常微分方程数值方法及其在力学中的应用

凌复华　殷学纲　何冶奇　编著

重庆大学出版社

内 容 简 介

本书在简述常微分方程的一些重要理论结果后，首先介绍了初值问题的各种解法，特别是变步长，变阶次的单步法和多步法以及外推法，然后叙述边值问题的各种解法，如差分法、样条函数配点法和变分法，特别介绍了应用中颇为成功的打靶法。接着介绍的是常用于求解动力响应的直接积分方法，如Newmark法、Wilson-θ法、Houboldt法和样条—加权残值法等。最后一章介绍了在力学中应用的一些例子，例如非线性振动、边界层型边值问题，最优控制问题和非线性动力响应等。本书附有习题和几个计算程序，可供读者练习和应用。

本书可用作力学专业或其他工程学科的高年级和研究生教材，也适用于希望了解或应用常微分方程数值计算的其他读者。

常微分方程数值方法及其在力学中的应用

凌复华　殷学纲　何冶奇　编著

责任编辑　朱庆祥　周任

•

重庆大学出版社出版发行

新华书店经销

重庆大学出版社印刷厂印刷

•

开本：787×1092　1/16　印张：13.25　字数：331千

1990年1月第1版　1990年1月第1次印刷

印数1—4000

标准书号：ISBN 7—5642—0190—X / O·28课　定价：2.66元

前　　言

近年来，笔者从事非线性振动和混沌学方面的研究工作，需要对常微分方程进行大量数值计算，从而也对数值方法本身进行了一些研究。1982年起笔者为本校研究生开设了“常微分方程数值计算”这门课，写了讲义，并在国内一些大学就此作过专题讲学和演讲。本书便是在这本讲义的基础上修改而成的。殷学纲同志在动力响应的直接数值积分法方面做了一些研究工作，笔者请他写了本书第四章和第五章中的第四节，以包括对力学工作者颇有价值的这部分材料。何冶奇同志也担任过“常微分方程数值计算”这门课，并对讲义提了不少建设性的意见，编制了一些计算程序，还对本书的原稿进行了最后的整理。因此，这本书是我们三人合作的产物。

随着电子计算机的广泛应用，计算数学也有了极大的发展。在常微分方程的数值计算方面，特别值得注意的是求解初值问题的变步长、变阶次的高效率算法和求解边值问题的打靶法。这些方法在目前国内出版的教科书中尚未得到充分的反映。本书力图介绍这些最新成果，但也包括了重要的传统内容。本书取材时着眼于应用，虽给出了一些必要的、有启发性的数学证明，但并不过分追求数学上的严格性和完整性。本书的另一特点，是提供这些数值方法在力学中应用的一些范例（其中多数是作者们的研究成果），以使读者从中得到启发，并应用这些数值方法去解决遇到的力学问题和其他问题。

本书所附的几个计算程序，都曾在微型计算机上经过长期的使用。

本书可用作力学专业或其他工程学科的高年级和研究生教材，也可供从事微分方程数值计算的其他人员阅读，我们欢迎来自各方面的批评和改进意见。

凌复华　于上海交通大学

一九八七年八月

引 言

自然界的一切系统（有生命的和无生命的），通常都可以用一个积分-微分方程组来描述。在许多情况下可以略去与积分有关的项，从而得到一个微分方程组。当问题只与一个变量有关时（例如离散系统的动力学问题或只在一个座标方向上有变化的连续系统），出现的是常微分方程组，常微分方程的研究方法大致可分为三类：

1. 简单常微分方程的分析解。例如常系数线性常微分方程和教科书中经常提到的那些特别如一阶方程中的可分离变量型方程、一阶线性方程、全微分方程、齐次方程和Bernoulli方程等。

