第11章 常微分方程初值问题的数值解法

常微分方程
$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

上述方程在 $f(x,y)$ 在 y 方向上满足 Lipschiz 条件时，解唯一．不过我们这里关心的是数值解法。

若求 $[x_0, b]$ 上的数值解，引入点列 $\{x_i\}$，等步长时：

$$x_n = x_0 + nh \quad ，其中 \ h = \frac{b-x_0}{N} \quad , n = 1, 2, \cdots, N$$

x_i 称为节点，h 称为步长．

数值算法的迭代次数 ＝ 分段数 N 或 节点数 -1

单步法：$y_{n+1} = f(y_n)$ （欧拉方法）

多步法：$y_{n+1} = f(y_n, y_{n-1}, \cdots, y_{n-k})$ （adams 方法）

显式法：$y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, h)$ （欧拉方法）

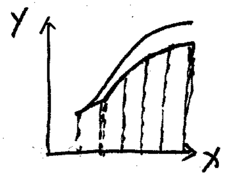
隐式法：$y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, y_{n+1}, h)$ （向后欧拉方法）

11.1 几种简单的数值方法

1° 欧拉方法

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

注：本章用 y_n 表示数值解，$y(x_n)$ 表示精确解．



欧拉方法的几何意义（折线法）：

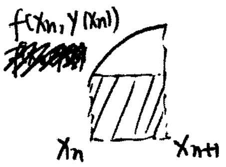
用一条折线近似代替 $y(x)$，折线在 $(x_n, y_n) \sim (x_{n+1}, y_{n+1})$ 段的斜率为 $y(x)$ 在点 (x_n, y_n) 处的斜率．

泰勒展开意义：

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + y'(x_n)h + h.o.t.$$

作代换 $y(x_n) \to y_n$，$y(x_{n+1}) \to y_{n+1}$，忽略高阶量得

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



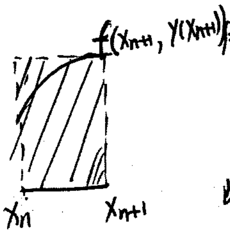
左矩形公式意义：

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

作近似得，积分 $= hf(x_n, y(x_n))$

作代换 $y(x_n) \to y_n$，$y(x_{n+1}) \to y_{n+1}$，即得欧拉法．

2° 向后欧拉方法（后退欧拉方法）



用右矩形公式作近似可得向后欧拉方法：

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

此方法为隐式方法，需求解上述非线性方程。

以欧拉方法的结果做初值，用迭代法求解：

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

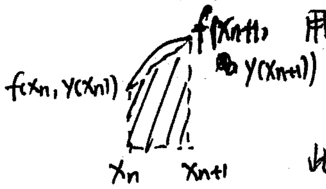
注：1° $\because \left| y_{n+1}^{(k+1)} - y_{n+1}^{(k)} \right| = h \left| f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)}) - f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k-1)}) \right|$

$$\le hL \left| y_{n+1}^{(k)} - y_{n+1}^{(k-1)} \right|$$

$\therefore$ $0 < hL < 1$ 时，迭代收敛。

$\therefore$ 只要h足够小，迭代过程一定收敛

3° 梯形方法 （单步



用梯形公式作近似可得梯形方法：

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

此方法为隐式方法，上述方程用迭代法求解。

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + h f(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + \frac{h}{2}\left[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)}) \right] \end{cases} \quad (k=0,1,2,\cdots)$$

注：1° $\because \left| y_{n+1}^{(k+1)} - y_{n+1}^{(k)} \right| = \frac{h}{2} \left| f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)}) - f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k-1)}) \right|$

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

$\therefore$ $0 < \frac{hL}{2} < 1$时，迭代收敛。步长比向后欧拉方法宽一倍。

h适当时，收敛速度很快。

4° 改进欧拉方法

$$\begin{cases} \bar{y}_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1}) \right] \end{cases}$$

也就是只迭代一次的梯形方法。

此方法为显式方法，也可写成

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

5° 局部截断误差

定义：x_{n+1} 处的局部截断误差为

$$T_{n+1} = \begin{cases} y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\varphi(x_n, y(x_n), h) & \text{(显式方法)} \\ y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\varphi(x_n, y(x_n), y(x_{n+1}), h) & \text{(隐式方法)} \end{cases}$$

注：局部截断误差表示，假设前n步都没有误差，第n+1步引入的误差大小.

