第七章
常微分方程初值问题的数值解法

§1 引言

§2 几种简单的单步法

§3 Runge –Kutta方法

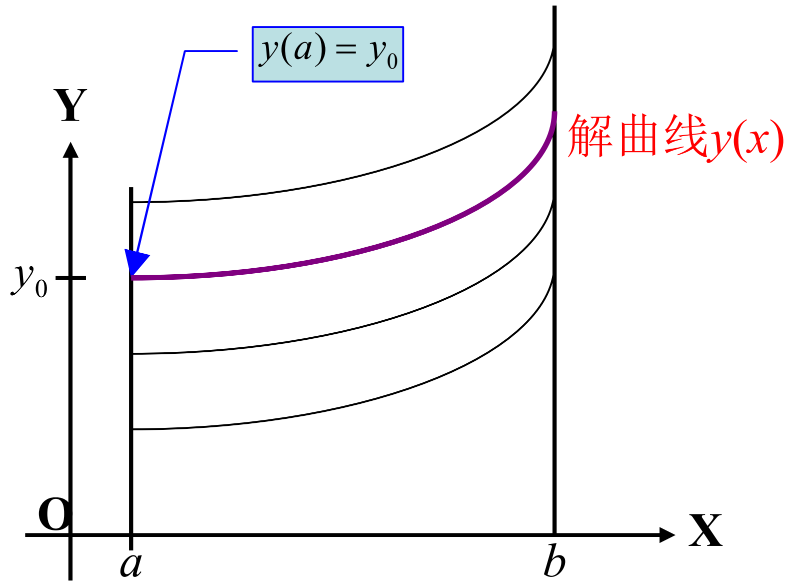
§4 线性多步法

§1 引 言

一 问题及基本假设

问题： 建立**一阶常微分方程初值问题**的数值解法。

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad a < x \le b$$
$$y(a) = y_0$$



对所讨论的一阶常微分方程初值问题，本章**假设该问题的解析解$y(x)$在区间$[a,b]$上存在、唯一，且具有充分的光滑度。**因此$f(x,y(x))$也充分光滑。

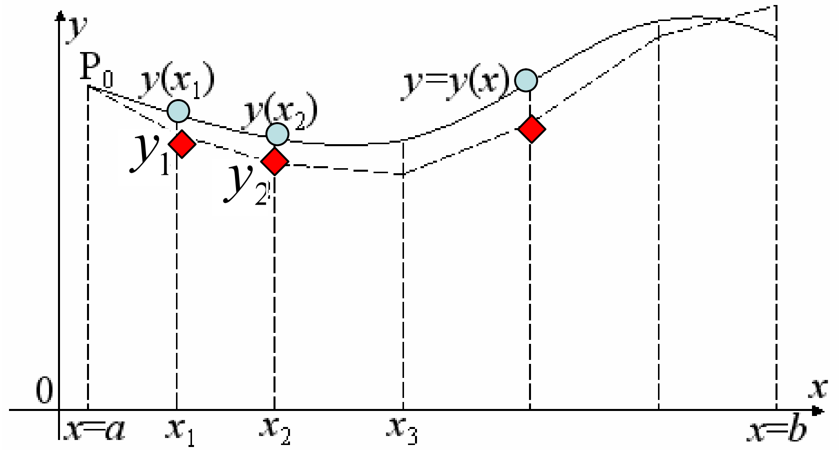
二 离散化方法

在$[a,b]$上取N+1个节点$a=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_N=b$

$h_n=x_n-x_{n-1}, n=1,2,\cdots,N$ 称为由x_{n-1}到x_n的步长。

为方便起见，常取步长相等，即$h=\dfrac{b-a}{N}$

常微分方程初值问题的数值解是求上述初值问题的解析解$y(x)$在区间$[a, b]$中点列$x_n=x_{n-1}+h_n$上的近似值。



通常节点x_n处微分方程的理论解记为$y(x_n)$

数值方法的精确解记为$y_n, n=1,2,\cdots,N$

常微分方程初值问题的数值解法分为：

① 单(一)步法： 计算y_{n+1}时，只用到x_{n+1}, x_n和 y_n，即前一步的值。

② 多步法： 计算y_{n+1} 时，除用到x_{n+1}, x_n和y_n外，还用到x_{n-p}和y_{n-p} $(p=1,2,\cdots k-1;\ k>1)$，即用到前k步的值。

对单步法与多步法，有显式与隐式方法之分。

显式单步法的一般形式为 $y_{n+1}=y_n+h\phi(x_n,y_n,h)$

隐式单步法的一般形式为 $y_{n+1}=y_n+h\phi(x_n,y_n,y_{n+1},h)$

显式、隐式多步法的一般形式类似。

常用的离散化方法：

Taylor展开法；差商直接代替微商；数值积分法。

注： $f(x,y(x))$关于y满足Lipschitz条件，指存在常数L，对任意$x\in[a,b]$，$|f(x,y)-f(x,\bar{y})|\le L|y-\bar{y}|$对$D$内任意两个$y,\bar{y}$均成立（$D=\{(x,y)|a\le x\le b,-\infty<y<+\infty\}$）。

§2 几种简单的单步法

设节点为$x_n = x_0 + nh\ (n = 1, 2, \cdots, N)$。求$x_n$处微分方程解析解$y(x_n)$的近似解$y_n, n = 1, 2, \cdots, N$。

一 显式Euler公式

① 将$y(x_n + h)$在x_n作Taylor级数展开

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2}y''(x_n) + \cdots$$
$$= y(x_n) + hf(x_n, y(x_n)) + \frac{h^2}{2}y''(x_n) + \cdots$$

取h的线性部分，并用y_n表示$y(x_n)$的近似值，得

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \quad (n = 0, 1, 2, \cdots, N-1)}$$

上述公式称为**（显式）Euler公式**。

由给定的初值，则可得到点列$x_n = x_{n-1} + h_n$上解析解$y(x_n)$的近似值$y_n\ (n = 1, 2, \cdots, N)$。

$y'(x) = f(x, y), \quad y(a) = y_0$

② 由 $y'(x)=f(x,y)$，有 $y'(x_n)=f(x_n,y(x_n))$

用数值微分的一阶两点公式(课本91页)

$$f'(x_0)=\frac{1}{h}(f(x_1)-f(x_0))-\frac{h}{2}f''(\xi)\quad \xi\in(x_0,x_1)$$

计算导数 $y'(x_n)$，得

$$\frac{1}{h}(y(x_{n+1})-y(x_n))-\frac{h}{2}y''(\xi)=y'(x_n)\ =f(x_n,y(x_n))$$

即 $$y(x_{n+1})=y(x_n)+hf(x_n,y(x_n))+\frac{h^2}{2}y''(\xi)$$

略去余项，并用 y_n 表示 $y(x_n)$的近似值，得到

（显式）Euler公式

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)\quad (n=0,1,\cdots,N-1)$$

③ 对微分方程 $y'(x)=f(x,y(x))$ 两端积分，得

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

用数值积分的左矩形公式（课本114页习题）

$$\int_a^b f(x)dx=(b-a)f(a)+\frac{(b-a)^2}{2}f'(\eta)$$

计算其积分，得

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+hf(x_n,y(x_n))+\frac{h^2}{2}f'(\eta,y(\eta))$$

略去余项，并用 y_n 表示 $y(x_n)$的近似值，得到

（显式）Euler公式

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)\quad (n=0,1,\cdots,N-1)$$

运用推导Euler公式的方法可以构造若干公式。

二 隐式Euler公式

① 把$y(x_n)$在x_{n+1}作Taylor级数展开

$$y(x_n)=y(x_{n+1})-hy'(x_{n+1})+\frac{h^2}{2}y''(x_{n+1})+\cdots$$
$$=y(x_{n+1})-hf(x_{n+1},y(x_{n+1}))+\frac{h^2}{2}y''(x_{n+1})+\cdots$$

取h的线性部分，并用y_n表示$y(x_n)$的近似值，得

$$\boxed{y_{n+1}=y_n+hf(x_{n+1},y_{n+1})\quad(n=0,1,2,\cdots,N-1)}$$

上述公式称为**隐式Euler公式**。

显式Euler公式是直接计算y_{n+1}的公式，这类公式称作**显式公式**；隐式Euler公式右端含有未知的y_{n+1}，它实际是一个关于y_{n+1}的函数方程，这类公式称作**隐式公式**。

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

② 由 $y'(x) = f(x, y)$，有 $y'(x_{n+1}) = f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$

用数值微分的一阶两点公式 (课本91页)

$$f'(x_1) = \frac{1}{h}(f(x_1) - f(x_0)) + \frac{h}{2} f''(\xi) \quad \xi \in (x_0, x_1)$$

计算导数 $y'(x_{n+1})$，得

$$\frac{1}{h}(y(x_{n+1}) - y(x_n)) + \frac{h}{2} y''(\xi) = f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$$

略去余项，并用 y_n 表示 $y(x_n)$的近似值，得到

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$$

即**隐式Euler公式**

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) \quad (n = 0, 1, \cdots, N-1)$$

③ 对微分方程 $y'(x)=f(x,y(x))$ 两端积分，得

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

用数值积分的右矩形公式（课本114页习题）

$$\int_a^b f(x)dx=(b-a)f(b)-\frac{(b-a)^2}{2}f'(\eta)$$

计算其积分，得

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+hf(x_{n+1},y(x_{n+1}))-\frac{h^2}{2}f'(\eta,y(\eta))$$

略去余项，并用 y_n 表示 $y(x_n)$的近似值，则得到**隐式Euler公式**

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_{n+1},y_{n+1})\quad (n=0,1,\cdots,N-1)$$

隐式公式一般很难直接求出 y_{n+1} 的值。通常**隐式Euler公式与显式Euler公式结合使用**。

公式

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)}=y_n+hf(x_n,y_n) \\ y_{n+1}^{(s+1)}=y_n+hf(x_{n+1},y_{n+1}^{(s)}) \quad s=0,1,2,\cdots \end{cases}$$

计算过程：

$n=0$ 显式 $y_1^{(0)}$ 隐式 $y_1^{(1)}, y_1^{(2)}, y_1^{(3)}, \cdots, y_1^{(s_1)}, y_1^{(s_1+1)}$ $s_1 = 0, 1, 2, \cdots$

当$\left|y_1^{(s_1+1)} - y_1^{(s_1)}\right| < \varepsilon$，取$y_1^{(s_1+1)} \approx y_1 \approx y(x_1)$；

$n=1$ 显式 $y_2^{(0)}$ 隐式 $y_2^{(1)}, y_2^{(2)}, y_2^{(3)}, \cdots, y_2^{(s_2)}, y_2^{(s_2+1)}$ $s_2 = 0, 1, 2, \cdots$

当$\left|y_2^{(s_2+1)} - y_2^{(s_2)}\right| < \varepsilon$，取$y_2^{(s_2+1)} \approx y_2 \approx y(x_2)$；……