2. 常微分方程的定性理论。例如对奇点、极限环和解的渐近图态等的分析。

3. 常微分方程的数值计算。绝大多数常微分方程只能用数值方法计算，电子计算机的飞速发展，又为数值方法的应用展示了日益广阔的前景。

下面先来明确一下本书要处理的问题。在最简单的情况上，待知的是实变量x的一个可导函数$y=y(x)$，它的导数$y'(x)$满足一个形为$y'(x)=f(x, y(x))$的方程。或简单地写成

$$y'=f(x, y), \tag{0.1}$$

这时我们说它是一个常微分方程。一般说来，常微分方程（0.1）具有无限多个不同的函数$y(x)$作为解。通过附加的限制条件可把某些解从全部解所构成的集合中挑选出来，例如要求对于给定的(x_0, y_0)成立以下等式：

$$y(x_0)=y_0, \tag{0.2}$$

这就构成了所谓初值条件。

较为一般的是由n个常微分方程构成的方程组

$$y'_1=f_1(x, y_1, y_2, \cdots, y_n)$$

$$y'_2=f_2(x, y_1, y_2, \cdots, y_n)$$

$$\cdots\cdots$$

$$y'_n=f_n(x, y_1, y_2, \cdots, y_n),$$

它是关于实变量x的n个待求实函数$y_i(x)(i=1, 2, \cdots, n)$的方程组。类似于（0.1），可把这个方程组写成向量形式

$$y'=f(x, y), \quad y'=(y'_1, \cdots, y'_n)^T,$$

$$f(x, y)=\begin{pmatrix} f_1(x, y_1, \cdots, y_n) \\ \vdots \\ f_n(x, y_1, \cdots, y_n) \end{pmatrix},$$

相应于初值条件（0.2）有

$$y(x_0)=y_0=(y_{10},\ \cdots,\ y_{n0})^T \tag{0.4}$$

除了其中只出现的末知函数$y(x)$的一阶导数的一阶常微分方程（0.1）和（0.3）外，还有以上形式的m阶常微分方程

$$y^{(m)}=f(x,\ y,\ y^{(1)},\ \cdots,\ y^{(m-1)}), \tag{0.5}$$

但总可以通过引入辅助函数

$$\begin{aligned} z_1(x) &= y(x) \\ z_2(x) &= y^{(1)}(x) \\ &\vdots \\ z_m(x) &= y^{(m-1)}(x) \end{aligned}$$

把它转化成一个等价常微分方程组

$$z=\begin{pmatrix} z_1' \\ z_2' \\ \vdots \\ z_{m-1}' \\ z_m' \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_m \\ f(x,\ z_1,\ z_2,\ \cdots,\ z_m) \end{pmatrix}。 \tag{0.6}$$

所谓m阶常微分方程（0.5）的初值问题是求一个m次可导的函数$y(x)$，它满足（0.5）和以下形式的初值条件

$$y^{(i)}(x_0)=y_{i0},\ i=0,\ 1,\ \cdots,\ m-1。$$

在第二章中将讨论初值问题。

比初值问题更一般地有所谓边值问题，这时微分方程组（0.3）的待求解应满足以下形式的边界条件

$$r\ (y(a),\ y(b))=0, \tag{0.7}$$

其中$a\neq b$是两个不同的数，并且

$$r\ (u,\ v)=\begin{pmatrix} r_1(u_1,\ \cdots,\ u_n,\ v_1,\ \cdots,\ v_n) \\ r_2(u_1,\ \cdots,\ u_n,\ v_1,\ \cdots,\ v_n) \\ \vdots \\ r_n(u_1,\ \cdots,\ u_n,\ v_1,\ \cdots,\ v_n) \end{pmatrix}$$

是由$2n$个变量u_1，…，u_n，…，v_1，…，v_n 的n个给定函数r_i构成的向量。在第三章中将讨论这类问题。

当求动力响应时大量用到常微分方程的计算，这种计算只要求近似解轨线与精确轨线在某些特点上相似，而不是近似解与精确解点点相互接近。

这类问题是一类专门的初值问题，对此第二章提供的方法不那么经济，力学工作者发展了另一套数值方法，我们称之为动力响应的直接积分法，将在第四章中介绍。

在二至四章中介绍的各种方法中，并不打算构造待求函数的一个公式形式的表达——一般说来，这是根本不可能的——而只是对一些设定的横座标x_i（$i=0,\ 1,\ \cdots$）确定精确解$y_i=y(x_i)$的近似值$\eta_i=\eta(x_i)$。设定的横座标通常是等距的：$x_i=x_0+ih$。我们把近似值

