東北大學
Northeastern University

数值分析

理学院　　数学系

计算数学教研室

2017年12月13日

自然界的统一性显示在关于各种现象领域的微分方程式的“惊人的类似”中.

——列宁

在自然科学与工程技术的许多领域中, 经常会遇到常微分方程定解问题. 本章主要以一阶常微分方程为主, 介绍常微分方程初值问题的差分方法和相关理论.

一阶常微分方程初值问题的一般形式为

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x, y), \quad a \le x \le b; \\ y(a) = \alpha. \end{cases} \tag{1}$$

- **其中$f(x,y)$是已知函数,α为给定的值.**
- **上述问题之所以称为初值问题, 是因为在很多数学模型中变量x代表时间, 而定解条件$y(a)=\alpha$给出了函数$y(x)$在初始时刻的取值.**

问题

- 1. 问题(1)何时存在惟一解?
- 2. 如何计算$y(x)$?

关于Lipshitz条件

如果函数$f(x,y)$在区域$\{a\le x\le b,\ m<y<M\}$上连续, 且关于y满足Lipschitz (李普希兹)条件

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

其中$L>0$为Lipschitz常数, 则初值问题(1) (在a的某个邻域上)存在惟一解.

- 注1: 此时的Lipschitz常数L不必小于1, 这一点与前面章节中讲过的压缩映射的条件有所不同.
- 注2:当不满足Lipschitz条件时, 问题(1)未必存在惟一解.
- 注3:关于此结论的详细论述, 可参看有关常微分方程教材.

例1

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = 1 + x\sin(xy), \quad 0 \le x \le 2 \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

由于此时

$$f(x,y) = 1 + x\sin(xy)$$

对任意y, $\overline{y}$, **对变量** y**应用微分中值定理, 存在**η**使得**

$$\frac{f(x,y) - f(x,\overline{y})}{y - \overline{y}} = \frac{\partial}{\partial y} f(x,\eta) = x^2 \cos(x\eta),$$

于是有

例1(续)

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = 1 + x\sin(xy), \quad 0 \le x \le 2; \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

$$|f(x,y) - f(x,\bar{y})| = |x^2\cos(x\eta)||y - \bar{y}| \le 4|y - \bar{y}|,$$

因而此时*f*(*x*,*y*)关于*y*满足Lipschitz条件, 且常数*L*=4.

因此, 从理论上讲, 初值问题例1存在惟一解.

- 但是, 对例1进行精确求解是非常困难的, 通常需要借助于数值解法.

为什么要研究数值解法

在《高等数学》等课程中同学们已经学习了一些方法来求初值问题的解析解, 但只限一些特殊形式的常微分方程. 对于大量来源于实际问题的常微分方程, 其精确解很难求出或者不能用初等函数表示(譬如例1). 因此研究常微分初值问题的近似解法就显得十分必要.

近似解法主要有两类: 一类近似解法为解析近似方法; 另一类近似解法称为数值解法.

本课程中我们主要研究数值解法. 它可以给出解在一些离散节点上的近似值. 此类方法非常适于在计算机上实现.

本章我们将介绍一类最基本的方法——有限差分法.

构造数值解法的基本思想

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x, y), \quad a \le x \le b; \\ y(a) = \alpha. \end{cases} \qquad (1)$$

假设初值问题(1)的解*y*=*y*(*x*)唯一存在且足够光滑. 对求解区域[*a*,*b*]做等距剖分

$$a=x_0<x_1<x_2<\ldots<x_n<\ldots<x_N=b$$

$h=(b-a)/N$ 称为剖分步长; 剖分节点

$$x_n=a+nh,\ n=0,1,\ldots,N.$$

数值解法的目标就是求精确解*y*(*x*)在剖分节点x_n上的值$y(x_n)$的近似值y_n, n=1,2,…,N.

差分公式的导出

我们采用数值积分方法来建立差分公式.

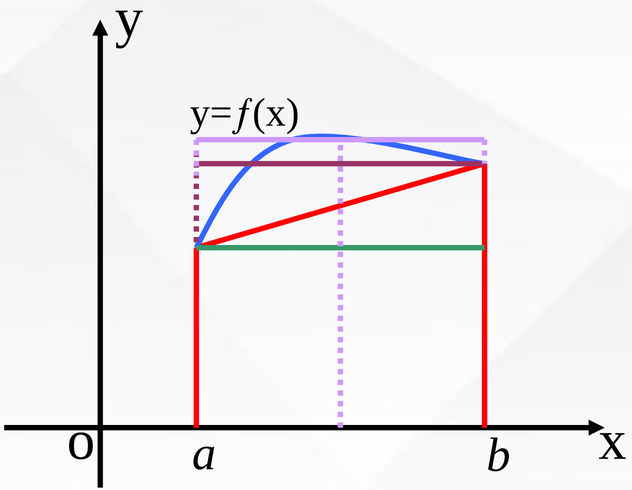
在区间[x_n, x_{n+1}]上对方程(1)中的微分方程两端同时做积分,则有

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx \qquad (2)$$

对(2)式右边的积分应用不同的数值积分公式做逼近, 会得到相应不同的差分公式.