当$f(x,y)$关于y满足Lipschitz条件，由

$$y_{n+1}^{(s+1)} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}^{(s)}) \qquad y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$$

得
$$\left|y_{n+1}^{(s+1)} - y_{n+1}\right| = h\left|f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(s)}) - f(x_{n+1}, y_{n+1})\right|$$
$$\le hL\left|y_{n+1}^{(s)} - y_{n+1}\right| \le (hL)^{s+1}\left|y_{n+1}^{(0)} - y_{n+1}\right|$$

故**当$hL<1$时，上述迭代公式的解收敛到隐式Euler公式的解**，其中L为Lipschitz常数。可取$L = \max\limits_{\substack{a\le x\le b \\ -\infty<y<+\infty}}\left|\frac{\partial f}{\partial y}\right|$。

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{(s+1)} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}^{(s)}) \quad s = 0, 1, 2, \cdots \end{cases}$$

三 梯形公式

对微分方程$y'(x)=f(x,y(x))$ 两端积分，得

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

为提高数值方法的精度，用梯形公式计算积分，得

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+\frac{h}{2}[f(x_n,y(x_n))+f(x_{n+1},y(x_{n+1})]-\frac{h^3}{12}f''(\eta,y(\eta))$$

略去余项，用y_n表示$y(x_n)$的近似值，得到**梯形公式**

$$\boxed{y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})]}$$

通常**梯形公式与显式Euler公式结合使用。**

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)}=y_n+hf(x_n,y_n) \\ y_{n+1}^{(s+1)}=y_n+\dfrac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1}^{(s)})] \quad s=0,1,2,\cdots \end{cases}$$

梯形公式 $\int_a^b f(x)dx=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$

梯形公式与显式Euler公式结合使用的计算过程与隐式Euler公式的实施类似。

设ε为给定的误差限，当$\left|y_{n+1}^{(s+1)} - y_{n+1}^{(s)}\right| < \varepsilon$，则取$y_{n+1}^{(s+1)}$作为$y_{n+1}$的近似值。

当$f(x,y)$关于y满足Lipschitz条件，由

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})]$$

$$y_{n+1}^{(s+1)} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(s)})]$$

得 $$\left|y_{n+1}^{(s+1)} - y_{n+1}\right| = \frac{h}{2}\left|f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(s)}) - f(x_{n+1}, y_{n+1})\right|$$

$$\le \frac{hL}{2}\left|y_{n+1}^{(s)} - y_{n+1}\right| \le \left(\frac{hL}{2}\right)^{s+1}\left|y_{n+1}^{(0)} - y_{n+1}\right|$$

故**当$hL/2<1$时，上述迭代公式收敛到梯形公式的解**，其中L为Lipschitz常数。

四　Euler-梯形预估校正公式

梯形公式提高了精度,但计算复杂。为简化计算只迭代一次，从而得到**Euler-梯形预估校正公式**

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)})] \end{cases}$$

预估算式

校正算式

计算过程:

n=0**显式** $y_1^{(0)}$**隐式** y_1；

n=1**显式** $y_2^{(0)}$**隐式** y_2；

……

Euler-梯形预估校正公式实为显式的单步法。

Euler-梯形预估校正公式也常写为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}(K_1 + K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f\left(x_n + h, y_n + hK_1\right) \end{cases}$$

五 单步法的局部截断误差和阶

设 y_n 为数值方法的精确值, $y(x_n)$ 为微分方程在 x_n 处的精确解。

定义 $e_{n+1}=y(x_{n+1})-y_{n+1}$ 为某一数值方法在 x_{n+1} 处的**整体截断误差**。

整体截断误差不仅与 x_{n+1} 这一步的计算有关，还依赖于前面 $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1, x_0$ 各步的计算。

下面分析计算中某一步的误差（局部截断误差），后面将对显式单步法，给出整体截断误差与局部截断误差之间的关系。

对单步显式公式 $y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, h)$

定义 $\boxed{R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\varphi(x_n, y(x_n), h)}$ 为**显式单步法**在 x_{n+1} 处的**局部截断误差**。

若假设 $y_n = y(x_n)$，则

$$R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\varphi(x_n, y(x_n), h)$$
$$= y(x_{n+1}) - \left[y_n + h\varphi(x_n, y_n, h)\right] = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$$

定义 在 $y_n = y(x_n)$的假设下,$R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$称为**显式单步法**在 x_{n+1}处的**局部截断误差**。

定义 若存在正整数p，使得某数值方法的局部截断误差为$O(h^{p+1})$，则称该方法为**p阶方法**。

定义 若一个p阶方法的局部截断误差可展开为

$$R_{n+1} = \psi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2})$$

则 $\psi(x_n, y(x_n))h^{p+1}$ 称为该方法的**主局部截断误差**或**局部截断误差的主项**。

对单步隐式公式 $y_{n+1}=y_n+h\varphi(x_n,y_n,x_{n+1},y_{n+1},h)$

定义 $R_{n+1}=y(x_{n+1})-y(x_n)-h\varphi(x_n,y(x_n),x_{n+1},y(x_{n+1}),h)$

为**隐式单步法**在 x_{n+1} 处的**局部截断误差**。

1 显式Euler方法的局部截断误差

$$
\begin{aligned}
R_{n+1} &= y(x_{n+1})-y(x_n)-hf(x_n,y(x_n)) \\
&= y(x_{n+1})-y(x_n)-hy'(x_n) \\
&= [y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2!}y''(x_n)+O(h^3)]-y(x_n)-hy'(x_n) \\
&= \frac{1}{2}h^2y''(x_n)+\mathrm{O}(h^3)
\end{aligned}
$$

即 $R_{n+1}=\dfrac{h^2}{2}y''(x_n)+O(h^3)$

显式Euler方法为一阶方法。

主局部截断误差为 $\dfrac{h^2}{2}y''(x_n)$

西 $y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)\quad(n=0,1,2,\cdots,N-1)$

2 梯形方法的局部截断误差

$$R_{n+1}=y(x_{n+1})-y(x_n)-\frac{h}{2}[f(x_n,y(x_n))+f(x_{n+1},y(x_{n+1}))]$$

$$=y(x_{n+1})-y(x_n)-\frac{h}{2}(y'(x_n)+y'(x_{n+1}))$$

$$=[y(x_n)+\underline{hy'(x_n)}+\underline{\frac{h^2}{2!}y''(x_n)}+\frac{h^3}{3!}y'''(x_n)+O(h^4)]$$

$$-y(x_n)-\underline{\frac{h}{2}y'(x_n)}+[-\underline{\frac{h}{2}y'(x_n)}-\underline{\frac{h^2}{2}y''(x_n)}-\frac{h^3}{2\times 2!}y'''(x_n)+O(h^4)]$$

$$=-\frac{h^3}{12}y'''(x_n)+O(h^4)$$

即 $R_{n+1}=-\frac{h^3}{12}y'''(x_n)+O(h^4)$

故梯形公式为二阶方法。

类似可证：隐式Euler公式为一阶方法。

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})]$$

3 Euler-梯形预测校正公式的局部截断误差

公式 $\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)})] \end{cases}$ 显式单步公式

$$R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - \frac{h}{2}\Big[f(x_n, y(x_n)) + f\big(x_{n+1}, y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))\big)\Big]$$

展开

$$= y(x_{n+1}) - y(x_n) - \frac{h}{2}y'(x_n) - \frac{h}{2}f\big(x_n + h, y(x_n) + hy'(x_n)\big)$$

在 $(x_n, y(x_n))$ 展开

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

代入

注意 $f\big(x_n + h, y(x_n) + hy'(x_n)\big) = f(x_n, y(x_n))$

$$+\left[h\frac{\partial f(x_n, y(x_n))}{\partial x} + hy'(x_n)\frac{\partial f(x_n, y(x_n))}{\partial y}\right]$$

$$+\frac{1}{2!}\Bigg[h^2\frac{\partial^2 f(x_n, y(x_n))}{\partial x^2} + 2h^2 y'(x_n)\frac{\partial^2 f(x_n, y(x_n))}{\partial x \partial y}$$

$$+ h^2\big(y'(x_n)\big)^2\frac{\partial^2 f(x_n, y(x_n))}{\partial y^2}\Bigg] + O(h^3)$$

$$R_{n+1}=y(x_{n+1})-y(x_n)-\frac{h}{2}y'(x_n)-\frac{h}{2}f\big(x_n+h,y(x_n)+hy'(x_n)\big)$$

$$=\left\{y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2}y''(x_n)+O(h^3)\right\}-y(x_n)-\frac{h}{2}y'(x_n)$$

$$-\frac{h}{2}\left\{f(x_n,y(x_n))+\left[h\frac{\partial f(x_n,y(x_n))}{\partial x}+hy'(x_n)\frac{\partial f(x_n,y(x_n))}{\partial y}\right]\right.$$

$$+\frac{1}{2!}\left[h^2\frac{\partial^2 f(x_n,y(x_n))}{\partial x^2}+2h^2y'(x_n)\frac{\partial^2 f(x_n,y(x_n))}{\partial x\partial y}\right.$$

$$\left.\left.+h^2\big(y'(x_n)\big)^2\frac{\partial^2 f(x_n,y(x_n))}{\partial y^2}\right]+O(h^3)\right\}$$

即 $$R_{n+1}=\frac{h^2}{2}y''(x_n)-\frac{h^2}{2}y''(x_n)+O(h^3)=O(h^3)$$

故**Euler-梯形预测校正公式为二阶方法**。

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

$$y''(x)=\frac{\partial f(x,y(x))}{\partial x}+y'(x)\frac{\partial f(x,y(x))}{\partial y}$$

§3 Runge –Kutta方法

一 Taylor级数展开法

运用Taylor公式可以构造高阶方法。

假定初值问题的解$y(x)$及函数$f(x, y(x))$充分光滑。

用Taylor公式建立k阶公式

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \cdots + \frac{h^k}{k!} y^{(k)}(x_n) + \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} y^{(k+1)}(x_n) + O(h^{k+2})$$

当h充分小时略去余项$O(h^{k+1})$，并设$y_n^{(k)} \approx y^{(k)}(x_n)$

则有k阶公式 $y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2!} y''_n + \cdots + \frac{h^k}{k!} y_n^{(k)}$

局部截断误差 $R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1} = \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} y^{(k+1)}(x_n) + O(h^{k+2})$

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2!}y''_n + \cdots + \frac{h^k}{k!}y_n^{(k)}$$