η_i更明确地写成$\eta(x_i, h)$，因为η_i如同x_i那样取决于采用的步长h。

在第五章中，对一些来自力学问题的实例应用前几章所述的各种方法。针对具体的应用问题，有时需对数值方法本身作一些变动和改进。

除了在以下各章中将引用的参考文献外，关于常微分方程的数值计算有Henrici(1962）的经典著作及Stetter（1973）的较新论述，还值得注意Grigorieff（1972，1977），Keller（1968），Shampine-Gordon(1975）及Stoer-Bulirsch（1980），关于动力响应的直接积分法请参看Bathe-Wilson（1976）及Bathe（1982），应用方面请参看凌复华（1988）。

目　　录

第一章　常微分方程理论中的一些定理

本章叙述常微分方程理论的一些结果，这些结果对于数值计算是有用的。我们并未给出全部证明，对此有兴趣的读者请参看所引的有关专著。下面（参看（0.3））总记

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

为n个常微分方程构成的方程组，$\|\cdot\|$为在$\mathbf{R}^n$上的一个范数，$\|A\|$为与之相容的矩阵范数：

$$\|A\|=\max_{\|x\|=1}\|Ax\|。$$

于是可以证明（例如看Henrici（1962，3-1节），如果f满足一些简单的正则性条件，则初值问题（0.3），（0.4），从而（0.1），（0.2），恰好有一个解。

定理1.1　设函数f在带域$S=\{(x,\ y)\,|a\leqslant x\leqslant b,\ y\in\mathbf{R}^n\}$上有定义且连续，这里$a$、$b$是有限的。又存在一个常数$L>0$，使得

$$\|f(x,\ y_1)-f(x,\ y_2)\|\leqslant L\|y_1-y_2\| \tag{1·1}$$

对于所有$x\in[a,\ b]$和所有y_1，$y_2\in\mathbf{R}^n$成立（"Lipschitz条件"），则对每个$x_0\in[a,\ b]$和每个$y_0\in\mathbf{R}^n$恰存在一个函数$y(x)$，满足

1）．$y(x)$在$x\in[a,\ b]$连续且连续可导；

2）．对$x\in[a,\ b)$有$y'(x)=f(x,\ y(x))$；

3）．$y(x_0)=y_0$。

由中值定理容易得出，Lipschisz条件特别当偏导数$\partial f_i/\partial y_j(i,\ j=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$在带域$S$上存在、连续和有界时成立。下面我们用$F_N(a,\ b)$记所有到N阶导数在带域$S$上存在、连续且有限的函数$f$的集合。于是函数$f\in F_1(a,\ b)$满足定理1.1的前提。

在应用中，f多半在S连续可导，然而导数$\partial f_i/\partial y_j$常在$S$无界。这时初值问题（0.3），（0.4）虽然还有一个解，但它只定义于初始点x_0的一个邻域$U(x_0)$中，而不是在整个$[a,\ b]$区间内（例如看Henrici(1962））。

例1.1　**初值问题**

$$y^1=y^2,\ \ y(0)=1$$

有解$y(x)=1/(1-x)$，它只对$x<1$有意义。

对由（0.3），（0.4）给定的初值问题，定理1.1是基本的存在和唯一性定理。下面证明，初值问题的解还是连续地依赖于初值的，从而可以得到对解的偏差的一个估计式。

定理1.2　设在带域S（参看定理1.1）上的函数$f:S\to\mathbf{R}^n$对所有$(x,\ y)\in S$连续并满足Lipschitz条件（1.1），设$b\leqslant d\leqslant c$，则在对值问题

$$y'=f(x,\ y),\ \ y(a;\ s)=s$$

的解$y(x;\ s)$成立有估计

$$\|y(x;\ s_1)-y(x;\ s_2)\|\leqslant e^{L|x-a|}\|s_1-s_2\|。$$

证明：按$y(x;\ s)$的定义有

$$y(x; s)=s+\int_a^x f(t, y(t; s))\mathrm{d}t ,$$

于是有

$$y(x; s_1)-y(x; s_2)=s_1-s_2+\int_a^x [f(t, y(t; s_1))-f(t, y(t; s_2))]\mathrm{d}t$$