几个常用的数值积分公式

梯形公式	$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$
左矩形公式	$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(a)$
右矩形公式	$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(b)$
中矩形公式	$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(\frac{a+b}{2})$



由数值积分的有关知识可知, 上述几个公式中梯形公式和中矩形公式的精度较高

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx \qquad (2)$$

对(2)式右边的积分应用左矩形公式, 则有

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))$$

因此, 建立节点处近似值y_n满足的差分公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_0 = \alpha, \quad n = 0, 1, 2, \cdots, N-1 \end{cases}$$

称之为**Euler公式.**

关于Leonhard Euler（莱昂哈德 欧拉）

瑞士法郎正面的Euler肖像

欧拉(1707-1783)出生于瑞士巴塞尔，是数学史上公认的4名最伟大的数学家之一，也是科学史上最多产的一位杰出的数学家。几乎每一个数学领域都可以看到欧拉的名字。据统计他一生共写下了886本书籍和论文，其中包括分析、代数、数论、几何、物理、力学、天文学、弹道学、航海学、建筑学等。彼得堡科学院为了整理他的著作，足足忙碌了四十七年。

“读读欧拉，他是所有人的老师。”——拉普拉斯 （法国数学家）

“研究欧拉的著作永远是了解数学的最好方法。”—— 高斯（德国数学家）

$$y(x_{n+1})-y(x_n)=\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y(x))dx \qquad (2)$$

若对(2)式右边的积分应用梯形求积公式，则可导出差分公式

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+\dfrac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})] \\ y_0=\alpha,\ n=0,1,2\cdots,N-1 \end{cases}$$

称为**梯形公式**.

若在区间$[x_{n-1}, x_{n+1}]$上对问题(1)的微分方程做积分,则有

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

对右边的积分应用中矩形求积公式, 则得差分公式

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_{n-1}+2hf(x_n,y_n) \\ y_0=\alpha \quad ,n=1,2\cdots,N-1 \end{cases}$$

称为**Euler中点公式**或称**双步Euler公式**. 它属于多步方法.

注: 这类多步方法需要更多的初值信息. 以Euler中点公式为例, 它不能直接计算y_1的值, 而需要其他方法来提供起始值y_1.

在Euler公式和梯形公式中, 为求得y_{n+1}, 只需用到前一步的值y_n, 这种差分方法称为**单步法**, 这是一种自开始方法.

Euler中点公式则不然, 计算y_{n+1}时需用到前两步的值y_n, y_{n-1}, 称其为**两步方法**. 两步以上的方法统称为**多步法**.

在Euler公式和Euler中点公式中, 需要计算的y_{n+1}已被显式表示出来, 称这类差分公式为**显式公式**, 而梯形公式中,需要计算的y_{n+1}隐含在等式两侧, 称其为**隐式公式**.

隐式公式中, 每次计算y_{n+1}都需解方程, 要比显式公式需要更多的计算量, 但其计算稳定性较好.

几个差分公式的性能对比

公式名称	主要格式	单步or多步	显式or隐式	精度
Euler公式	$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)$	**单步**	**显式**	**稍差**
梯形公式	$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})]$	**单步**	**隐式**	**较高**
Euler中点公式	$y_{n+1}=y_{n-1}+2hf(x_n,y_n)$	**多步**	**显式**	**较高**

习题

例2 请写出下列初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = \dfrac{1}{1+x^2} - 2y^2, \quad 0 \le x \le 2 \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

的Euler公式、梯形公式和Euler中点公式。

(假定已对区间[0, 2]做等距剖分得到编号为n=0,1,...,N的节点)

例2答案

解：此时的Euler公式为

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+h(\dfrac{1}{1+x_n^2}-2y_n^2) \\ y_0=0,\ \ n=0,1,2\cdots N-1. \end{cases}$$

梯形公式为

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+\dfrac{h}{2}\left[(\dfrac{1}{1+x_n^2}-2y_n^2)+(\dfrac{1}{1+x_{n+1}^2}-2y_{n+1}^2)\right] \\ y_0=0,\ \ n=0,1,2\cdots N-1. \end{cases}$$

例2答案（续）

解：Euler中点公式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_{n-1} + 2h\left(\dfrac{1}{1+x_n^2} - 2y_n^2\right) \\ y_0 = 0, \quad n = 1, 2\cdots N-1. \end{cases}$$

改进的Euler方法

从数值积分的角度来看, 梯形公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})] \\ y_0 = \alpha, \quad n = 0, 1, 2\cdots, N-1 \end{cases}$$

的计算精度要比Euler公式好,但它属于隐式公式,不便于计算.

注: 由于方程的两端都含有y_{n+1}项, 每求一次y_{n+1}, 相当于解一个(可能是非线性的)方程.

非线性方程迭代法的理论启发我们，可以采用以下策略进行近似计算

$$\begin{cases} y_{n+1}^{[0]} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{[k+1]} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[k]})] \\ \qquad k = 0,1,2,\ldots\ldots \\ y_0 = \alpha,\ \ n = 0,1,2\cdots, N-1 \end{cases}$$

应用Euler公式提供y_{n+1}的初始值. (预估)

再采用梯形公式的框架进行关于y_{n+1}值的迭代计算. (校正)

问题: 这种迭代计算是否一定收敛？收敛的条件是什么？

考察关于y_{n+1}的迭代格式

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

知道其迭代函数为

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

由迭代法理论知道， 当 $\varphi(y)$ 为压缩映射时迭代法收敛.

又若假设 $\frac{\partial f}{\partial y}$ 存在，则当 $|\varphi'(y)| \le L < 1$，也即

$$\frac{h}{2}\left|\frac{\partial f}{\partial y}\right| \le L < 1,$$

时，迭代必然收敛.

注1：上述条件在理论上不难办到, 只需令剖分步长*h*充分小即可.

注2：实际计算时, 当 $|y_{n+1}^{[k+1]} - y_{n+1}^{[k]}| < \varepsilon$ **时(ε是给定的精度要求), 取** $y_{n+1} = y_{n+1}^{[k+1]}$.