其中 $$y'_n = f(x, y)\big|_{(x_n, y_n)}$$

$$y''_n = f_x + ff_y\big|_{(x_n, y_n)}$$

$$y'''_n = f_{xx} + \underline{f_{xy}f} + (f_x + f_y f)f_y + \underline{f(f_{xy}} + f_{yy}f)\big|_{(x_n, y_n)}$$

$$= f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + (f_y^2 f + f_x f_y)\big|_{(x_n, y_n)}$$

$$\cdots \quad \cdots\ \cdots$$

Taylor级数展开法只要初值问题的真解充分光滑，就可以获得精确度较高的数值解。

缺点 计算高阶导数十分困难。

$$y'(x) = f(x, y(x)), \quad y''(x) = \frac{\partial f(x, y(x))}{\partial x} + y'(x)\frac{\partial f(x, y(x))}{\partial y}$$

例 设有常微分方程初值问题 $\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = x + y^2, \quad x > 0 \\ y(0) = 1 \end{cases}$

(1) 为求解该初值问题的数值解，写出二阶Taylor展开法的计算格式；

(2) 取步长h=0.1，用 (1) 中给出的格式求出解函数$y(x)$在x=0.2处的近似值（小数点后至少保留四位）。

解 (1) 由二阶Taylor展开公式有

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + y'(x_n)h + \frac{1}{2!}y''(x_n)h^2 + O(h^3)$$

注意 $y'(x) = x + y^2$，$y''(x) = 1 + 2yy' = 1 + 2xy + 2y^3$

略去$O(h^3)$项，用y_n表示$y(x_n)$的近似值，得计算格式

$$y_{n+1} = y_n + h(x_n + y_n^2) + \frac{h^2}{2}(1 + 2x_n y_n + 2y_n^3), n = 0, 1, \cdots$$

(2) 将 $h = 0.1, x_0 = 0, y_0 = 1$代入上式，得

$$y(0.1) \approx y_1 = 1.115 \qquad y(0.2) \approx y_2 = 1.2692$$

二 Runge—Kutta方法

目的：保留Taylor级数展开法精度较高的优点，并避免过多地计算$f(x,y(x))$的各阶偏导数。

Euler公式

$$y_{n+1} = y_n + hK_1$$
$$K_1 = f(x_n, y_n)$$

$$R_{n+1} = O(h^2)$$

Euler-梯形预估校正公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2)$$
$$K_1 = f(x_n, y_n)$$
$$K_2 = f\left(x_n + h, y_n + hK_1\right)$$

$$R_{n+1} = O(h^3)$$

基本思想：用不同点的函数值作线性组合构造近似公式，并要求近似公式与解的Taylor展式中前面若干项吻合，从而使近似公式达到一定的阶数。

R-K法的一般形式为

$$y_{n+1}=y_n+h\phi(x_n,y_n,h)=y_n+h(c_1K_1+c_2K_2+\cdots+c_rK_r)$$

$$K_1=f(x_n,y_n)$$

$$K_2=f\left(x_n+\alpha_2h,y_n+h\beta_{21}K_1\right)$$

$$K_3=f\left(x_n+\alpha_3h,y_n+h\beta_{31}K_1+h\beta_{32}K_2\right)$$

$$\vdots$$

$$K_r=f\left(x_n+\alpha_rh,y_n+h\beta_{r1}K_1+h\beta_{r2}K_2+\cdots+h\beta_{r,r-1}K_{r-1}\right)$$

其中 α_i,β_{ij},c_i 为常数。**选取**这些**常数的原则**是：
要求第一式右端与 (x_n,y_n) 处Taylor展式中的 $h^0,h^1,h^2,\cdots,h^p$ 项重合，从而构造*p*阶方法。

包含***r***个函数值的公式称为***r*级Runge –Kutta公式**。

下面构造**二级二阶R-K公式**。

设 $y_{n+1}=y_n+h(c_1K_1+c_2K_2)\quad c_2\neq 0$

$$K_1=f(x_n,y_n)$$
$$K_2=f\left(x_n+\alpha_2 h,y_n+h\beta_{21}K_1\right)$$

要求适当选取系数 $c_1,c_2,\alpha_2,\beta_{21}$，使上述二级R-K公式的局部截断误差为 $O(h^3)$。

做法 令 $R_{n+1}=y(x_{n+1})-y(x_n)-h\varphi(x_n,y(x_n),h)=O(h^3)$

考察系数 $c_1,c_2,\alpha_2,\beta_{21}$ 应如何取。

这里

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

$$R_{n+1}=y(x_{n+1})-y(x_n)$$
$$-h[c_1\underbrace{f(x_n,y(x_n))}_{y'(x_n)}+c_2\boxed{f\left(x_n+\alpha_2 h,y(x_n)+h\beta_{21}f(x_n,y(x_n))\right)}]$$

展开

注意 $f\left(x_n+\alpha_2 h, y(x_n)+h\beta_{21}f(x_n,y(x_n))\right)$

$$=f(x_n,y(x_n))+\left[\alpha_2 h\frac{\partial f}{\partial x}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}+h\beta_{21}f\frac{\partial f}{\partial y}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}\right]$$

$$+\frac{1}{2!}\left[(\alpha_2 h)^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}+2\alpha_2\beta_{21}h^2 f\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}+(h\beta_{21}f)^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}\right]$$

$$+O(h^3)$$

有 $R_{n+1}=\left[y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2!}y''(x_n)+\frac{h^3}{3!}y'''(x_n)+O(h^4)\right]$

$$-y(x_n)-hc_1y'(x_n)-hc_2y'(x_n)-hc_2\left[\alpha_2 h\frac{\partial f}{\partial x}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}+h\beta_{21}f\frac{\partial f}{\partial y}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}\right]-$$

$$-\frac{hc_2}{2!}\left[(\alpha_2 h)^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}+2\alpha_2\beta_{21}h^2 f\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}+(h\beta_{21}f)^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}\right]$$

$$+O(h^4)$$

$$R_{n+1}=y(x_{n+1})-y(x_n)-h\left[c_1 f(x_n,y(x_n))+c_2 f\left(x_n+\alpha_2 h, y(x_n)+h\beta_{21}f(x_n,y(x_n))\right)\right]$$

$$R_{n+1}=\left[y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2!}y''(x_n)+\frac{h^3}{3!}y'''(x_n)+O(h^4)\right]-y(x_n)-hc_1y'(x_n)$$

$$-hc_2y'(x_n)-hc_2\left[\alpha_2h\frac{\partial f}{\partial x}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}+h\beta_{21}f\frac{\partial f}{\partial y}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}\right]$$

$$-\frac{hc_2}{2!}\left[(\alpha_2h)^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}+2\alpha_2\beta_{21}h^2f\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}+(h\beta_{21}f)^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}\right]$$

$$+O(h^4)$$

$$R_{n+1}=(1-c_1-c_2)hy'(x_n)+h^2\left[\frac{\boxed{y''(x_n)}}{2}-c_2\alpha_2\frac{\partial f}{\partial x}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}-c_2\beta_{21}f\frac{\partial f}{\partial y}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}\right]$$

$$+h^3\left[\frac{\boxed{y'''(x_n)}}{3!}-\frac{c_2}{2}\alpha_2{}^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}-c_2\alpha_2\beta_{21}f\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}\right.$$

$$\left.-\frac{c_2}{2}(\beta_{21}f)^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}\right]+O(h^4)$$

由 $y' = f(x, y(x))$

有 $y'' = f_x + f_y \dfrac{dy}{dx} = f_x + ff_y$

$$y''' = f_{xx} + f_{xy}\frac{dy}{dx} + (f_x + f_y\frac{dy}{dx})f_y + f(f_{xy} + f_{yy}\frac{dy}{dx})$$

$$= f_{xx} + 2ff_{xy} + f^2 f_{yy} + f_y(f_x + ff_y)$$

将上述各式代入前面的局部截断误差：

$$R_{n+1} = (1 - c_1 - c_2)hy'(x_n) + h^2\left[\frac{y''(x_n)}{2} - c_2\alpha_2\frac{\partial f}{\partial x}\bigg|_{(x_n, y(x_n))} - c_2\beta_{21}f\frac{\partial f}{\partial y}\bigg|_{(x_n, y(x_n))}\right]$$

$$+ h^3\left[\frac{y'''(x_n)}{3!} - \frac{c_2}{2}\alpha_2^{\,2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\bigg|_{(x_n, y(x_n))} - c_2\alpha_2\beta_{21}f\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}\bigg|_{(x_n, y(x_n))}\right.$$

$$\left. - \frac{c_2}{2}(\beta_{21}f)^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\bigg|_{(x_n, y(x_n))}\right] + O(h^4)$$

$$R_{n+1}=(1-c_1-c_2)hy'(x_n)+h^2\left[\frac{1}{2}(f_x+ff_y)-c_2\alpha_2 f_x-c_2\beta_{21}ff_y\right]\Bigg|_{(x_n,y(x_n))}$$
$$+h^3\left[\frac{1}{6}[f_{xx}+2ff_{xy}+f^2f_{yy}+f_y(f_x+ff_y)]\right.$$
$$\left.-[\frac{c_2}{2}{\alpha_2}^2f_{xx}+c_2\alpha_2\beta_{21}ff_{xy}+\frac{c_2}{2}(\beta_{21}f)^2f_{yy}]\Big|_{(x_n,y(x_n))}\right]+O(h^4)$$

$$R_{n+1}=(1-c_1-c_2)hy'(x_n)\ +h^2\left[\left(\frac{1}{2}-c_2\alpha_2\right)f_x+\left(\frac{1}{2}-c_2\beta_{21}\right)ff_y\right]\Bigg|_{(x_n,y(x_n))}$$
$$+h^3\left[\left(\frac{1}{6}-\frac{1}{2}c_2\alpha_2^2\right)f_{xx}+\left(\frac{1}{3}-c_2\alpha_2\beta_{21}\right)ff_{xy}+\left(\frac{1}{6}-\frac{1}{2}c_2\beta_{21}^2\right)f^2f_{yy}\right.$$
$$\left.+\frac{1}{6}f_y(f_x+ff_y)\right]\Bigg|_{(x_n,y(x_n))}\qquad+O(h^4)$$

$$R_{n+1}=(1-c_1-c_2)hy'(x_n)+h^2\left[\frac{y''(x_n)}{2}-c_2\alpha_2\frac{\partial f}{\partial x}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}-c_2\beta_{21}f\,\frac{\partial f}{\partial y}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}\right]$$
$$+h^3\left[\frac{y'''(x_n)}{3!}-\frac{c_2}{2}{\alpha_2}^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}-c_2\alpha_2\beta_{21}f\,\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}-\frac{c_2}{2}(\beta_{21}f)^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\bigg|_{(x_n,y(x_n))}\right]$$
$$+O(h^4)$$

令 $R_{n+1}=O(h^3)$ 有 $c_1+c_2=1 \quad c_2\alpha_2=\frac{1}{2} \quad c_2\beta_{21}=\frac{1}{2}$