以及从而

$$\| y(x; s_1)-y(x; s_2)\| \leqslant \| s_1-s_2\| +L\left|\int_a^x \|y(t; s_1)-y(t; s_2)\|\mathrm{d}t\right| \tag{1·2}$$

对函数

$$\Phi(x)=\int_a^x \| y(t; s_1)-y(t; s_2)\| \mathrm{d}t,$$

有

$$\Phi'(x)=\| y(x; s_1)-y(x; s_2)\|$$

且因(1.2)式，对$x\geqslant a$有

$$\alpha(x)\leqslant \| s_1-s_2\| ,$$

其中$\alpha(x)=\Phi'(x)-L\Phi(x)$。初值问题

$$\Phi'(x)=\alpha(x)+L\Phi(x), \quad \Phi(a)=0 \tag{1·3}$$

对$x\geqslant a$有解

$$\Phi(x)=e^{L(x-a)}\int_a^x \alpha(t)e^{-L(t-a)}\mathrm{d}t , \tag{1·4}$$

因$\alpha(x)\leqslant \| s_1-s_2\|$而有估计

$$0\leqslant \Phi(x)\leqslant e^{L(x-a)}\| s_1-s_2\| \int_a^x e^{-L(t-a)}\mathrm{d}t$$

$$=\frac{1}{L}\| s_1-s_2\| [e^{L(x-a)}-1], \quad x\geqslant a .$$

最后对$x\geqslant a$得到所要求的结果

$$\| y(x; s_1)-y(x; s_1)\| =\Phi'(x)=\alpha(x)+L\Phi(x)$$
$$\leqslant \| s_1-s_2\| e^{L|x-a|}.$$

对于$x<a$的证明类同。

在附加前提下，初值问题的解甚至还连续可导地依赖于初值。

定理1.3 如果附加于定理1.2的前提还有函数矩阵

$$D_y f(x, y)=\left[\frac{\partial f_i}{\partial y_j}\right]$$

在S上存在、连续和有界

$$\| D_y f(x, y)\| \leqslant L, \quad (x, y)\in S,$$

则$y'=f(x, y)$，$y(a; s)=s$的解$y(x; s)$对所有$x\in[b, c]$和所有$y\in \mathbf{R}^n$连续可导，导数

$$Z(x; s)=D_s y(x; s)=\left[\frac{\partial y(x; s)}{\partial \sigma_1}, \cdots, \frac{\partial y(x; s)}{\partial \sigma_n}\right],$$

$$s=(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n)^T,$$

是初值问题

$$Z' = D_y f(x, y(x; s))Z, \quad Z(a; s) = I \tag{1·5}$$

的解，其中$Z' = D_x Z$。

注意Z'，Z和$D_y f(x, y(x; s))$都是$n \times n$矩阵，从而定理1.3描述了由n^2个微分方程构成的方程组的一个初值问题。把恒等式

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

对s求导可在形式上得到（1.5）。

在Coddington-Levinson（1955）中有定理1.3的一个证明。

对于某些目的，估计（1.5）的解对x的增长率是重要的。为此，较一般地设$T(x)$是一个$n \times n$矩阵，而$n \times n$矩阵$Y(x)$是线性初值问题

$$Y' = T(x)Y, \quad Y(a) = I \tag{1·6}$$

的解。

定理1.4 若$T(x)$在$[a, b]$连续，记$k(x) = \| T(x) \|$，则对（1.6）的解$Y(x)$有

$$\| Y(x) - I \| \leqslant \exp\left(\int_a^x k(t)\,dt\right) - 1, \quad x \geqslant a \text{。}$$