定义：若局部截断误差 $T_{n+1} = O(h^{p+1}) = o(h^p)$，

则称对应的数值解法为 p 阶方法。

注：这里的阶与科学计算中的定义是一致的，只是把 y' 下的 h 乘出来了。

1) 欧拉方法

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h f(x_n, y(x_n))$$
$$= y(x_n+h) - y(x_n) - h y'(x_n)$$
$$= \frac{1}{2} y''(x_n) h^2 + h.o.t$$
$$= O(h^2) = o(h)$$

所以，欧拉方法为一阶方法

2) 向后欧拉方法

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$$
$$= y(x_n+h) - y(x_n) - h y'(x_n+h)$$
$$= h y'(x_n) + \frac{1}{2} y''(x_n) h^2 - h y'(x_n) - h^2 y''(x_n) + h.o.t.$$
$$= -\frac{1}{2} y''(x_n) h^2 + h.o.t.$$
$$= O(h^2) = o(h)$$

所以，向后欧拉方法为一阶方法.

3) 梯形方法

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - \frac{h}{2}\left[f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))\right]$$
$$= y(x_n+h) - y(x_n) - \frac{h}{2}\left[y'(x_n) + y'(x_n+h)\right]$$
$$= \frac{h}{2} y(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(x_n) + \frac{h^3}{6} y'''(x_n) - \frac{h}{2} y(x_n) - \frac{h^2}{2} y''(x_n) - \frac{h^3}{4} y'''(x_n) + h.o.t$$
$$= -\frac{1}{12} y'''(x_n) h^3 + h.o.t$$
$$= O(h^3) = o(h^2)$$

所以，梯形方法为二阶方法

4) 改进欧拉方法

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

$$= y(x_n+h) - y(x_n) - \frac{h}{2}[y'(x_n) + f(x_n+h, y(x_n) + hy'(x_n))]$$

$$= y(x_n+h) - y(x_n) - \frac{h}{2}[2y'(x_n) + h\frac{\partial f(x_n, y(x_n))}{\partial x} + hy'(x_n)\cdot\frac{\partial f(x_n, y(x_n))}{\partial y} + O(h^2)]$$

$$= y(x_n+h) - y(x_n) - \frac{h}{2}[2y'(x_n) + \frac{df(x_n, y(x_n))}{dx}h + O(h^2)]$$

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

$$= O(h^3) = o(h^2)$$

所以，改进欧拉方法是二阶方法

11.2 R-K方法 (Runge-kutta方法；龙格-库塔法)

由数值积分公式可知

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))\,dx = h\sum_{i=1}^{r} c_i f(x_n + a_i h, y(x_n + a_i h)) + O(h^{r+1})$$

得到 r 级显式R-k方法：

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{r} c_i k_i \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_i = f(x_n + a_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j) \quad (i=2,\cdots,r) \end{cases}$$

其中 c_i, a_i, b_{ij} 为待定常数。

1° 二级显式R-k方法：

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(c_1 k_1 + c_2 k_2) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_n + a_2 h, y_n + b_{21} k_1 h) \end{cases}$$

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h(c_1 k_1 + c_2 k_2)$$

$$= y(x_n+h) - y(x_n) - h[c_1 f_n + c_2 f(x_n + a_2 h, y(x_n) + b_{21} h f_n)]$$

$$= y(x_n+h) - y(x_n) - c_1 h y'(x_n) - c_2 h[y'(x_n) + a_2 h f'_x + b_{21} h f'_y f_n + O(h^2)]$$

$$= (1 - c_1 - c_2) h y'(x_n) + (\tfrac{1}{2} - c_2 a_2) h^2 f'_x + (\tfrac{1}{2} - c_2 b_{21}) h^2 f'_y f_n + O(h^3)$$

要使 $T_{n+1}=O(h^3)$，则有

$$\begin{cases} c_1+c_2=1 \\ c_2a_2=\frac{1}{2} \\ c_2b_{21}=\frac{1}{2} \end{cases}$$

上述方程组解不唯一.