对于格式

$$\begin{cases} y_{n+1}^{[0]} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{[k+1]} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[k]})] \\ y_0 = \alpha, \quad n = 0,1,2,\cdots,N-1 \end{cases}$$

若关于y_{n+1}只迭代1步，则得到以下格式

$$\begin{cases} \bar{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1})] \\ y_0 = \alpha, \quad n = 0,1,2,\cdots,N-1 \end{cases}$$

称之为**改进的Euler方法.**

它属于单步显式方法

改进的Euler方法的两种格式

格式1

$$\begin{cases} \bar{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1})] \\ y_0 = \alpha, \quad n = 0,1,2\cdots,N-1 \end{cases}$$

格式2

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}(K_1 + K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1) \\ y_0 = \alpha, \quad n = 0,1,2\cdots,N-1 \end{cases}$$

习题

请写出初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = y - \dfrac{2x}{y}, \quad 0 \le x \le 1; \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

的Euler公式和改进的Euler方法的格式, 取步长h=0.1.

答案

(1) Euler公式的格式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = 1.1y_n - 0.2x_n / y_n \\ y_0 = 1, \quad n = 0,1,2,\cdots,9 \end{cases}$$

答案(续)

(2) 改进的Euler方法的格式为

$$
\begin{cases}
y_{n+1} = y_n + 0.05(K_1 + K_2) \\
K_1 = y_n - 2x_n / y_n \\
K_2 = y_n + 0.1K_1 - \dfrac{2(x_n + 0.1)}{y_n + 0.1K_1} \\
y_0 = 1, \quad n = 0, 1, 2, \cdots, 9
\end{cases}
$$

问题

改进的Euler方法是否还具有与梯形公式相当的计算精度？

下一节我们将从截断误差的角度来分析这个问题.

差分公式的误差分析

在节点x_{n+1}处的误差$y(x_{n+1})-y_{n+1}$，不仅与y_{n+1}这一步计算有关，而且与前n步计算值$y_n, y_{n-1}, \dots, y_1$都有关.

为了简化误差分析，着重研究进行一步计算时产生的截断误差，我们假设在前n步的计算中没有截断误差，也即$y_n=y(x_n)$，这时求得的误差$y(x_{n+1})-y_{n+1}$称为**局部截断误差**，它可以反映出差分公式的精度.

如果单步差分公式的局部截断误差为$O(h^{p+1})$，则称该公式为**p阶方法**. 这里p为非负整数. 显然，阶数越高，方法的精度越高.

局部误差分析所用理论工具

- 一元Taylor公式
- 二元Taylor公式
- 其他

关于Taylor公式

一元Taylor公式

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

二元Taylor公式

$$f(x_n+h, y_n+k) = f(x_n, y_n) + \frac{\partial f(x_n, y_n)}{\partial x}h + \frac{\partial f(x_n, y_n)}{\partial y}k$$

$$+\frac{1}{2!}\left[\frac{\partial^2 f(x_n, y_n)}{\partial x^2}h^2 + 2\frac{\partial^2 f(x_n, y_n)}{\partial x \partial y}hk + \frac{\partial^2 f(x_n, y_n)}{\partial y^2}k^2\right] + \cdots$$

$$+\frac{1}{k!}\left[h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right]^k f(x_n, y_n) + \cdots \cdots$$

另外,在$y_n=y(x_n)$的假设条件下,考虑到$y'(x)=f(x, y(x))$,则有

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

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

$$y'''(x_n)=\frac{\partial^2 f_n}{\partial x^2}+2\frac{\partial^2 f_n}{\partial x\partial y}f_n+\frac{\partial^2 f_n}{\partial y^2}f_n^2+\frac{\partial f_n}{\partial x}\frac{\partial f_n}{\partial y}+(\frac{\partial f_n}{\partial y})^2 f_n$$

关于Euler公式的局部截断误差分析

Euler公式: $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$

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

$$= y_n + f(x_n, y_n)h + O(h^2)$$

得到局部截断误差: $y(x_{n+1}) - y_{n+1} = \dfrac{y''(x_n)}{2!}h^2 + O(h^3) = O(h^2)$

局部截断误差为O(h^{p+1})的差分公式为p阶方法.

此项称为截断误差主项

所以Euler公式是1阶方法.

关于改进的Euler方法的局部截断误差分析

改进的Euler方法:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}(K_1 + K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1) \\ y_0 = \alpha, \quad n = 0,1,2\cdots, N-1 \end{cases}$$

其中

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

对于K_2应用二元Taylor展开公式，可得

$$K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1) = f_n + \frac{\partial f_n}{\partial x} h + \frac{\partial f_n}{\partial y} hK_1$$

$$+\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 f_n}{\partial x^2} h^2 + 2\frac{\partial^2 f_n}{\partial x \partial y} h^2 K_1 + \frac{\partial^2 f_n}{\partial y^2} h^2 K_1^2\right] + O(h^3)$$

由假设$y(x_n)=y_n$, 可得

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

$$y''(x_n) = \frac{\partial f_n}{\partial x} + \frac{\partial f_n}{\partial y} \cdot f_n = \frac{\partial f_n}{\partial x} + \frac{\partial f_n}{\partial y} \cdot K_1$$

$$y'''(x_n) = \frac{\partial^2 f_n}{\partial x^2} + 2\frac{\partial^2 f_n}{\partial x \partial y} f_n + \frac{\partial^2 f_n}{\partial y^2} f_n^2 + \frac{\partial f_n}{\partial x}\frac{\partial f_n}{\partial y} + \left(\frac{\partial f_n}{\partial y}\right)^2 f_n$$

于是

$$y_{n+1}=y_n+f_nh+\frac{h^2}{2}\left[\frac{\partial f_n}{\partial x}+\frac{\partial_n}{\partial y}f_n\right]+\frac{h^3}{4}\left[\frac{\partial^2 f_n}{\partial x^2}+2\frac{\partial^2 f_n}{\partial x\partial y}f_n+\frac{\partial^2 f_n}{\partial y^2}f_n{}^2\right]+O(h^4)$$

而

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

$$=y_n+f_nh+\frac{h^2}{2}\left[\frac{\partial f_n}{\partial x}+\frac{\partial f_n}{\partial y}f_n\right]$$

$$+\frac{h^3}{6}\left[\frac{\partial^2 f_n}{\partial x^2}+2\frac{\partial^2 f_n}{\partial x\partial y}f_n+\frac{\partial^2 f_n}{\partial y^2}f_n^2+\frac{\partial f_n}{\partial x}\frac{\partial f_n}{\partial y}+(\frac{\partial f_n}{\partial y})^2f_n\right]+O(h^4)$$

从而得到局部截断误差为：$y(x_{n+1})-y_{n+1}=O(h^3)$

所以, 改进的Euler方法是2阶方法.

