{\partial y}(x, y(x)) \\
y'''(x) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x, y(x)) + 2y'(x)\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x, y(x)) \\
&\quad + (y'(x))^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x, y(x)) + y''(x)\frac{\partial f}{\partial y}(x, y(x))
\end{aligned}
$$