在二级方法 $y_{n+1}=y_n+h(c_1K_1+c_2K_2)$ 中，$c_2\neq 0$。

故方程 $\begin{cases} c_1+c_2=1, \\ c_2\alpha_2=\frac{1}{2}, \\ c_2\beta_{21}=\frac{1}{2} \end{cases}$ 也可写为 $\begin{cases} c_1=1-c_2 \\ \alpha_2=\beta_{21}=\frac{1}{2c_2} \end{cases}$

$$R_{n+1}=(1-c_1-c_2)hy'(x_n)+h^2\left[\left(\frac{1}{2}-c_2\alpha_2\right)f_x+\left(\frac{1}{2}-c_2\beta_{21}\right)ff_y\right]\Bigg|_{(x_n,y(x_n))}$$
$$+h^3\left[\left(\frac{1}{6}-\frac{1}{2}c_2\alpha_2^2\right)f_{xx}+\left(\frac{1}{3}-c_2\alpha_2\beta_{21}\right)ff_{xy}+\left(\frac{1}{6}-\frac{1}{2}c_2\beta_{21}^2\right)f^2f_{yy}\right.$$
$$\left.+\frac{1}{6}f_y(f_x+ff_y)\right]\Bigg|_{(x_n,y(x_n))}+O(h^4)$$

上述方程的解都能使二级R-K方法成为二阶方法，**常用的二级二阶R-K方法**有：

① $c_1 = c_2 = \frac{1}{2}, \alpha_2 = \beta_{21} = 1$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2)$$
$$K_1 = f(x_n, y_n)$$
$$K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1)$$

Euler-梯形预估校正公式

② $c_1 = 0, c_2 = 1, \alpha_2 = \beta_{21} = \frac{1}{2}$

$$y_{n+1} = y_n + hK_2$$
$$K_1 = f(x_n, y_n)$$
$$K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1)$$

中（间）点格式

$$c_1 = 1 - c_2 \qquad \alpha_2 = \beta_{21} = \frac{1}{2c_2}$$

③ $c_1=\frac{1}{4},\quad c_2=\frac{3}{4}, \alpha_2=\beta_{21}=\frac{2}{3}$

$$c_1=1-c_2, \alpha_2=\beta_{21}=\frac{1}{2c_2}$$

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{4}(K_1+3K_2)$$

$$K_1=f(x_n,y_n)$$

二阶Heun格式

$$K_2=f(x_n+\frac{2}{3}h, y_n+\frac{2}{3}hK_1)$$

可以验证：二阶Heun方法中的参数满足

$$\frac{1}{6}-\frac{1}{2}\alpha_2^2c_2=0,\quad \frac{1}{3}-\alpha_2\beta_{21}c_2=0,\quad \frac{1}{6}-\frac{1}{2}\beta_{21}^2c_2=0$$

$$R_{n+1}=\frac{h^3}{6}f_y(f_x+ff_{yy})\Big|_{(x_n,y_n)}+O(h^4)$$

即二阶Heun方法是**局部截断误差项数最少**的方法；且二级R-K方法不可能达到三阶。

$$R_{n+1}=h^3\left[\left(\frac{1}{6}-\frac{1}{2}c_2\alpha_2^2\right)f_{xx}+\left(\frac{1}{3}-c_2\alpha_2\beta_{21}\right)ff_{xy}+\left(\frac{1}{6}-\frac{1}{2}c_2\beta_{21}^2\right)f^2f_{yy}\right.$$
$$\left.+\frac{1}{6}f_y(f_x+ff_y)\right]\Bigg|_{(x_n,y(x_n))}+O(h^4)$$

常用的标准四级四阶R-K方法

$$
\begin{aligned}
&y_{n+1}=y_n+\frac{h}{6}(K_1+2K_2+2K_3+K_4)\\
&K_1=f(x_n,y_n)\\
&K_2=f\left(x_n+\frac{1}{2}h,\ y_n+\frac{h}{2}K_1\right)\\
&K_3=f\left(x_n+\frac{1}{2}h,\ y_n+\frac{h}{2}K_2\right)\\
&K_4=f\left(x_n+h,\ y_n+hK_3\right)
\end{aligned}
$$

Remark

对于r=1，2，3，4级的R-K方法，可以得到r阶方法或低于r阶的方法。但可以证明，不存在五级方法是五阶的，即从四阶改进到五阶，要增加两级（每步要多计算两个点的函数值），因而四阶R-K方法比较常用。

三 单步法的收敛性和稳定性

注：前面公式均为**R-K**公式

1 整体截断误差与局部截断误差的关系

定理 若初值问题的显式单步法 $y_{n+1}=y_n+h\phi(x_n,y_n,h)$ 之局部截断误差为 $R_{n+1}=O(h^{p+1})(p\geq 1)$，且单步法中函数 $\phi(x,y,h)$ 关于y满足Lipschitz条件，则

$$e_{n+1}=y(x_{n+1})-y_{n+1}=O(h^p)$$

证明略

该定理表明：

显式单步法的整体截断误差比局部截断误差低一阶（隐式单步法有类似的结论）。即若显式单步法的整体截断误差为 $O(h^p)$，则该方法为p阶方法。

例 Euler-梯形预测校正方法的局部截断误差为 $\underline{O(h^3)}$，整体截断误差为 $\underline{O(h^2)}$。（二阶方法）

2 收敛性

对于初值问题，若一个显式单步方法产生的近似解对于 $[a,b]$ 内任一固定的$x_n = x_0 + nh$ ，均有 $\lim\limits_{\substack{h\to 0\\(n\to\infty)}} y_n = y(x_n)$ ，则称该单步法是收敛的。

Remarks

① 收敛性定义也可写成

$$\lim_{\substack{h\to 0\\(n\to\infty)}} e_n = \lim_{\substack{h\to 0\\(n\to\infty)}} (y(x_n) - y_n) = 0 \quad \text{其中 } x_n = x_0 + nh$$

② Euler法（显式和隐式）、梯形法、Euler-梯形预估校正法的数值解都收敛于解析解。

③ 收敛性只考虑截断误差，不考察舍入误差。

3 稳定性

实际计算中舍入误差的累积，会对后面的计算结果产生影响。

研究数值方法是否稳定，不可能也不必对每个不同的$f(x,y)$进行讨论。通常的做法是将满足一定条件的微分方程模型化。

若$f(x,y)$关于y满足Lipschitz条件，则针对模型方程 $y' = \lambda y$ 讨论，其中λ为复常数(给定)，或

$$\lambda = -\max_{\substack{a \le x \le b \\ -\infty < y < +\infty}} \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right|$$

为保证微分方程本身的稳定性，假定$\mathrm{Re}(\lambda) < 0$。

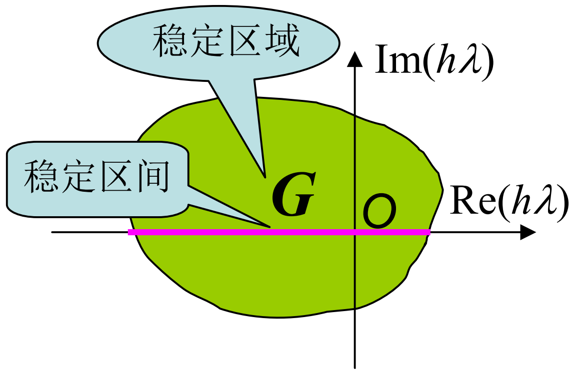
定义 步长为h的单步法用于求解 $y'=\lambda y$ 时，若在计算y_n时有误差δ_n，但在计算后面的$y_m(m>n)$中由δ_n引起的误差δ_m满足

$$|\delta_m| \le |\delta_n| \quad (m>n)$$

则称单步法对于步长h和复数λ是**绝对稳定**的。

单步法的稳定性与所用步长h和复数λ有关。

若对复平面上的某个区域G，当$\lambda h \in G$时，数值方法稳定，则称G为单步法的**稳定区域**。G与实轴的交集为**稳定区间**。



绝对稳定区域（区间）示意

当λ给定，稳定性条件给出了步长h的选取范围。

（1）显式Euler公式

将显式Euler公式用于模型方程$y' = \lambda y$：

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n = (1 + h\lambda) y_n$$

设y_n有误差δ_n，参与运算的量为$y_n + \delta_n$。

由此引起计算y_{n+1}的误差为δ_{n+1}，故

$$y_{n+1} + \delta_{n+1} = (1 + h\lambda)(y_n + \delta_n)$$

与前面公式相减，有 $\delta_{n+1} = (1 + \lambda h)\delta_n$

要求误差不增加，必须$|\delta_{n+1}| \le |\delta_n|$，即

$$\frac{|\delta_{n+1}|}{|\delta_n|} = |1 + h\lambda| \le 1$$

即**绝对稳定区域**为 $|1 + h\lambda| \le 1$

Remarks

① 扰动满足的公式形如数值解满足的公式。一般情况均具有这个规律。

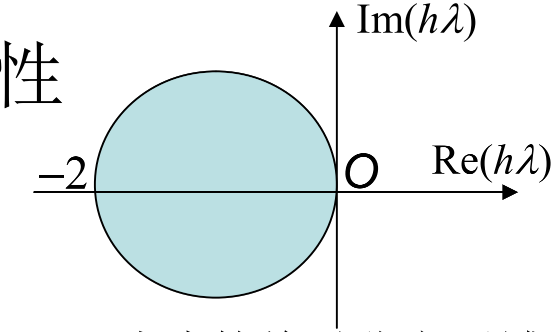
$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \quad (n = 0,1,2,\cdots)$$

② 设 $h\lambda = x + iy$，则 $|1 + h\lambda| \le 1 \quad \Leftrightarrow \quad |1 + x + iy| \le 1$

故显式Euler公式的绝对稳定区域为$(x+1)^2 + y^2 \le 1$。

当λ为实数 (微分方程稳定性要求λ<0)时，要求$-2 \le h\lambda < 0$，

故h满足 $0 < h \le -\dfrac{2}{\lambda}$



Euler公式的绝对稳定区域

若λ给定，$|1 + h\lambda| \le 1$ 是保证显式Euler公式绝对稳定性对步长h加的限制。一般绝对稳定区域越大，步长h选取的范围越大。

$\boxed{|1 + h\lambda| \le 1}$

例： 当步长$h\le$ ____时，显式Euler公式求解初值问题

$$\begin{cases} y' + 20y = 0, x > 1 \\ y(1) = 1 \end{cases}$$

是绝对稳定的。

解： 由稳定条件 $|1+h\lambda| \le 1$，即 $|1-20h| \le 1$，计算得到步长$h\le 0.1$时，显式Euler公式绝对稳定。

③ 步长h满足稳定性条件，只是舍入误差与初值误差对计算结果影响不大。但是，要使计算结果充分接近精确解，还需选取较小步长h。对于需迭代求解的隐式格式，步长h的选取还需满足收敛条件。

（2）隐式Euler公式

将隐式Euler公式用于模型方程$y' = \lambda y$：

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1} \quad \text{即} \quad y_{n+1} = \frac{y_n}{1-h\lambda}$$