思考题

- 试估计梯形公式的局部截断误差.

Taylor展开方法

设$y(x)$是初值问题(1)的精确解, 利用Taylor展开式可得

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + y'(x_n)h + \frac{y''(x_n)}{2!}h^2 + \cdots + \frac{y^{(p)}(x_n)}{P!}h^p + \frac{y^{(p+1)}(\xi)}{(p+1)!}h^{p+1}$$

$$= y(x_n) + hf(x_n, y(x_n)) + \frac{h^2}{2!}f^{(1)}(x_n, y(x_n)) + \cdots + \frac{h^p}{P!}f^{(p-1)}(x_n, y(x_n)) + O(h^{p+1})$$

因此，可建立节点处近似值y_n满足的差分公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \dfrac{h^2}{2!}f^{(1)}(x_n, y_n) + \cdots + \dfrac{h^p}{P!}f^{(p-1)}(x_n, y_n) \\ y_0 = \alpha \quad, n = 0, 1, 2\cdots, N-1 \end{cases}$$

即为p阶Taylor展开方法.

其中

$$f^{(1)}(x,y)=\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}+\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}f(x,y)$$

$$f^{(2)}(x,y)=\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+2\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}f+\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}f^2+\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial y}+(\frac{\partial f}{\partial y})^2 f$$

$$\cdots\cdots \qquad \cdots\cdots \qquad \cdots\cdots$$

可见,公式的局部截断误差为: $y(x_{n+1})-y_{n+1}=O(h^{p+1})$.

所以此差分公式是p阶方法.

Taylor展开方法给出了一种构造单步显式高阶方法的途径, 然而由于此方法涉及很多复合函数$f(x,y(x))$的导数的计算, 比较繁琐, 因而很少直接使用.

深入思考

设$y(x)$是初值问题(1)的精确解, 由Taylor展开式可得

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(\xi) = y(x_n) + hf(\xi, y(\xi)), \qquad x_n \le \xi \le x_{n+1}.$$

构造差分方法就是研究如何利用适当的方法来近似计算数值

$f(\xi, y(\xi)).$

回顾Euler方法,它可写为

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

这相当于用一个函数值K_1作为$f(\xi, y(\xi))$的近似.

当$y(x_n) = y_n$时, y_{n+1}的表达式与精确解$y(x_{n+1})$的Taylor展式的前两项完全一致, 因此其局部截断误差为

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = O(h^2)$$

改进的Euler方法的格式可写为

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

这相当于用两个函数值K_1和K_2的线性组合作为$f(\xi, y(\xi))$的近似.

当$y(x_n)= y_n$时, y_{n+1}的表达式与精确解$y(x_{n+1})$的Taylor展式的前三项完全一致, 因此其局部截断误差为

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = O(h^3)$$

这启发我们：

是否可以通过增加计算$f(x,y)$函数值的次数来构造高阶的差分公式？

Runge-Kutta方法

上一节的讨论启发我们, 可以通过增加计算关于$f(x,y)$的函数值的方法来构造高阶差分格式, 为此我们建立以下公式

$$
\begin{cases}
y_{n+1} = y_n + h(\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2 + \cdots + \lambda_p K_p) \\
K_1 = f(x_n, y_n) \\
K_2 = f(x_n + \alpha_2 h, y_n + h\beta_{21} K_1) \\
\qquad \cdots\cdots \qquad\qquad \cdots\cdots \\
K_P = f(x_n + \alpha_P h, y_n + h\sum_{i=1}^{p-1} \beta_{pi} K_i)
\end{cases}
$$

其中$\{\lambda_i,\alpha_i,\beta_{ij}\}$为待定参数. 若此公式的局部截断误差为$O(h^{p+1})$, 则称其为(p级)**p阶Runge-kutta方法**, 简称(p级)**p阶R-K方法**.

p=2情形的R-K方法

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \alpha h, y_n + \beta h K_1) \end{cases}$$

由于

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda_1 f_n + h\lambda_2 \left(f_n + \alpha h \frac{\partial f_n}{\partial x} + \beta h f_n \frac{\partial f_n}{\partial y} \right) + O(h^3)$$

$$= y_n + h(\lambda_1 + \lambda_2) f_n + h^2 \lambda_2 \left(\alpha \frac{\partial f_n}{\partial x} + \beta f_n \frac{\partial f_n}{\partial y} \right) + O(h^3)$$

$$y(x_{n+1}) = y_n + h f_n + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial f_n}{\partial x} + f_n \frac{\partial f_n}{\partial y} \right) + O(h^3)$$

所以, 只要令$\lambda_1+\lambda_2=1$, $\alpha\lambda_2=1/2$, $\beta\lambda_2=1/2$, 即可使局部截断误差达到$O(h^3)$

若取$\alpha=1$, 则得$\lambda_1=\lambda_2=1/2$, $\beta=1$, 此时公式形如

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

这就是改进的Euler公式;

若取$\lambda_1=0$, 则得$\lambda_2=1$, $\alpha=\beta=1/2$, 此时公式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hK_2 \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hK_1) \end{cases}$$

称之为**中点公式**, 或可写为

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}hf(x_n, y_n))$$

一般地, 以上确定的一族差分公式统称为二阶R-K方法.