证明：按$Y(x)$的定义有

$$Y(x) = I + \int_a^x T(t)Y(t)\,dt,$$

记

$$\varphi(x) = \| Y(x) - I \|,$$

则因$\| Y(x) \| \leqslant \varphi(x) + \| I \| = \varphi(x) + 1$而对$x \geqslant a$成立有估计

$$\varphi(x) \leqslant \int_a^x k(t)(\varphi(t) + 1)\,dt\text{。} \tag{1·7}$$

用下式定义函数$c(x)$：

$$\int_a^x k(t)(\varphi(t) + 1)\,dt = c(x)\exp\left(\int_a^x k(t)\,dt\right) - 1$$

$$c(a) = 1 \text{。} \tag{1.8}$$

$c(x)$显然可导，对（1.8）求导可得

$$k(x)(\varphi(x) + 1) = c'(x)\exp\left(\int_a^x k(t)\,dt\right) + k(x)c(x)\exp\left(\int_a^x k(t)\,dt\right)$$

$$= c'(x)\exp\left(\int_a^x k(t)\,dt\right) + k(x)\left[1 + \int_a^x k(t)(\varphi(t) + 1)\,dt\right]\text{。}$$

由上式又因$k(x) \geqslant 0$和（1·7）而有

$$c'(x)\exp\left(\int_a^x k(t)\,dt\right) + k(x)\int_a^x k(t)(\varphi(t) + 1)\,dt$$

$$= k(x)\varphi(x) \leqslant k(x)\int_a^x k(t)(\varphi(t) + 1)\,dt$$

于是最终得到$c'(x) \leqslant 0$及从而

$$c(x) \leqslant c(a) = 1, \quad x \geqslant a, \tag{1·9}$$

由（1.7），（1.8）和（1.9）即得欲证。

第二章　初值问题

§2.1　单步法·基本概念

由第一章可以推想，对一阶常微分方程组的方法和结果在原则上与未知函数的数目 n 无关。因此，下面我们局限于讨论只包含一个未知函数的一个常微分方程（即$n=1$）。如果把量y、$f(x, y)$等看作向量，绝对值看作范数，则得到的结果通常也适用于方程组（即 $n>1$）。下面我们总假设所研究的初值问题是唯一可解的。

直观地可想到求解初值问题

$$y' = f(x, y),\ y(x_0) = y_0 \tag{2·1·1}$$

的以下方法：因$f(x, y(x))$恰好是(2·1·1)的待求精确解$y(x)$的斜率$y'(x)$，，故对$h \neq 0$近似地有

$$\frac{y(x+h)-y(x)}{h} \approx f(x, y(x))$$

或

$$y(x+h) \approx y(x) + hf(x, y(x))。 \tag{2·1·2}$$

选定一个步长$h \neq 0$，即可由给定的初值（x_0，y_0）出发，在一系列等距位置 $x_i = x_0 + ih$（$i = 1, 2, \cdots$）上得到精确解$y(x)$之值$y_i = y(x_i)$的近似值η_i。具体计算公式为

$$\begin{aligned}
&\eta_0 = y_0 \\
&\eta_{i+1} = \eta_i + hf(x_i, \eta_i) \qquad (2·1·3) \\
&x_{i+1} = x_i + h,\quad i = 0, 1, \cdots。
\end{aligned}$$