设y_n有误差δ_n，参与运算的量为$y_n + \delta_n$。

由此引起计算y_{n+1}的误差为δ_{n+1}，故

$$y_{n+1} + \delta_{n+1} = \frac{1}{1-h\lambda}(y_n + \delta_n)$$

与前面公式相减，有 $\delta_{n+1} = \dfrac{1}{1-h\lambda}\delta_n$

令 $$\frac{|\delta_{n+1}|}{|\delta_n|} = \frac{1}{|1-h\lambda|} \le 1$$

得**绝对稳定区域**为$|1-\lambda h| \ge 1$

扰动满足的公式形如数值解满足的公式。

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) \quad (n = 0,1,2,\cdots)$$

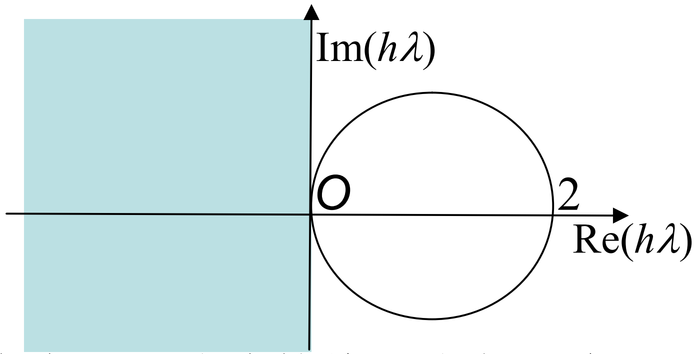
Remarks

① 若λ给定，$|1-\lambda h|\geq 1$ 是保证隐式Euler公式绝对稳定性对步长h的限制。

② 设 $h\lambda = x+iy$，则 $|1-h\lambda|\geq 1$ 即 $|1-x-iy|\geq 1$

或 $(x-1)^2+y^2\geq 1$

为保证微分方程本身的稳定性，隐式Euler公式的实际稳定性区域为左半平面，即Re(λh)<0。



隐式Euler公式的绝对稳定区域

③ 若Re(λ)<0时，数值公式对任意步长h>0总是稳定，则称该数值公式为无条件稳定 。

④ 隐式Euler法与显式Euler法局部截断误差的阶数相同，但隐式Euler公式的绝对稳定性较好。

$|1-\lambda h|\geq 1$

（3）梯形公式

将梯形公式公式用于模型方程 $y' = \lambda y$：

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[\lambda y_n + \lambda y_{n+1}] \quad \text{即} \quad y_{n+1} = \frac{1+\frac{1}{2}h\lambda}{1-\frac{1}{2}h\lambda} y_n$$

误差 δ_{n+1} 与 δ_n 满足 $\delta_{n+1} = \dfrac{1+\frac{1}{2}h\lambda}{1-\frac{1}{2}h\lambda}\delta_n$

令 $$\frac{|\delta_{n+1}|}{|\delta_n|} = \left|\frac{2+h\lambda}{2-h\lambda}\right| \le 1$$

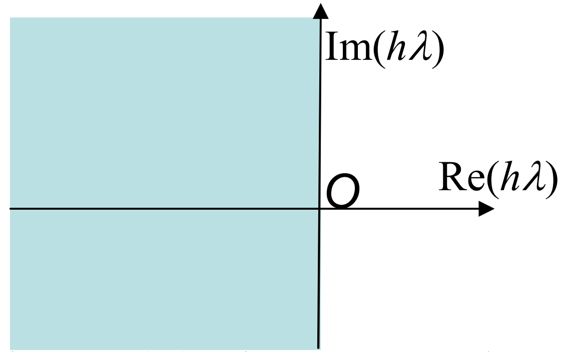
其**绝对稳定区域**为 $\left|\dfrac{2+h\lambda}{2-h\lambda}\right| \le 1$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})] \quad (n = 0,1,2,\cdots)$$

设 $h\lambda = x + iy$ 由于

$$\frac{|\delta_{n+1}|}{|\delta_n|} = \left|\frac{2+h\lambda}{2-h\lambda}\right| = \left|\frac{2+x+iy}{2-x-iy}\right|$$

$$= \left(\frac{(2+x)^2+y^2}{(2-x)^2+y^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$



梯形公式的绝对稳定区域

当 x=Re(λh)<0，上式右端总小于1。

因此，对于梯形公式的绝对稳定区域为Re(λh)<0，即左半平面。

由于微分方程稳定性要求Re(λ)<0，因此**梯形公式对任意步长h>0总是稳定，故梯形公式为无条件稳定**。

（4）四阶经典R-K方法

将四阶经典R-K公式用于模型方程 $y' = \lambda y$：

$$K_1 = \lambda y_n$$

$$K_2 = \lambda\left(y_n + \frac{1}{2} h K_1\right) = y_n\left(\lambda + \frac{1}{2} h \lambda^2\right)$$

$$K_3 = \lambda\left(y_n + \frac{1}{2} h K_2\right) = y_n\left[\lambda + \frac{1}{2}\lambda h\left(\lambda + \frac{1}{2} h \lambda^2\right)\right]$$

$$= y_n\left(\lambda + \frac{1}{2} h \lambda^2 + \frac{1}{4} h^2 \lambda^3\right)$$

$$K_4 = \lambda\left(y_n + h K_3\right) = y_n\left[\lambda + \lambda h\left(\lambda + \frac{1}{2} h \lambda^2 + \frac{1}{4} h^2 \lambda^3\right)\right]$$

$$= y_n\left(\lambda + h \lambda^2 + \frac{1}{2} h^2 \lambda^3 + \frac{1}{4} h^3 \lambda^4\right)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

$$K_1 = f(x_n, y_n), K_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} K_1\right), K_3 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} K_2\right), K_4 = f(x_n + h, y_n + h K_3)$$

故 $y_{n+1}=y_n+\frac{h}{6}(K_1+2K_2+2K_3+K_4)$

$$=y_n+\frac{h}{6}y_n\{\lambda+2(\lambda+\frac{1}{2}h\lambda^2)$$

$$+2(\lambda+\frac{1}{2}h\lambda^2+\frac{1}{4}h^2\lambda^3)+(\lambda+h\lambda^2+\frac{1}{2}h^2\lambda^3+\frac{1}{4}h^3\lambda^4)$$

$$=y_n(1+h\lambda+\frac{1}{2}(h\lambda)^2+\frac{1}{6}(h\lambda)^3+\frac{1}{24}(h\lambda)^4)$$

扰动满足 $\delta_{n+1}=\delta_n(1+h\lambda+\frac{1}{2}(h\lambda)^2+\frac{1}{6}(h\lambda)^3+\frac{1}{24}(h\lambda)^4)$

令 $\frac{|\delta_{n+1}|}{|\delta_n|}\le 1$，得绝对稳定区域为

$$\left|1+h\lambda+\frac{1}{2}(h\lambda)^2+\frac{1}{3!}(h\lambda)^3+\frac{1}{4!}(h\lambda)^4\right|\le 1$$

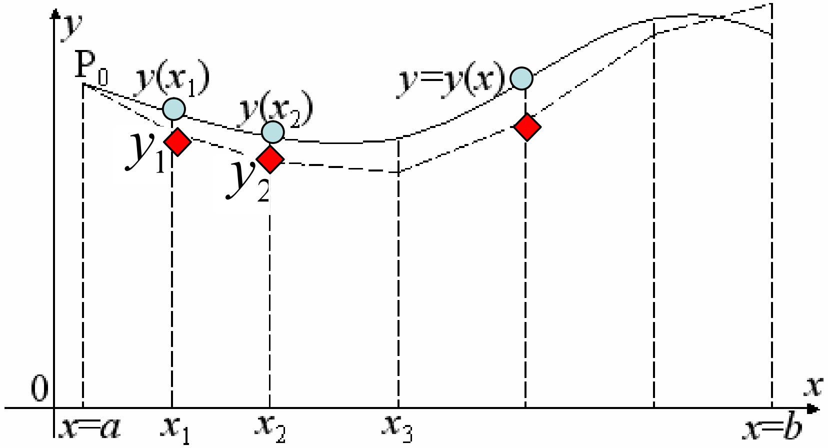
绝对稳定区间为 $[-2.78, 0]$。

借助计算机作图得到

$K_1=\lambda y_n, K_2=y_n(\lambda+\frac{1}{2}h\lambda^2), K_3=y_n(\lambda+\frac{1}{2}h\lambda^2+\frac{1}{4}h^2\lambda^3), K_4=y_n(\lambda+h\lambda^2+\frac{1}{2}h^2\lambda^3+\frac{1}{4}h^3\lambda^4])$

§4 线性多步法

单步法推进计算时，由y_0逐步获得$y_1, y_2, \ldots\ldots, y_n$。



标准四阶R-K公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

$$K_1 = f(x_n, y_n)$$

$$K_2 = f\left(x_n + \frac{1}{2}h,\ y_n + \frac{h}{2}K_1\right)$$

$$K_3 = f\left(x_n + \frac{1}{2}h,\ y_n + \frac{h}{2}K_2\right)$$

$$K_4 = f\left(x_n + h,\ y_n + hK_3\right)$$

采用标准四阶R-K公式（显式单步法），当由y_n计算y_{n+1}时，除计算$f(x_n, y_n)$外，还需计算三个非(x_n, y_n)处的函数值。

多步公式思想：利用已求出若干节点 $x_n, x_{n-1}, \dots$ 上的近似值 $y_n, y_{n-1}, \dots$ 和函数值 $f(x_n, y_n), f(x_{n-1}, y_{n-1}), \cdots$ 的线性组合计算下一个节点 x_{n+1} 处的近似值 y_{n+1}，以减少计算量且获得较高的精度。

设 $x_n = x_0 + nh$，$y(x_n)$ 的近似值为 y_n，并记 $f_n = f(x_n, y_n)$，***r*步线性多步公式**一般形式为

$$
\boxed{\begin{aligned} y_{n+1} &= \alpha_0 y_n + \alpha_1 y_{n-1} + \alpha_2 y_{n-2} + \alpha_3 y_{n-3} + \cdots + \alpha_{r-1} y_{n-(r-1)} \\ &\quad + h(\beta_{-1} f_{n+1} + \beta_0 f_n + \beta_1 f_{n-1} + \beta_2 f_{n-2} + \cdots + \beta_{r-1} f_{n-(r-1)}) \end{aligned}}
$$

其中 α_i, β_i 为常数，α_r, β_r 不全为零。

当 $\beta_{-1} = 0$ 时为显式公式，当 $\beta_{-1} \neq 0$ 为隐式公式。

多步法每步只需新计算一个函数值。

对于线性多步法

$$y_{n+1}=\alpha_0 y_n+\alpha_1 y_{n-1}+\alpha_2 y_{n-2}+\alpha_3 y_{n-3}+\cdots+\alpha_{r-1}y_{n-(r-1)}$$
$$+h(\beta_{-1}f_{n+1}+\beta_0 f_n+\beta_1 f_{n-1}+\beta_2 f_{n-2}+\cdots+\beta_{r-1}f_{n-(r-1)})$$