高阶R-K公式可类似推导.

常用的三阶、四阶R-K公式.

三阶R-K公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hK_1) \\ K_3 = f(x_n + h, y_n - hK_1 + 2hK_2) \end{cases}$$

四阶标准R-K公式

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

$$\begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hK_1) \\ K_3 = f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hK_2) \\ K_4 = f(x_n + h, y_n + hK_3) \end{cases}$$

例 用四阶标准R-K方法求初值问题

$$\begin{cases} y'=y-2x/y \quad , 0\le x\le 1 \\ y(0)=1 \end{cases}$$

的数值解, 取步长h=0.2 .

解 四阶标准R-K公式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}h(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = y_n - 2x_n / y_n \\ K_2 = y_n + \frac{1}{2}hK_1 - (2x_n + h)/(y_n + \frac{1}{2}hK_1) \\ K_3 = y_n + \frac{1}{2}hK_2 - (2x_n + h)/(y_n + \frac{1}{2}hK_2) \\ K_4 = y_n + hK_3 - 2(x_n + h)/(y_n + hK_3) \end{cases}$$

计算结果如下:

n	x_n	y_n	$y(x_n)$		n	x_n	y_n	$y(x_n)$
0	0.0	1.00	1.00		3	0.6	1.4833	1.4832
1	0.2	1.1832	1.1832		4	0.8	1.6125	1.6125
2	0.4	1.3417	1.3416		5	1.0	1.7321	1.7321

隐式Runge-Kutta方法

隐式R-K方法一般形式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\sum_{r=1}^{p} \lambda_r K_r \\ K_r = f(x_n + \alpha_r h, y_n + h\sum_{i=1}^{r} \lambda_{ri} K_i) \qquad , r = 1, 2, \cdots, p \end{cases}$$

称之为**p级隐式R-K方法.**

例如, 梯形公式就可以写成一个二级隐式R-K方法:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h(K_1 + K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + \frac{1}{2}hK_1 + \frac{1}{2}hK_2) \end{cases}$$

它是一个2阶方法.

但是p级隐式R-K方法的阶可以大于p, 例如,一级隐式中点公式为

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

或写为

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \tfrac{1}{2}h, \tfrac{1}{2}(y_n + y_{n+1}))$$

它是2阶方法.

隐式R-K方法的计算一般每步均需要求解(可能是非线性的)方程组, 计算量较大, 但隐式方法的数值稳定性较好.

变步长Runge-Kutta方法

一些常微分方程初值问题的解在求解区域内变化程度差别很大. 如果在整个区域上统一使用大步长可能达不到精度要求, 而使用小步长又可能浪费计算量, 还会导致舍入误差累积的增加. 这就要求根据解的性态来调整步长的大小: 在变化平缓的部分, 数值求解可以使用较大步长; 而在变化剧烈的部分, 则使用较小的步长, 其目的是在保证精度的前提下尽可能减少计算量. 因此有必要讨论变步长的差分方法.

以下以p阶R-K方法为例简单介绍变步长差分方法的误差估计问题.

设从x_n以步长h计算$y(x_{n+1})$的近似值为$y_{n+1}^{(h)}$, 并假设局部截断误差为

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

其中, C是与h无关的常数.

如果将步长减半, 取$h/2$为步长，从x_n经两步计算得到$y(x_{n+1})$的近似值记为$y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}$，其局部截断误差为:

$$y(x_{n+1})-y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}\approx 2C(\frac{h}{2})^{p+1}=\frac{1}{2^p}Ch^{p+1}$$

于是有

$$\frac{y(x_{n+1})-y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}}{y(x_{n+1})-y_{n+1}^{(h)}}\approx\frac{1}{2^{p}}$$

从而, 得到事后误差估计

$$y(x_{n+1})-y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}\approx\frac{1}{2^{p}-1}(y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}-y_{n+1}^{(h)})$$

可见, 当$|y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}-y_{n+1}^{(h)}|\le\varepsilon$成立时,可取$y(x_{n+1})\approx y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}$, 否则应将步长再次减半进行计算, 直至满足精度要求. 然后再进行下一步的计算及相应步长的选择.

单步方法的收敛性

求解初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x, y), \quad a \le x \le b; \\ y(a) = \alpha. \end{cases}$$

的单步显式方法可以统一写为如下形式

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi(x_n, y_n, h)$$

其中$\Phi(x, y, h)$称为**增量函数**.

不同的单步方法对应着不同的增量函数.

对于Euler方法, 有

$$\Phi(x, y, h) = f(x, y)$$

对于改进的Euler方法, 有

$$\Phi(x, y, h) = \frac{1}{2}[f(x, y) + f(x + h, y + hf(x, y))]$$

类似地可写出与各阶R-K方法相应的增量函数.

对于任意给定的点x_n, 用单步方法求出精确解$y(x_n)$的似解y_n, 当步长h充分小时, y_n能否逼近$y(x_n)$? 这就是收敛性问题.

定义1 设$y(x)$是初值问题(1)的解, y_n是某单步方法产生的近似解. 如果对任意固定的点x_n, 均有

$$\lim_{h\to 0} y_n = y(x_n)$$

则称此单步方法是收敛的.

可见, 若某单步方法是收敛的, 则当$h\to 0$时, $e_n=y(x_n)-y_n$将趋于零.