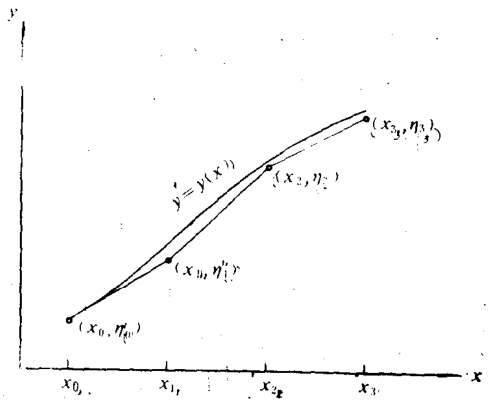

图2.1　Euler折线法

这就是Euler折线法，参看图2.1。

近似值η_i显然取决于步长h，为了强调这一点，明显地写成$\eta(x_i; h)$来代替η_i。于是“近似解”$\eta(x; h)$只对离散的变量值

$$x \in \mathbf{R}_h = \{ x_0 + ih \mid i = 0, 1, 2, \cdots \} \tag{2·1·4}$$

有定义，其中

$$h \in H_x = \left\{ \frac{x - x_0}{n} \,\middle|\, n = 1, 2, \cdots \right\}。 \tag{2·1·5}$$

由（2.1.3），近似解的这些离散值可以递推地计算：

$$\begin{aligned}
&\eta(x_0; h) = y_0 \\
&\eta(x+h; h) = \eta(x; h) + hf(x, \eta(x; h))。
\end{aligned}$$

称Euler法是一种单步法。顾名思义，单步法是从一个已知点（$x, y(x)$）求得下一点$(x+h, y(x+h))$的数值解的方法。一般地，单步法可以通过一个隐函数方程

$$\psi(x, y, \eta(x+h), h; f) = 0$$

给出。最常用的单步法是显式的，即由一个函数$\Phi(x, y(x), h; f)$给出为

$$\eta(x+h; h)=y(x)+h\Phi(x, y(x), h; f)。$$

隐式单步法也可以写成类似于显式单步法的以下形式

$$\eta(x+h; h)=y(x)+h\Phi(x, y(x), \eta(x+h; h), h; f),$$

其中的Φ与$\eta(x+h; h)$有关，从而需要迭代求解。显然，函数ψ和Φ和都与f，亦即与微分方程本身有关。

本章主要讨论显式单步法。

对于初值问题（2.1.1）的任何初值条件（x_0，y_0），可得到精确解$y(x)$在诸节点之值$y_i=y(x_i)$的近似值的递推计算格式为

$$\begin{aligned}&\eta_0=y_0\\&\eta_{i+1}=\eta_i+h\Phi(x_i, \eta_i, h; f)\\&x_{i+1}=x_i+h, \quad i=0, 1, 2, \cdots。\end{aligned} \tag{2·1·6}$$

例如对Euler法有$\Phi(x, y, h; f)=f(x, y)$，这里Φ与h无关。

为简单起见，以后对函数Φ略去变量f不写。如同前面Euler法一样。明显地把η写成$\eta(x_i; h)$以表明近似值与所用的步长有关。

设x和y是任意选定的，并设$z(t)$是初值问题

$$z'(t)=f(t, z(t)),\ z(x)=y \tag{2·1·7}$$

以（x，y）为初值的精确解。于是，函数

$$\Delta(x, y, h; f)=\begin{cases}\dfrac{z(x+h)-y}{h}, & h\neq 0,\\ f(x, y), & h=0\end{cases} \tag{2·1·8}$$

给出（2.1.7）的精确解$z(t)$对步长h的差分，而$\Phi(x, y, h)$是(2.1.6）给出的（2.1.7）的近似解对步长h的差分。如同对Φ一样，以后对Δ也不写出变量f。

差值

$$\tau(x, y, h)=\Delta(x, y, h)-\Phi(x, y, h)$$

的大小表征了微分方程的精确解满足单步法方程的好坏程度，它是近似方法的性能的度量。$\tau(x, y, h)$叫做所用方法在（x，y)处的局部离散化的误差。显然，对一种合用的单步法应该有

$$\lim_{h\to 0}\tau(x, y, h)=0。 \tag{2·1·9}$$

因为

$$\lim_{h\to 0}\Delta(x, y, h)=f(x, y),$$

（2.1.9）等价于

$$\lim_{h\to 0}\Phi(x, y, h)=f(x, y)。 \tag{2·1·10}$$

若（2.1.10）对所有$x\in[a, b]$，$y\in\mathbf{R}^n$和所有$f\in F_1(a, b)$成立，则称Φ以及相应的单步法是相容的。