当 $c_2=1, c_1=0, a_2=b_{21}=\frac{1}{2}$ 时，为中点公式

当 $c_2=\frac{3}{4}, c_1=\frac{1}{4}, a_2=b_{21}=\frac{2}{3}$ 时，为Heun公式

当 $c_2=\frac{1}{2}, c_1=\frac{1}{2}, a_2=b_{21}=1$ 时，为改进欧拉方法.

上述方法均为二级二阶 R-K方法.

2° 四级四阶R-K方法

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+\frac{h}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4) \\ k_1=f(x_n, y_n) \\ k_2=f(x_n+\frac{1}{2}h, y_n+\frac{1}{2}hk_1) \\ k_3=f(x_n+\frac{1}{2}h, y_n+\frac{1}{2}hk_2) \\ k_4=f(x_n+h, y_n+hk_3) \end{cases}$$

注：此方法缺点是计算量较大。

事后估计：步长为h时，$T_{n+1}^{(h)}=y(x_{n+1})-y_{n+1}^{(h)}\approx C_nh^5$

步长为$\frac{h}{2}$时，$T_{n+1}^{(\frac{h}{2})}=y(x_{n+1})-y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}\approx 2C_n(\frac{h}{2})^5$

所以 $\left|T_{n+1}^{(\frac{h}{2})}\right|\approx\frac{1}{15}\left|y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}-y_{n+1}^{(h)}\right|$

3° 高阶R-K方法

R-K方法的级数与所能达到的最高阶数间的关系：

级数 r	1, 2, 3, 4	5, 6, 7	8, 9	10, 11, ···
最高阶数	r	$r-1$	$r-2$	$\le r-2$

上述关系部分说明了四阶方法流行的原因。

注：R-K方法仍是单步法，因为它只用到了非结点函数值，而不是以前节点的函数值。

11.3 单步法的进一步讨论

1° 收敛性

收敛：对于满足 Lipschitz 条件的常微分方程初值问题，

如果单步方法 $y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, h)$ 对 $\forall\, x \in [x_0, b]$：

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

则称此单步法收敛。

注：此定义同样适用于单步隐式方法和多步方法.

定理：对于满足 Lipschitz 条件的常微分方程初值问题，

如果单步方法的局部截断误差为 $O(h^{p+1})$ $(p\geq 1)$，

则此单步方法收敛，且总体截断误差为 $p-1$.

$$y(x_n) - y_n = O(h^p)$$

注：此定理说明总体截断误差总比局部截断误差低一阶。

证明：记 $e_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$

$$\tilde{y} = y(x_n) + h\varphi(x_n, y(x_n), h)$$

则
$$\begin{aligned}
|e_{n+1}| &= |y(x_{n+1}) - \tilde{y} + \tilde{y} - y_{n+1}| \\
&\leq |y(x_{n+1}) - \tilde{y}| + |\tilde{y} - y_{n+1}| \\
&\leq ch^{p+1} + |y(x_n) - y_n| + h|\varphi(x_n, y(x_n), h) - \varphi(x_n, y_n, h)| \\
&\leq ch^{p+1} + |y(x_n) - y_n| + hL|y(x_n) - y_n| \\
&= ch^{p+1} + (1+hL)|e_n| \qquad (c>0)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\therefore |e_n| &\leq ch^{p+1}[1 + (1+hL) + \cdots + (1+hL)^{n-1}] + (1+hL)^n|e_0| \\
&= ch^{p+1}\frac{1-(1+hL)^n}{1-(1+hL)} \\
&= \frac{c}{L}h^p[(1+hL)^n - 1]
\end{aligned}$$

$\because\ 1+hL \leq e^{hL}$

$\therefore\ (1+hL)^n \leq e^{nhL} = e^{xL}$ 是个常数

$\therefore\ |e_n| \leq c_1 h^p = O(h^p)$，收敛性是显然的. $\square$

2° 稳定性

用试验方程 $y' = \lambda y$ ($\lambda \in \mathbb{C}$, 且 $Re(\lambda) < 0$)

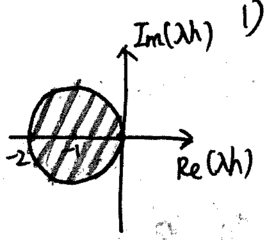
检验数值方法的稳定性，得到 $y_{n+1} = E(\lambda h) y_n$.