定义 x_{n+1} 处的**局部截断误差**为

$$\boxed{\begin{aligned}R_{n+1}&=y(x_{n+1})-[\alpha_0 y(x_n)+\alpha_1 y(x_{n-1})+\alpha_2 y(x_{n-2})+\cdots+\alpha_{r-1}y(x_{n-r+1})]\\&-h[\beta_{-1}y'(x_{n+1})+\beta_0 y'(x_n)+\beta_1 y'(x_{n-1})+\cdots+\beta_{r-1}y'(x_{n-r+1})]\end{aligned}}$$

可以证明：若 $y_{n-i}=y(x_{n-i}),i=0,1,\cdots,r-1$

① 对显式多步法

局部截断误差 $R_{n+1}=y(x_{n+1})-y_{n+1}$

② 对隐式多步法

局部截断误差R_{n+1}的首项与 $y(x_{n+1})-y_{n+1}$的首项相同。

一般用两种方法(数值积分法与Taylor展开法)**构造**线性多步公式。

一 基于数值积分的构造方法

将 $y' = f(x, y(x))$ 两端从 x_{n-k} 到 x_{n+1} 积分，得

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

对 $f(t, y(t))$ 取 $p+1$ 个等距插值节点，构造 p 次Lagrange插值多项式。

当 k 与 p 取不同的值时，就可推导出不同的线性多步公式。

下面介绍常用的四阶Admas显式、隐式公式。

1 四阶Adams显式（外插）公式

选择等距插值节点 $x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, x_{n-3}$，且取$k$=0。

记 $F(x) = f(x, y(x)), f_n = f(x_n, y_n)$，节点间距为$h$。

做$F(x)$的三次插值多项式

$$P_3(x) = l_n(x)F(x_n) + l_{n-1}(x)F(x_{n-1}) + l_{n-2}(x)F(x_{n-2}) + l_{n-3}(x)F(x_{n-3})$$

$$l_n(x) = \frac{(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})(x-x_{n-3})}{(x_n-x_{n-1})(x_n-x_{n-2})(x_n-x_{n-3})}$$

$$l_{n-1}(x) = \frac{(x-x_n)(x-x_{n-2})(x-x_{n-3})}{(x_{n-1}-x_n)(x_{n-1}-x_{n-2})(x_{n-1}-x_{n-3})}$$

$$l_{n-2}(x) = \frac{(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-3})}{(x_{n-2}-x_n)(x_{n-2}-x_{n-1})(x_{n-2}-x_{n-3})}$$

$$l_{n-3}(x) = \frac{(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})}{(x_{n-3}-x_n)(x_{n-3}-x_{n-1})(x_{n-3}-x_{n-2})}$$

$$\overline{R}_3(x) = \frac{1}{4!}F^{(4)}(\xi)(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})(x-x_{n-3}),\ x_{n-3} \le \xi \le x_n$$

在 $y(x_{n+1})=y(x_{n-k})+\int_{x_{n-k}}^{x_{n+1}} f(t,y(t))dt$ 中，取k=0，

则 $y(x_{n+1})=y(x_n)+\int_{x_n}^{x_{n+1}} P_3(x)dx+\int_{x_n}^{x_{n+1}} \overline{R}_3(x)dx$

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} P_3(x)dx$$

$$l_n(x)=\frac{(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})(x-x_{n-3})}{(x_n-x_{n-1})(x_n-x_{n-2})(x_n-x_{n-3})}$$

$$=\int_{x_n}^{x_{n+1}} \left(l_n(x)F(x_n)+l_{n-1}(x)F(x_{n-1})+l_{n-2}(x)F(x_{n-2})+l_{n-3}(x)F(x_{n-3})\right)dx$$

对积分区间做变量代换$\boxed{x=x_n+th}$，则$x\in[x_n,x_{n+1}]\leftrightarrow t\in[0,1]$

注意 $x_n-x_{n-1}=x_{n-1}-x_{n-2}=x_{n-2}-x_{n-3}=h$

则对 j=0,1,2,3，$x-x_{n-j}=(x_n+th)-(x_n-jh)=(t+j)h$

计算

$x_{n-i}-x_{n-j}=(x_n-ih)-(x_n-jh)=(-i+j)h$

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} l_n(x)dx=\int_{x_n}^{x_{n+1}} \frac{(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})(x-x_{n-3})}{(x_n-x_{n-1})(x_n-x_{n-2})(x_n-x_{n-3})}dx$$

$$=\int_0^1 \frac{(t+1)h\cdot(t+2)h\cdot(t+3)h}{h\cdot 2h\cdot 3h}hdt=\int_0^1 \frac{(t+1)(t+2)(t+3)}{3!}hdt$$

类似可得$\int_{x_n}^{x_{n+1}} l_{n-1}(x)dx,\int_{x_n}^{x_{n+1}} l_{n-2}(x)dx,\int_{x_n}^{x_{n+1}} l_{n-3}(x)dx$。

故 $\int_{x_n}^{x_{n+1}} P_3(x)dx = \int_0^1 \left[\frac{F(x_n)}{3!}(t+1)(t+2)(t+3) + \frac{F(x_{n-1})}{-2} t(t+2)(t+3) \right.$

$$\left. + \frac{F(x_{n-2})}{2} t(t+1)(t+3) + \frac{F(x_{n-3})}{-3!} t(t+1)(t+2) \right] hdt$$

$$= \frac{h}{24}\left[55F(x_n) - 59F(x_{n-1}) + 37F(x_{n-2}) - 9F(x_{n-3})\right]$$

由 $y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} P_3(x)dx + \int_{x_n}^{x_{n+1}} \overline{R}_3(x)dx$

得 $y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} P_3(x)dx$

注意 $F(x) = f(x, y(x))$，用数值解表示解析值的近似值，得**四步Adams显式公式**

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}\left(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}\right)}$$

局部截断误差为

$$R_{n+1}=\int_{x_n}^{x_{n+1}}\frac{1}{4!}F^{(4)}(\xi)(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})(x-x_{n-3})dx$$

$(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})(x-x_{n-3})$ 在积分区间不变号

当$F^{(4)}(x)$在积分区间上连续，则存在$\eta\in[x_n,x_{n+1}]$，

得 $R_{n+1}=\frac{1}{4!}F^{(4)}(\eta)\int_{x_n}^{x_{n+1}}(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})(x-x_{n-3})dx$

做变量代换 $x=x_n+th$ 则 $x\in[x_n,x_{n+1}]\leftrightarrow t\in[0,1]$

即 $R_{n+1}=\frac{251}{720}h^5F^{(4)}(\eta)=\frac{251}{720}h^5y^{(5)}(\eta)$ $F(x)=f(x,y(x))=y'(x)$

四步Adams显式公式为四阶方法。

由于插值多项式$P_3(x)$是在$[x_{n-3},x_n]$上做的，而积分区间是$[x_n,x_{n+1}]$，故上式也称为**四阶Adams外插公式**。

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+\int_{x_n}^{x_{n+1}}P_3(x)dx+\int_{x_n}^{x_{n+1}}\overline{R}_3(x)dx$$

对四步Adams显式公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}\left(55 f_n - 59 f_{n-1} + 37 f_{n-2} - 9 f_{n-3}\right)$$

已知y_0，需要四阶单步公式计算y_1, y_2, y_3。

Remarks

① 应用线性多步法求解初值问题时，初始几点处的函数值要用单步方法先计算出来。并且，应该选用与多步法同阶的单步法，如Runge-Kutta方法、Taylor方法等。

② 理论上可用Taylor展开法和Runge-Kutta方法，计算出发值。但由于Taylor展开法要计算高阶导数值，故最常用的方法还是选择与多步法同阶的Runge-Kutta方法。

2 四阶Adams隐式（内插）公式

若选等距插值节点 $x_{n+1},x_n,x_{n-1},x_{n-2}$， 仍取$k$=0。做$F(x)$的三次插值多项式，并类似于四步Adams显式公式的推导，可得**三步四阶Adams隐式公式**

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}\left(9f_{n+1}+19f_n-5f_{n-1}+f_{n-2}\right)\quad R_{n+1}=-\frac{19}{720}h^5y^{(5)}(\eta)$$

由于插值多项式$P_3(x)$是在$[x_{n-2},x_{n+1}]$上作的，而积分区间是$[x_n,x_{n+1}]$，故上式也称为**四阶Adams内插公式**。

相对四步Adams显式公式，三步Adams隐式公式误差小、稳定性好。

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}\left(55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3}\right)\quad R_{n+1}=\frac{251}{720}h^5y^{(5)}(\eta)$$

通常将Adams隐式公式与显式公式结合使用。

Adams迭代公式

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + \dfrac{h}{24}\left(55 f_n - 59 f_{n-1} + 37 f_{n-2} - 9 f_{n-3}\right) \\ y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + \dfrac{h}{24}(9 f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)}) + 19 f_n - 5 f_{n-1} + f_{n-2}), \quad k = 0,1,2,\cdots \end{cases}$$

Adams 预测-校正公式

上式中的第二式只迭代一次，即

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + \dfrac{h}{24}\left(55 f_n - 59 f_{n-1} + 37 f_{n-2} - 9 f_{n-3}\right) \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{24}(9 f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)}) + 19 f_n - 5 f_{n-1} + f_{n-2}), \quad k = 0,1,2,\cdots \end{cases}$$

例题 用数值积分方法推导求解初值问题

$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0$ 的两步方法

$$y_{n+2} = y_{n+1} + h\left[\alpha f_{n+2} + \beta f_{n+1} + \gamma f_n\right]$$

中的参数，并推导局部截断误差。 *作业*

解： 由 $\int_{x_{n+1}}^{x_{n+2}} y'(x)dx = \int_{x_{n+1}}^{x_{n+2}} f(x, y(x))dx$

对$f(x,y(x))$在 x_{n+2}, x_{n+1}, x_n处进行Lagrange插值

得 $y(x_{n+2}) = y(x_{n+1}) + \int_{x_{n+1}}^{x_{n+2}} P_2(x)dx + \int_{x_{n+1}}^{x_{n+2}} \overline{R_2}(x)dx$

记 $F(x) = f(x, y(x))$，节点间距为h。

其中 $P_2(x)=\dfrac{(x-x_{n+1})(x-x_{n+2})}{(x_n-x_{n+1})(x_n-x_{n+2})}f(x_n,y(x_n))$

$+\dfrac{(x-x_n)(x-x_{n+2})}{(x_{n+1}-x_n)(x_{n+1}-x_{n+2})}f(x_{n+1},y(x_{n+1}))+\dfrac{(x-x_n)(x-x_{n+1})}{(x_{n+2}-x_n)(x_{n+2}-x_{n+1})}f(x_{n+2},y(x_{n+2}))$