注1: 此时的$e_n=y(x_n)-y_n$，不仅与y_{n+1}这一步计算有关，而且与前n步计算值$y_n, y_{n-1}, \ldots, y_1$都有关，称为**整体截断误差**，它与局部截断误差的定义不同.

注2: 上述关于收敛性的定义也适用于单步隐式方法和多步方法.

定理1 设某单步方法满足以下条件:

1) 它是p阶方法($p\geq1$),也即其局部截断误差为$O(h^{p+1})$;

2) 增量函数$\Phi(x, y, h)$在区域$\{a\leq x\leq b, -\infty<y<+\infty, 0\leq h\leq h_0\}$上连续, 且关于$y$满足Lipschitz条件, 也即存在常数$L>0$, 使

$$|\Phi(x,y,h)-\Phi(x,\bar{y},h)|\leq L|y-\bar{y}|, \quad \forall y,\bar{y},$$

3) 初始近似$y_0=y(a)=\alpha$;

则此单步方法是收敛的, 且存在与h无关的常数C, 使

$$|y(x_n)-y_n|\leq Ch^p$$

证明 因为单步方法

$$y_{n+1}=y_n+h\Phi(x_n, y_n, h),$$

是p阶方法, 故$y(x)$满足

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+h\Phi(x_n, y(x_n), h)+R_n(h)$$

其中局部截断误差$|R_n(h)|\le C_1h^{p+1}$.

记$e_n=y(x_n)-y_n$,则有

$$e_{n+1}=e_n+h[\Phi(x_n, y(x_n), h)-\Phi(x_n, y_n, h)]+R_n(h)$$

由Lipschitz条件得

$$\left|\Phi(x_n, y(x_n), h)-\Phi(x_n, y_n, h)\right| \le L\left|y(x_n)-y_n\right| = L\left|e_n\right|$$

因此

$$|e_{n+1}|\le(1+hL)|e_n|+C_1h^{P+1}$$

递推得到

$$|e_n| \le (1+hL)^n |e_0| + C_1 h^{p+1} \sum_{i=0}^{n-1} (1+hL)^i$$

$$\le (1+hL)^n |e_0| + \frac{C_1 h^{p+1}}{hL} [(1+hL)^n - 1]$$

注意到

$$1+hL \le e^{hL},\ (1+hL)^n \le e^{nhL} \le e^{L(b-a)}$$

则有

$$|e_n| \le |e_0| e^{L(b-a)} + \frac{C_1 h^p}{L} [e^{L(b-a)} - 1]$$

由于$e_0=y(a)-y_0=0$, 所以有

$$|e_n| \le \frac{C_1 h^p}{L} [e^{L(b-a)} - 1] = Ch^p$$

证毕.

例1 对于初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x, y), \quad a \le x \le b; \\ y(a) = \alpha. \end{cases}$$

设$f(x, y)$连续且关于y满足Lipschitz条件, 请分析Euler方法的收敛性.

解: 由于Euler方法的格式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_0 = \alpha, \ \ n = 0, 1, 2, \cdots, N-1 \end{cases}$$

它是1阶方法. 其增量函数 $\Phi(x, y, h)=f(x, y)$, 因此增量函数连续并关于y满足Lipschitz条件. 由于$y_0=y(a)$, 初值也是精确的, 根据定理1, 此方法收敛.

它的整体截断误差满足:

$$|e_n| = |y(x_n) - y_n| \le Ch$$

例2 对于初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x,y), \quad a \le x \le b; \\ y(a) = \alpha. \end{cases}$$

设$f(x, y)$连续且关于y满足Lipschitz条件, 请分析改进的Euler方法的收敛性.

解: 由于改进的Euler方法的格式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1) \\ y_0 = \alpha, \ \ n = 0,1,2\cdots, N-1 \end{cases}$$

将其改写为:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n))] \\ y_0 = \alpha, \quad n = 0, 1, 2 \cdots, N-1 \end{cases}$$

它是2阶方法, 且可见其增量函数为

$$\Phi(x, y, h) = \frac{1}{2}[f(x, y) + f(x + h, y + hf(x, y))]$$

显然它是连续函数, 并且对于$\forall y, \bar{y}$, 均有

$$\left|\Phi(x, y, h) - \Phi(x, \bar{y}, h)\right|$$

$$\le \frac{1}{2}\left|[f(x, y) + f(x + h, y + hf(x, y))] - [f(x, \bar{y}) + f(x + h, \bar{y} + hf(x, \bar{y}))]\right|$$

$$= \frac{1}{2}\left|f(x, y) - f(x, \bar{y}) + f(x + h, y + hf(x, y)) - f(x + h, \bar{y} + hf(x, \bar{y}))\right|$$

$$\leq \frac{1}{2}\{|f(x,y)-f(x,\bar{y})|+|f(x+h,y+hf(x,y))-f(x+h,\bar{y}+hf(x,\bar{y}))|\}$$

$$\leq \frac{1}{2}\{L|y-\bar{y}|+L|y+hf(x,y)-(\bar{y}+hf(x,\bar{y}))|\}$$

$$=\frac{1}{2}\{L|y-\bar{y}|+L|y-\bar{y}+hf(x,y)-hf(x,\bar{y})|\}$$

$$\leq \frac{1}{2}\{L|y-\bar{y}|+L|y-\bar{y}|+Lh|f(x,y)-f(x,\bar{y})|\}$$

$$\leq \frac{1}{2}\{L|y-\bar{y}|+L|y-\bar{y}|+L^2h|y-\bar{y}|\}$$

$$=\frac{1}{2}L(2+Lh)|y-\bar{y}|$$

故当 $h \le h_0$ 时, Φ关于y满足h常数为 $\frac{1}{2}L(2+h_0 L)$的Lipschitz条件;并且其初值满足

$$y_0 = \alpha = y(a)$$

综上可知, 根据定理1, 改进的Euler方法是收敛的, 且其整体截断误差满足

$$|e_n| = |y(x_n) - y_n| \le Ch^2$$

类似可验证其他各阶R-K方法的收敛性.