绝对稳定：放大因子 $|E(\lambda h)| \le 1$ 时，称方法绝对稳定.

绝对稳定区域：复平面上使 $|E(\lambda h)| \le 1$ 的区域.

绝对稳定区间：绝对稳定区域与实轴的交集.

1) 欧拉方法

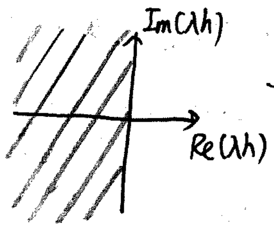


$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n = (1+\lambda h) y_n$$

$\therefore E(\lambda h) = 1+\lambda h$

绝对稳定区间为 $[-2, 0]$

2) 向后欧拉方法



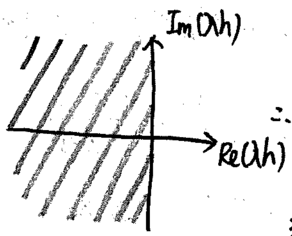
$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1}$$

$\therefore E(\lambda h) = \dfrac{1}{1-\lambda h}$

绝对稳定区间为 $(-\infty, 0]$，且 A-稳定.

(定义：A-稳定：在整个左半复平面绝对稳定的方法 A-稳定.)

3) 梯形公式

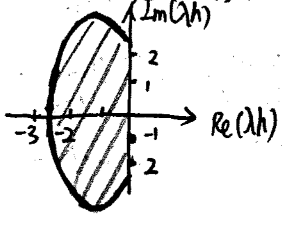


$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\lambda (y_n + y_{n+1})$$

$\therefore E(\lambda h) = \dfrac{2+\lambda h}{2-\lambda h}$

绝对稳定区间为 $(-\infty, 0]$，且 A-稳定.

4) 经典四阶 R-K 方法



$$y_{n+1} = \left[1 + h\lambda + \frac{1}{2}(h\lambda)^2 + \frac{1}{6}(h\lambda)^3 + \frac{1}{24}(h\lambda)^4\right] y_n$$

绝对稳定区间为 $[-2.785, 0]$

11.4 线性多步法

将初值问题写成
$$\begin{cases} y(x_{n+1}) - y(x_{n-p}) = \int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} f(x, y(x))\,dx \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

改变 p 的取值 和 数值积分方法，可以得到一些线性多步法。

1° Simpson 方法

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

由 Simpson 积分公式，得

$$y(x_{n+1}) - y(x_{n-1}) = \frac{h}{3}\left[f(x_{n-1}, y(x_{n-1})) + 4f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))\right]$$

记余项 $-\frac{h^5}{90}y^{(5)}(\xi_n)$ （$\because F^{(4)} = y^{(5)}$）

得到 Simpson 方法（用数值解 y_i 代替精确解 $y(x_i)$）

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}(f_{n-1} + 4f_n + f_{n+1})$$

它是个四阶方法.（上面 f_i 表示 $f(x_i, y_i)$）.

2° Adams 外推公式

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

记 $F(x) = f(x, y(x))$.

用 $x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, x_{n-3}$ 四点构造三次拉格朗日插值多项式

$$\begin{aligned}\psi_3(x) = {} & \frac{x-x_{n-1}}{x_n-x_{n-1}}\cdot\frac{x-x_{n-2}}{x_n-x_{n-2}}\cdot\frac{x-x_{n-3}}{x_n-x_{n-3}}F(x_n) \\ & + \frac{x-x_n}{x_{n-1}-x_n}\cdot\frac{x-x_{n-2}}{x_{n-1}-x_{n-2}}\cdot\frac{x-x_{n-3}}{x_{n-1}-x_{n-3}}F(x_{n-1}) \\ & + \frac{x-x_n}{x_{n-2}-x_n}\cdot\frac{x-x_{n-1}}{x_{n-2}-x_{n-1}}\cdot\frac{x-x_{n-3}}{x_{n-2}-x_{n-3}}F(x_{n-2}) \\ & + \frac{x-x_n}{x_{n-3}-x_n}\cdot\frac{x-x_{n-1}}{x_{n-3}-x_{n-1}}\cdot\frac{x-x_{n-2}}{x_{n-3}-x_{n-2}}F(x_{n-3})\end{aligned}$$

余项 $R_3(x) = \frac{F^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})(x-x_{n-3})$

$(x_{n-3} < \xi < x_{n+1})$

得到 Adams 外推公式

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

误差 $\int_{x_n}^{x_{n+1}} R_3(x)\,dx = \frac{251}{720}h^5 y^{(5)}(\eta)$ $(x_{n-3} < \eta < x_{n+1})$

这是一个四阶显式方法.