例如对Euler法，$\Phi(x, y, h)=f(x, y)$，显然是相容的。

对于相容的单步法的性能还可以作较精确的度量。若f足够多次连续可偏导，则可以预

测$h\to 0$时$\tau(x, y, h)$趋于零的阶次。一般地，如果当h充分小时有

$$\tau(x, y, h)=O(h^p), \quad p>0 \text{ 的整数}, \tag{2·1·11}$$

对所有$(x, y)\in S$和所有$f\in F_p(a, b)$成立，则称之为一种p阶相容方法。为了确定某种单步法的阶次，可将$z(x+h)$展成Taylor级数，并根据定义式（2.1.8）得到

$$\Delta(x, y, h)=z'(x)+\frac{h}{2!}z''(x)+\cdots+\frac{h^{p-1}}{p!}z^{(p)}(x)+O(h^p)。\tag{2·1·12}$$

由$z(x)=y$, $z'(t)=f(t, z(t))$，每个$z^{(i)}(x)$均可用f和f的各阶偏导数在(x, y)处的值来表示，例如

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

$$\begin{aligned} z''(x)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}f(t, z(t))|_{t=x}\\ &=f_x(t, z(t))|_{t=x}+f_y(t, z(t))z'(t)|_{t=x}\\ &=f_x(x, y)+f_y(x, y)f(x, y)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} z'''(x)=&f_{xx}(x, y)+2f_{xy}(x, y)f(x, y)\\ &+f_{yy}(x, y)f^2(x, y)+f_y(x, y)z''(x)\end{aligned}$$

等等。如果将Φ关于h在$(x, y, 0)$处展开后，其低于p次幂的系数与Δ的对应系数相等，那么该方法便是p阶的。对于Euler法，$\Phi(x, y, h)=f(x, y)$，从而有

$$\begin{aligned}\tau(x, y, h)&=\Delta(x, y, h)-\Phi(x, y, h)\\ &=\frac{h}{2}[f_x(x, y)+f_y(x, y)f(x, y)]+\cdots=O(h),\end{aligned}$$

所以Euler法是一种一阶方法。

这个例子提示了如何简单地得到高于一阶的方法：取$\Phi(x, y, h)$为$\Delta(x, y, h)$的Taylor级数（2.1.12）的截断多项式。例如，通过

$$\Phi(x, y, h)=f(x, y)+\frac{h}{2}[f_x(x, y)+f_y(x, y)f(x,y)] \tag{2.1.13}$$

可得到一个二阶方法。可惜这样得到的较高阶方法并不实用，因为在由(x_i, η_i)得到(x_{i+1}, η_{i+1})的每一步，除f外尚需由计算偏导数f_x，f_y等等。

较简单的高阶方法例如可用形为

$$\Phi(x, y, h)=a_1f(x, y)+a_2f(x+p_1h, y+p_2hf(x, y)) \tag{2.1.14}$$

的公式得到，确定常数，a_1，a_2，p_1，p_2的条件是：$\Delta(x, y, h)-\Phi(x, y, h)$以尽可能高的$h$的乘幂开始。对（2.1.14）式所示的方法有以下形式的Taylor展开式

$$\begin{aligned}\Phi(x, y, h)=&(a_1+a_2)f(x, y)+a_2h[p_1f_x(x, y)\\ &+p_2f_y(x, y)f(x, y)]+O(h^2)。\end{aligned}$$

与（2.1.12）相比较得到二阶方法需满足的条件：

$$a_1+a_2=1, \quad a_2p_1=\frac{1}{2}, \quad a_2p_2=\frac{1}{2}$$

这些方程的一组解是

$$a_1=\frac{1}{2}, \quad a_2=\frac{1}{2}, \quad p_1=1, \quad p_2=1,$$

这对应于Heun方法（1900）：

$$\Phi(x, y, h)=\frac{1}{2}[f(x, y)+f(x+h, y+hf(x,y))]. \quad (2\cdot1\cdot15)$$

该方法的每步计算中需对f定值两次。另一组解是

$$a_1=0, \ a_2=1, \ p_1=\frac{1}{2}, \ p_2=\frac{1}{2},$$

这导致改进的Euler法（Collatz（1960））

$$\Phi(x, y, h)=f\left(x+\frac{h}{2}, y+\frac{h}{2}f(x, y)\right), \quad (2\cdot1\cdot16)$$