两种收敛性的区别

本章中涉及到的两种收敛性的定义是不同的

定义1 设$y(x)$是初值问题(1)的解, y_n是某单步方法产生的近似解. 如果对任意固定的点x_n, 均有

$$\lim_{h\to 0} y_n = y(x_n)$$

则称此单步方法是收敛的.

(1) $$\lim_{h\to 0} y_n = y(x_n)$$

关于梯形公式的迭代计算

$$\begin{cases} y_{n+1}^{[0]} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{[k+1]} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[k]})] \\ \qquad k = 0,1,2,\ldots\ldots \\ y_0 = \alpha, \quad n = 0,1,2\cdots, N-1 \end{cases}$$

预估

校正

(2)

$$\lim_{k\to\infty} y_{n+1}^{[k]} = y_{n+1}$$

两种收敛定义的对比

(1) $$\lim_{h\to 0} y_n = y(x_n)$$

(2) $$\lim_{k\to\infty} y_{n+1}^{[k]} = y_{n+1}$$

此收敛不是彼收敛.

单步方法的稳定性

在关于收敛性的讨论中, 我们总是假设没有发生舍入误差, 但实际情形并非如此. 例如, 初始数据可能存在误差, 计算过程中也会不可避免地产生舍入误差, 这些误差的传播和积累都会对数值计算的精确程度造成影响. 实际计算的数值解能否作为精确解的近似, 取决于计算误差是否可控制, 这就涉及到数值方法稳定性的概念.

收敛性反映差分公式本身的截断误差对数值解的影响; 稳定性反映计算过程中舍入误差对数值解的影响. 只有既收敛又稳定的差分公式才有实用价值.

符号表示

符号	含义	是否考虑误差
$y(x_n)$ y_n	x_n处的精确值	无误差
$\bar{y}_n$	x_n处的(理论)计算值	只考虑截断误差的影响 不考虑舍入误差的影响
	x_n处的(实际)计算值	考虑舍入误差的影响

定义1 对于某给定的初值问题, 取定步长h, 用某差分方法进行计算时, 假设只在一个节点值y_n上产生计算误差δ(即 $\overline{y}_n = y_n + \delta$), 如果这个误差引起的以后各节点计算值y_m (m>n)的变化均不超过δ, 则称此差分方法是**绝对稳定的**.

讨论数值方法的稳定性, 通常仅限于典型的**试验方程**

$$\frac{dy}{dx} = \lambda y$$

其中λ是复数且$\mathrm{Re}(\lambda)<0$.

定义2 将单步方法用于解试验方程, 假设得到

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

若满足条件

$$|E(\lambda h)| < 1$$

则称此单步方法是**绝对稳定的**.

在复平面上关于变量λh满足 $|E(\lambda h)| < 1$ 的区域称为此方法的**绝对稳定域**, 它与实轴的交集称为**绝对稳定区间**.

注: 在上述定义中规定严格不等式成立, 是为了和线性多步方法的绝对稳定性定义一致. 事实上对于单步方法当

$$|E(\lambda h)| = 1$$

时也可以认为误差没有增长(即稳定的).

例1 试推导将Euler方法应用于求解试验方程

$$\frac{dy}{dx} = \lambda y$$

时的绝对稳定域和绝对稳定区间.

解: Euler方法此时的格式为

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

也即

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

假设只在计算y_n时有舍入误差δ_n (即$\bar{y}_n = y_n + \delta_n$), 则计算$y_{n+1}$时产生的误差$\delta_{n+1}$必然是只由$\delta_n$引起的, 易见二者间存在关系

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

类似地可推得计算每个$y_m(m>n)$时产生的误差δ_m与δ_n之间的关系为:

$$\delta_m = (1+\lambda h)\delta_{m-1} = \cdots = (1+\lambda h)^{m-n}\delta_n$$

若要

$$|\delta_m| < |\delta_n|$$

必须且只需

$$|1+\lambda h| < 1$$

因此, Euler方法的绝对稳定域是$|1+\lambda h|<1$所确定的区域, 它是复平面上以-1为中心以1为半径的的一个圆域.

Euler方法的绝对稳定区间是(-2, 0).

对隐式单步方法也可类似地讨论稳定性.

例 试推导将梯形公式应用于求解试验方程

$$\frac{dy}{dx}=\lambda y$$

时的绝对稳定域和绝对稳定区间.

解: 梯形公式此时的格式为:

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}(\lambda y_n+\lambda y_{n+1})$$

也即

$$y_{n+1}=\frac{1+\frac{\lambda h}{2}}{1-\frac{\lambda h}{2}}y_n$$

与前面的分析完全类似, 可得绝对稳定条件为

$$\left|\frac{1+\frac{\lambda h}{2}}{1-\frac{\lambda h}{2}}\right|<1$$

更进一步, 若设

$$\frac{1}{2}\lambda h=a+bi$$

则

$$\left|\frac{1+\frac{\lambda h}{2}}{1-\frac{\lambda h}{2}}\right|=\left|\frac{1+a+bi}{1-a-bi}\right|=\frac{\sqrt{(1+a)^2+b^2}}{\sqrt{(1-a)^2+b^2}}$$

因此, 绝对稳定条件的等价条件为: $\mathrm{Re}(\lambda h)<0$

于是绝对稳定域为 $\mathrm{Re}(\lambda h)<0$ 所确定的区域, 它是复平面的左半平面.

绝对稳定区间为: $(-\infty,0)$

由于Re(λ)<0, 所以稳定条件对任意步长h恒成立, 这是隐式公式的优点.