令 $\boxed{x=x_{n+1}+th}$ 则 $x\in[x_{n+1},x_{n+2}]\leftrightarrow t\in[0,1]$ $x-x_{n+1}=th$

$x-x_n=(t+1)h$ $x-x_{n+2}=(t-1)h$ $x_{n+2}-x_{n+1}=x_{n+1}-x_n=h$

$$\int_{x_{n+1}}^{x_{n+2}}P_2(x)dx=\int_0^1\left[\frac{F(x_n)}{2}t(t-1)+\frac{F(x_{n+1})}{-1}(t+1)(t-1)+\frac{F(x_{n+2})}{2}(t+1)t\right]hdt$$

$$=h\left(-\frac{1}{12}F(x_n)+\frac{2}{3}F(x_{n+1})+\frac{5}{12}F(x_{n+2})\right)\quad F(x)=f(x,y(x))$$

记 $f_n=f(x_n,y_n)$ 由 $y_{n+1}\approx y(x_{n+1}),\ y_{n+2}\approx y(x_{n+2})$

则 $y_{n+2}=y_{n+1}+\dfrac{h}{12}[5f_{n+2}+8f_{n+1}-f_n]$ 故 $\alpha=\dfrac{5}{12},\beta=\dfrac{3}{4},\gamma=-\dfrac{1}{12}$

$$y_{n+2}=y_{n+1}+h[\alpha f_{n+2}+\beta f_{n+1}+\gamma f_n],\ y(x_{n+2})=y(x_{n+1})+\int_{x_{n+1}}^{x_{n+2}}P_2(x)dx+\int_{x_{n+1}}^{x_{n+2}}\overline{R}_2(x)dx$$

局部截断误差为

$$R_{n+2}=\int_{x_{n+1}}^{x_{n+2}}\frac{1}{3!}F^{(3)}(\xi)(x-x_n)(x-x_{n+1})(x-x_{n+2})dx$$

$(x-x_n)(x-x_{n+1})(x-x_{n+2})$ 在积分区间不变号。

当$F^{(3)}(x)$在积分区间上连续，则存在$\eta\in[x_{n+1},x_{n+2}]$,

有 $$R_{n+2}=\frac{1}{3!}F^{(3)}(\eta)\int_{x_{n+1}}^{x_{n+2}}(x-x_n)(x-x_{n+1})(x-x_{n+2})dx$$

令 $\boxed{x=x_{n+1}+th}$ 则 $x\in[x_{n+1},x_{n+2}]\leftrightarrow t\in[0,1]$

$$x-x_n=(t+1)h \qquad x-x_{n+1}=th \qquad x-x_{n+2}=(t-1)h$$

故 $$R_{n+2}=\frac{1}{3!}F^{(3)}(\eta)\int_0^1(t+1)h\cdot th\cdot(t-1)h\cdot hdt$$

$\boxed{F(x)=f(x,y(x))}$

$$=\frac{h^4}{3!}F^{(3)}(\eta)\left[\frac{t^4}{4}-\frac{t^2}{2}\right]\Bigg|_0^1=-\frac{h^4}{24}F^{(3)}(\eta)=-\frac{h^4}{24}y^{(4)}(\eta)$$

$$=-\frac{h^4}{24}y^{(4)}(x_n)+O(h^5)$$

隐式公式 $y_{n+2}=y_{n+1}+\frac{h}{12}[5f_{n+2}+8f_{n+1}-f_n]$ **为三阶方法。**

二 基于Taylor展开的构造方法

构造p阶线性r步公式的一般方法：

设$y(x)$为区间$[x_0,b]$上的连续可微函数，若$y(x)$充分光滑，将

$$R_{n+1}=y(x_{n+1})-\alpha_0 y(x_n)-\alpha_1 y(x_{n-1})-\alpha_2 y(x_{n-2})-\cdots-\alpha_{r-1}y(x_{n-r+1})$$
$$-h(\beta_{-1}y'(x_{n+1})+\beta_0 y'(x_n)+\beta_1 y'(x_{n-1})+\cdots+\beta_{r-1}y'(x_{n-r+1}))$$

中 $y(x_{n-i})=y(x_n-ih),\ y'(x_{n-i})=y'(x_n-ih)\ (i=-1,0,1,\cdots,r)$

在点x_n处作Taylor展开，并按h的幂整理，即

$$R_{n+1}=c_0 y(x_n)+c_1 h y'(x_n)+\cdots+c_p h^p y^{(p)}(x_n)+c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n)+\cdots$$

令 $c_0=c_1=\cdots=c_p=0,\ c_{p+1}\neq 0$

则可由求得的 $\alpha_i,\beta_i\ (i=-1,0,1,\cdots,r)$，构造**p阶公式**。

局部截断误差为 $R_{n+1}=c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n)+O(h^{p+2})$

$$y_{n+1}=\alpha_0 y_n+\alpha_1 y_{n-1}+\alpha_2 y_{n-2}+\alpha_3 y_{n-3}+\cdots+\alpha_{r-1}y_{n-(r-1)}$$
$$+h(\beta_{-1}f_{n+1}+\beta_0 f_n+\beta_1 f_{n-1}+\beta_2 f_{n-2}+\cdots+\beta_{r-1}f_{n-(r-1)})$$

下面用Taylor展开法**构造四步四阶方法**，并求其局部截断误差的主项。

设
$$y_{n+1}=\alpha_0 y_n+\alpha_1 y_{n-1}+\alpha_2 y_{n-2}+\alpha_3 y_{n-3}+h(\beta_{-1}f_{n+1}+\beta_0 f_n+\beta_1 f_{n-1}+\beta_2 f_{n-2}+\beta_3 f_{n-3})$$

将

$$R_{n+1}=\boxed{y(x_{n+1})}-\alpha_0 y(x_n)-\alpha_1\boxed{y(x_{n-1})}-\alpha_2\boxed{y(x_{n-2})}-\alpha_3\boxed{y(x_{n-3})}$$
$$-h[\beta_{-1}\boxed{y'(x_{n+1})}+\beta_0 y'(x_n)+\beta_1\boxed{y'(x_{n-1})}+\beta_2\boxed{y'(x_{n-2})}+\beta_3\boxed{y'(x_{n-3})}]$$

在x_n处作Taylor展开，并按h的幂整理。

$$
\begin{aligned}
R_{n+1} = {} & [y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_n) + \frac{h^4}{4!}y^{(4)}(x_n) + \frac{h^5}{5!}y^{(5)}(x_n) + \cdots] - \alpha_0 y(x_n) \\
& - \alpha_1[y(x_n) - hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) - \frac{h^3}{3!}y'''(x_n) + \frac{h^4}{4!}y^{(4)}(x_n) - \frac{h^5}{5!}y^{(5)}(x_n) + \cdots] \\
& - \alpha_2[y(x_n) - 2hy'(x_n) + \frac{(2h)^2}{2!}y''(x_n) - \frac{(2h)^3}{3!}y'''(x_n) + \frac{(2h)^4}{4!}y^{(4)}(x_n) - \frac{(2h)^5}{5!}y^{(5)}(x_n) + \cdots] \\
& - \alpha_3[y(x_n) - 3hy'(x_n) + \frac{(3h)^2}{2!}y''(x_n) - \frac{(3h)^3}{3!}y'''(x_n) + \frac{(3h)^4}{4!}y^{(4)}(x_n) - \frac{(3h)^5}{5!}y^{(5)}(x_n) + \cdots] \\
& - h\beta_{-1}[y'(x_n) + hy''(x_n) + \frac{h^2}{2!}y'''(x_n) + \frac{h^3}{3!}y^{(4)}(x_n) + \frac{h^4}{4!}y^{(5)}(x_n) + \cdots] - h\beta_0 y'(x_n) \\
& - h\beta_1[y'(x_n) - hy''(x_n) + \frac{h^2}{2!}y'''(x_n) - \frac{h^3}{3!}y^{(4)}(x_n) + \frac{h^4}{4!}y^{(5)}(x_n) + \cdots] \\
& - h\beta_2[y'(x_n) - 2hy''(x_n) + \frac{(2h)^2}{2!}y'''(x_n) - \frac{(2h)^3}{3!}y^{(4)}(x_n) + \frac{(2h)^4}{4!}y^{(5)}(x_n) + \cdots] \\
& - h\beta_3[y'(x_n) - 3hy''(x_n) + \frac{(3h)^2}{2!}y'''(x_n) - \frac{(3h)^3}{3!}y^{(4)}(x_n) + \frac{(3h)^4}{4!}y^{(5)}(x_n) + \cdots]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
R_{n+1} = {} & \boxed{y(x_{n+1})} - \alpha_0 y(x_n) - \alpha_1 \boxed{y(x_{n-1})} - \alpha_2 \boxed{y(x_{n-2})} - \alpha_3 \boxed{y(x_{n-3})} \\
& - h[\beta_{-1}\boxed{y'(x_{n+1})} + \beta_0 y'(x_n) + \beta_1 \boxed{y'(x_{n-1})} + \beta_2 \boxed{y'(x_{n-2})} + \beta_3 \boxed{y'(x_{n-3})}]
\end{aligned}
$$

按h的升幂排列

$$R_{n+1}=(1-\alpha_0-\alpha_1-\alpha_2-\alpha_3)y(x_n)$$

$$+(1+\alpha_1+2\alpha_2+3\alpha_3-\beta_{-1}-\beta_0-\beta_1-\beta_2-\beta_3)hy'(x_n)$$

$$+(\frac{1}{2!}-\frac{1}{2!}\alpha_1-\frac{2^2}{2!}\alpha_2-\frac{3^2}{2!}\alpha_3-\beta_{-1}+\beta_1+2\beta_2+3\beta_3)h^2y''(x_n)$$

$$+(\frac{1}{3!}+\frac{1}{3!}\alpha_1+\frac{2^3}{3!}\alpha_2+\frac{3^3}{3!}\alpha_3-\frac{1}{2!}\beta_{-1}-\frac{1}{2!}\beta_1-\frac{2^2}{2!}\beta_2-\frac{3^2}{2!}\beta_3)h^3y'''(x_n)$$

$$+(\frac{1}{4!}-\frac{1}{4!}\alpha_1-\frac{2^4}{4!}\alpha_2-\frac{3^4}{4!}\alpha_3-\frac{1}{3!}\beta_{-1}+\frac{1}{3!}\beta_1+\frac{2^3}{3!}\beta_2+\frac{3^3}{3!}\beta_3)h^4y^{(4)}(x_n)$$

$$+(\frac{1}{5!}+\frac{1}{5!}\alpha_1+\frac{2^5}{5!}\alpha_2+\frac{3^5}{5!}\alpha_3-\frac{1}{4!}\beta_{-1}-\frac{1}{4!}\beta_1-\frac{2^4}{4!}\beta_2-\frac{3^4}{4!}\beta_3)h^5y^{(5)}(x_n)$$

$$+\cdots\cdots$$

构造四阶方法

令 h^0, h^1, h^2, h^3, h^4 的系数等于零，则有

$$h^0 \qquad \alpha_0+\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3=1$$

$$h^1 \qquad -\alpha_1-2\alpha_2-3\alpha_3+\beta_{-1}+\beta_0+\beta_1+\beta_2+\beta_3=1$$

$$h^2 \qquad \frac{1}{2}\alpha_1+\frac{2^2}{2}\alpha_2+\frac{3^2}{2}\alpha_3+\beta_{-1}-\beta_1-2\beta_2-3\beta_3=\frac{1}{2}$$

$$h^3 \qquad -\frac{1}{3!}\alpha_1-\frac{2^3}{3!}\alpha_2-\frac{3^3}{3!}\alpha_3+\frac{1}{2!}\beta_{-1}+\frac{1}{2!}\beta_1+\frac{2^2}{2!}\beta_2+\frac{3^2}{2!}\beta_3=\frac{1}{3!}$$

$$h^4 \qquad \frac{1}{4!}\alpha_1+\frac{2^4}{4!}\alpha_2+\frac{3^4}{4!}\alpha_3+\frac{1}{3!}\beta_{-1}-\frac{1}{3!}\beta_1-\frac{2^3}{3!}\beta_2-\frac{3^3}{3!}\beta_3=\frac{1}{4!}$$