3° Adams 内插公式

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

以 $x_{n+1}, x_n, x_{n-1}, x_{n-2}$ 四点构造三次拉格朗日插值多项式.

同理可得 Adams 内插公式

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

误差 $\int_{x_n}^{x_{n+1}} R_3(x)dx=\int_{x_n}^{x_{n+1}}\frac{F^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_{n+1})(x-x_n)(x-x_{n-1})\cdot(x-x_{n-2})\,dx$

$$=-\frac{19}{720}h^5y^{(5)}(\eta^*) \quad (x_{n-2}<\eta^*<x_{n+1})$$

这是一个四阶隐式方法.

求解方式:

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

$(k=0,1,2,\cdots)$

内插公式比外推公式的收敛性好。

注: 用多步法计算时,需要先知道多个初值,这些出发值常用同阶的单步法以小步长计算,如四阶 R-K 方法。

与直接用四阶 R-K 方法相比,四阶多步法可能效率不高,且实现也较复杂,大家都用四阶 R-K 方法。

11.5 预估-校正方法及其修正方案

预估: 用显式方法计算迭代初值. 记为 P (Predictor)

校正: 用隐式方法进行迭代. 记为 C (Corrector)

将对函数 f 作一次求值 (Evaluation) 记为 E.

只校正一次的方法可记为 PEC,如改进欧拉方法、Adams 预估-校正方法。(分别为二阶、四阶)

记第 n 步的预估值为 P_n,校正值为 C_n,对 Adams 方法

$$y(x_{n+1})-P_{n+1}=\frac{251}{720}h^5y^{(5)}(\eta_n) \quad (\eta_n\in(x_{n-3},x_{n+1}))$$

$$y(x_{n+1})-C_{n+1}=-\frac{19}{720}h^5y^{(5)}(\eta_n^*) \quad (\eta_n^*\in(x_{n-2},x_{n+1}))$$

认为$y^{(5)}(\eta_n)$与$y^{(5)}(\eta_n^*)$相差不大，则

$$C_{n+1}-P_{n+1}=\frac{270}{720}h^5y^{(5)}(\eta_n)$$

$\therefore$ $y(x_{n+1})-P_{n+1}\approx\frac{251}{270}(C_{n+1}-P_{n+1})$

$$y(x_{n+1})-C_{n+1}\approx-\frac{19}{270}(C_{n+1}-P_{n+1})$$

得到预估-校正的修正方案（PMECME），（修正记为M, modifier）

初始的 C_n, y_n 怎么算？

$$\begin{cases}\text{预估} & P_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}(55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3})\\ \text{修正} & m_{n+1}=P_{n+1}+\frac{251}{270}(C_n-P_n)\\ \text{校正} & C_{n+1}=y_n+\frac{1}{24}[9f(x_{n+1},m_{n+1})+19f_n-5f_{n-1}+f_{n-2}]\\ \text{修正} & y_{n+1}=C_{n+1}-\frac{19}{270}(C_{n+1}-P_{n+1})\end{cases}$$

这是一个五阶方法。（可以证明）　注：第一个E指求$f(x_{n+1},m_{n+1})$，
第二个E指求f_{n+1}，即$f(x_{n+1},y_{n+1})$。

11.6 常微分方程组和高阶微分方程的数值解法

1° 微分方程组只需要计算n次的计算格式

2° 高阶微分方程总能化成方程组形式.

注：1° 当函数值$f(x,y)$计算相对容易时，可采用单步法；

函数值计算比较复杂时，使用多步法，因为用到的函数值是以前算过的，可以存起来反复用。

这是计算量上的考虑。