思考：请从隐式公式的格式特点入手, 分析隐式公式具有较好稳定性的原因.

一些常用方法的绝对稳定区间

方　法	方法的阶数	稳 定 区 间
Euler方法	1	(-2 ，0)
梯形方法	2	(-∞，0)
改进Euler方法	2	(-2 ，0)
二阶R-K方法	2	(-2 ，0)
三阶R-K方法	3	(-2.51 ，0)
四阶R-K方法	4	(-2.78 ，0)

例 考虑初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = -30y, \quad 0 \le x \le 1; \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

取步长h=0.1 , 利用Euler方法计算$y(1)$的近似值y_{10}. [精确解$y(x)$=e^{-30x}]

解 此时Euler方法的格式为:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \lambda h y_n \\ y_0 = 1, \quad n = 1, 2, \ldots N-1. \end{cases}$$

在题设条件下即为

$$\begin{cases} y_{n+1} = -2y_n \\ y_0 = 1, \quad n = 1, 2, \ldots N-1. \end{cases}$$

因$y_0=1$, 计算得计算解为

$$y_{10}=1024,$$

而精确解为

$$y(1)=9.357623\times10^{-14},$$

计算严重失真.

这是因为$\lambda h=-3$不在Euler方法的稳定区间(-2, 0)内, 因而不满足稳定条件, 造成舍入误差不可控制.

能否改善方法, 避免这一现象的发生?

若取h=0.01,计算得$y_{100}=3.234477\times10^{-16}$.
若取h=0.001,计算得$y_{1000}=5.911998\times10^{-14}$.
若取h=0.0001,计算得$y_{10000}=8.945057\times10^{-14}$.
若取h=0.00001,计算得$y_{100000}=9.3156\times10^{-14}$.
这些近似解都比较靠近精确解$y(1)$, 因为此时

$$\lambda h \in (-2, 0)$$

满足Euler方法的稳定条件, 舍入误差是可控制的, 而且h较小时截断误差也比较小.

单步显式方法的稳定性与步长密切相关, 在一种步长下是稳定的差分公式, 取大一点步长就可能是不稳定的.

思考题: **步长h太小有无弊端?**

隐式方法的优越性在于: 可以任意选取步长h. 既很容易达到稳定条件, 又不耗费太大的计算量.

线性多步方法

单步方法是自开始方法, 计算简便, 但一般精度较低.精度较高的一些单步方法, 譬如四阶R-K方法需要计算四次函数值, 计算量较大.

由于在计算y_{n+1}时, 已经知道y_n , y_{n-1} ,……, 及$f(x_n, y_n)$, $f(x_{n-1}, y_{n-1})$,……, 如果能否充分利用这些信息, 就可望构造出精度高、计算量小的差分公式, 这就是线性多步方法.

利用待定参数法构造线性多步方法

r+1步线性多步方法的一般形式为

$$y_{n+1}=\sum_{i=0}^{r}\alpha_i y_{n-i}+h\sum_{i=-1}^{r}\beta_i f_{n-i}$$

当$\beta_{-1}\neq 0$时, 公式为隐式公式, 反之为显式公式. 参数$\{\alpha_i, \beta_i\}$的选择原则是使方法的局部截断误差为

$$y(x_{n+1})-y_{n+1}=O(h^{r+2})$$

这里, 局部截断误差是指在$y(x_{n-i})=y_{n-i}$, $i=0,1,\ldots,r$的前提下的截断误差$y(x_{n+1})-y_{n+1}$.

例 选取参数α, $\beta_0, \beta_1, \beta_2$, 使三步方法

$$y_{n+1}=\alpha y_n+h(\beta_0 f_n+\beta_1 f_{n-1}+\beta_2 f_{n-2})$$

为三阶方法.

解 设$y(x_n)=y_n$, $y(x_{n-1})=y_{n-1}$, $y(x_{n-2})=y_{n-2}$, 则有

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

$$f_{n-1}=f(x_{n-1},y(x_{n-1}))=y'(x_{n-1})=y'(x_n-h)$$

$$=y'(x_n)-hy''(x_n)+\frac{1}{2}h^2y'''(x_n)-\frac{1}{6}h^3y^{(4)}(x_n)+O(h^4)$$

$$f_{n-2}=f(x_{n-2},y(x_{n-2}))=y'(x_{n-2})=y'(x_n-2h)$$

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

于是有

$$y_{n+1} = \alpha y(x_n) + h(\beta_0 + \beta_1 + \beta_2)y'(x_n) - h^2(\beta_1 + 2\beta_2)y''(x_n)$$
$$+h^3\left(\frac{1}{2}\beta_1 + 2\beta_2\right)y'''(x_n) - \frac{1}{6}h^4(\beta_1 + 8\beta_2)y^{(4)}(x_n) + O(h^5)$$

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{1}{2}h^2y''(x_n)$$
$$+\frac{1}{6}h^3y'''(x_n) + \frac{1}{24}h^4y^{(4)}(x_n) + O(h^5)$$

若使: $y(x_{n+1})-y_{n+1}=O(h^4)$, 只要α, β_0, β_1, β_2满足:

$$\begin{cases} \alpha = 1 \\ \beta_0 + \beta_1 + \beta_2 = 1 \\ \beta_1 + 2\beta_2 = -\dfrac{1}{2} \\ \beta_1 + 4\beta_2 = \dfrac{1}{3} \end{cases}$$

解之得:

$$\alpha=1,\quad \beta_0=\frac{23}{12},\quad \beta_1=-\frac{4}{3},\quad \beta_2=\frac{5}{12}$$

于是得到三步三阶显式差分公式

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{12}\left(23f_n-16f_{n-1}+5f_{n-2}\right)$$