此时公式为四阶方法，即局部截断误差为$O(h^5)$，且

$$R_{n+1}=(\frac{1}{5!}+\frac{1}{5!}\alpha_1+\frac{2^5}{5!}\alpha_2+\frac{3^5}{5!}\alpha_3-\frac{1}{4!}\beta_{-1}-\frac{1}{4!}\beta_1-\frac{2^4}{4!}\beta_2-\frac{3^4}{4!}\beta_3)h^5y^{(5)}(x_n)$$
$$+O(h^6)$$

① 显式的Adams公式

要求前五个方程成立。令 $\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=\beta_{-1}=0$

得 $\alpha_0=1,\beta_0=\dfrac{55}{24},\beta_1=-\dfrac{59}{24},\beta_2=\dfrac{37}{24},\beta_3=-\dfrac{9}{24}$

显式的Adams公式为

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}\left(55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3}\right)$$

且

$$R_{n+1}=\left(\frac{1}{5!}+\frac{1}{5!}\alpha_1+\frac{2^5}{5!}\alpha_2+\frac{3^5}{5!}\alpha_3-\frac{1}{4!}\beta_{-1}-\frac{1}{4!}\beta_1-\frac{2^4}{4!}\beta_2-\frac{3^4}{4!}\beta_3\right)h^5y^{(5)}(x_n)$$

$$+O(h^6)\ =\frac{251}{720}y^{(5)}(x_n)h^5+O(h^6)$$

$$y_{n+1}=\alpha_0y_n+\alpha_1y_{n-1}+\alpha_2y_{n-2}+\alpha_3y_{n-3}$$
$$+h(\beta_{-1}f_{n+1}+\beta_0f_n+\beta_1f_{n-1}+\beta_2f_{n-2}+\beta_3f_{n-3})$$

② 隐式的Adams公式

要求前五个方程成立。令 $\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=\beta_3=0$

得 $\alpha_0=1, \beta_{-1}=\dfrac{9}{24}, \beta_0=\dfrac{19}{24}, \beta_1=-\dfrac{5}{24}, \beta_2=\dfrac{1}{24}$

隐式的Adams公式为

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}\left(9f_{n+1}+19f_n-5f_{n-1}+f_{n-2}\right)$$

且

$$R_{n+1}=\left(\frac{1}{5!}+\frac{1}{5!}\alpha_1+\frac{2^5}{5!}\alpha_2+\frac{3^5}{5!}\alpha_3-\frac{1}{4!}\beta_{-1}-\frac{1}{4!}\beta_1-\frac{2^4}{4!}\beta_2-\frac{3^4}{4!}\beta_3\right)h^5y^{(5)}(x_n)$$

$$+O(h^6)\ =-\frac{19}{720}y^{(5)}(x_n)h^5+O(h^6)$$

$$y_{n+1}=\alpha_0y_n+\alpha_1y_{n-1}+\alpha_2y_{n-2}+\alpha_3y_{n-3}$$
$$+h(\beta_{-1}f_{n+1}+\beta_0f_n+\beta_1f_{n-1}+\beta_2f_{n-2}+\beta_3f_{n-3})$$

③ Hamming公式

要求前五个方程成立。令 $\alpha_1=\alpha_3=\beta_2=\beta_3=0$

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

Hamming公式为

$$y_{n+1}=\frac{1}{8}(9y_n-y_{n-2})+\frac{3h}{8}\left(f_{n+1}+2f_n-f_{n-1}\right)$$

且

$$R_{n+1}=\left(\frac{1}{5!}+\frac{1}{5!}\alpha_1+\frac{2^5}{5!}\alpha_2+\frac{3^5}{5!}\alpha_3-\frac{1}{4!}\beta_{-1}-\frac{1}{4!}\beta_1-\frac{2^4}{4!}\beta_2-\frac{3^4}{4!}\beta_3\right)h^5y^{(5)}(x_n)$$

$$+O(h^6)\ =-\frac{1}{40}y^{(5)}(x_n)h^5+O(h^6)$$

Hamming公式不能用数值积分的方法构造。

$$y_{n+1}=\alpha_0y_n+\alpha_1y_{n-1}+\alpha_2y_{n-2}+\alpha_3y_{n-3}$$
$$+h(\beta_{-1}f_{n+1}+\beta_0f_n+\beta_1f_{n-1}+\beta_2f_{n-2}+\beta_3f_{n-3})$$

Remarks

与基于数值积分的构造方法相比，基于Taylor展开的构造方法更加灵活。它可以导出基于数值积分的构造方法得不到的公式。

例题 设有求解初值问题 $y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0$ 的如下两步计算公式：

$$y_{n+2} = ay_{n+1} + by_n + h(cf_{n+1} + df_n)$$

试用台劳展开方法确定其中的参数a，b，c，d，使该公式为三阶方法，并推导局部截断误差。其中 $f_k = f(x_k, y_k) \;\; k = n-1, n$。

解 由 $R_{n+2} = \underline{y(x_{n+2})} - a\underline{y(x_{n+1})} - by(x_n) - h[c\underline{y'(x_{n+1})} + dy'(x_n)]$

将$y(x_{n+2}), y(x_{n+1}), y'(x_{n+1})$在点$x_n$展开：

$$R_{n+2}=\left[y(x_n)+2hy'(x_n)+\frac{(2h)^2}{2!}y''(x_n)+\frac{(2h)^3}{3!}y'''(x_n)+\frac{(2h)^4}{4!}y^{(4)}(x_n)+O(h^5)\right]$$

$$-a\left[y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2!}y''(x_n)+\frac{h^3}{3!}y'''(x_n)+\frac{h^4}{4!}y^{(4)}(x_n)+O(h^5)\right]-by(x_n)$$

$$-hc\left[y'(x_n)+hy''(x_n)+\frac{h^2}{2!}y'''(x_n)+\frac{h^3}{3!}y^{(4)}(x_n)+O(h^4)\right]-hdy'(x_n)$$

$$R_{n+2}=[1-a-b]y(x_n)+h[2-a-c-d]y'(x_n)+h^2[\frac{2^2}{2!}-\frac{a}{2!}-c]y''(x_n)$$

$$+h^3[\frac{2^3}{3!}-\frac{a}{3!}-\frac{c}{2!}]y'''(x_n)+(\frac{2^4}{4!}-\frac{1}{4!}a-\frac{1}{3!}c)h^4y^{(4)}(x_n)+O(h^5)$$

$$R_{n+2}=y(x_{n+2})-ay(x_{n+1})-by(x_n)-h[cy'(x_{n+1})+dy'(x_n)]$$

令 $R_{n+2}=O(h^4)$ 有 $\begin{cases} a+b=1 \\ a+c+d=2 \\ \dfrac{a}{2}+c=2 \\ \dfrac{a}{6}+\dfrac{c}{2}=\dfrac{4}{3} \end{cases} \Rightarrow \begin{matrix} a=-4, \\ b=5, \\ c=4, \\ d=2 \end{matrix}$

故使 $y_{n+2}=ay_{n+1}+by_n+h(cf_{n+1}+df_n)$ 是三阶方法的格式为

$$y_{n+2}=-4y_{n+1}+5y_n+h(4f_{n+1}+2f_n)$$

$$R_{n+2}=(\frac{2}{3}-\frac{1}{24}a-\frac{1}{6}c)h^4y^{(4)}(x_n)+O(h^5)=\frac{1}{6}h^4y^{(4)}(x_n)+O(h^5)$$

局部截断误差主项为 $\dfrac{1}{6}h^4y^{(4)}(x_n)$。

$$R_{n+2}=[1-a-b]y(x_n)+h[2-a-c-d]y'(x_n)+h^2[\frac{2^2}{2!}-\frac{a}{2!}-c]y''(x_n)$$
$$+h^3[\frac{2^3}{3!}-\frac{a}{3!}-\frac{c}{2!}]y'''(x_n)+(\frac{2^4}{4!}-\frac{1}{4!}a-\frac{1}{3!}c)h^4y^{(4)}(x_n)+O(h^5)$$

注 对 $R_{n+2}=y(x_{n+2})-ay(x_{n+1})-by(x_n)-h[cy'(x_{n+1})+dy'(x_n)]$ 若将 $y(x_{n+2}), y(x_n), y'(x_n)$ 在点 x_{n+1} 展开，则所求参数相同，且局部截断误差也相同。

$$\begin{aligned}
R_{n+2}&=\frac{1}{6}h^4y^{(4)}(x_{n+1})+O(h^5)\\
&=\frac{1}{6}h^4(y^{(4)}(x_n)+hy^{(5)}(x_n)+O(h^2))+O(h^5)\\
&=\frac{1}{6}h^4y^{(4)}(x_n)+O(h^5)
\end{aligned}$$

总结

1. 建立数值公式的三种方法

- 基于Taylor级数展开–单步公式、多步公式
  （1）指定局部截断误差（或方法阶数）及节点信息时，构造相应的数值公式；
  （2）对给定的数值公式，判断方法的阶数；
  （3）指明局部截断误差主项。
- 基于数值积分–单步公式、多步公式
- 差商直接代替微商–单步公式

2. 简单单步法的计算、局部截断误差和阶

- Euler-梯形预估校正公式
- 显式Euler公式
- 隐式Euler公式
- 梯形公式

3. Taylor级数展开法构造公式并计算

4. 单步法的收敛性和稳定性

- 给出具体格式的稳定性条件
- 具体格式的收敛性

5 单步法的收敛性和稳定性

- 给出具体格式的稳定性条件
- 具体格式的收敛性