它也是二阶的，每步计算中也需对f定值两次。

由一个比（2.1.14）略微一般的Φ的代换式可得到Runge-Kutta法（1895），它的形式是

$$\Phi(x, y, h)=\frac{1}{6}(f_1+2f_2+2f_3+f_4), \quad (2\cdot1\cdot17)$$

其中

$$f_1=f(x, y)$$

$$f_2=f\left(x+\frac{h}{2}, y+\frac{1}{2}hf_1\right)$$

$$f_3=f\left(x+\frac{h}{2}, y+\frac{1}{2}hf_2\right)$$

$$f_4=f(x+h, y+hf_3)。$$

通过对h作Taylor展开可以算出

$$\Phi(x, y, h)-\Delta(x, y, h)=O(h^4),$$

从而Runge-Kutta法是一种四阶方法，每一步需对f定值四次。

若$f(x, y)$与y无关，则初值问题

$$y'=f(x), \ y(x_0)=y_0$$

的解可通过积分

$$y(x)=y_0+\int_{x_0}^{x}f(t)\,dt$$

直接得到。这时Heun方法相当于用梯形和近似代替$y(x)$，改进的Euler法相当于中点法则，而Runge-Kutta法相当于Simpson规则。

文献中也常把上面的经典Runge-Kutta方法的推广称为m级Runge-Kutta方法，即

$$\Phi(x, y, h)=\sum_{k=1}^{m}c_k f_k, \quad (2\cdot1\cdot18)$$

其中

$$f_1=f(x, y)$$

$$f_2=f(x+\alpha_2 h, y+\beta_{21}f_1)$$

$$\cdots$$

$$f_m=f(x+\alpha_m h, y+h(\beta_{m1}f_1+\cdots+\beta_{m,m-1}f_{m-1}))。$$

我们也常把其中要用到的系数以表格形式给出以节约书写空间：

$$\begin{array}{c|l}
0 & \\
\alpha_2 & \beta_{21} \\
\alpha_3 & \beta_{31}\beta_{32} \\
\vdots & \vdots \quad \ddots \\
\alpha_m & \beta_{m1}\cdots\beta_{m,m-1} \\
\hline
 & c_1 \ \cdots \ c_{m-1} \ c_m
\end{array}
\Longrightarrow
\begin{array}{l}
\beta_{m1}\cdots\beta_{m,m-1} \\
\hline
c_1\cdots c_{m-1}
\end{array}$$

这些系数自动满足以下条件

$$\sum_{j=1}^{k-1} \beta_{kj} = \alpha_k, \quad k=2, \ \cdots, \ m, \tag{2·1·19}$$

其原因在于：若令$y_{n+1}=x$，则方程组化成一个新的自治方程组，再对这个新方程组应用（2.1.18），于是为使新的y_{n+1}与原来的x在计算过程中有相同的增量，就必须成立条件（2.17.19）。

对于这种m级方法，Butcher（1965）证明了可能达到的最高相容阶次p如表2.1。

表2.1　　m级Runge-Kutta法可能达到的最高相容阶次p(m)

m	1	2	3	4	5	6	7	8	9	⩾9
p(m)	1	2	3	4	4	5	6	6	7	⩽m-2

关于m级Runge-Kutta法和其它单步法的细节可看Butcher（1964，1965），Fehlberg（1964，1966，1969）以及Shanks（1966）；在Grigorieff（1972）和Stetter（1973）中对单步法作了较新的详细叙述。

§2.2　单步法的收敛性

本节研究由单步法给出的近似解$\eta(x;\ h)$当$h\to 0$时的收敛性态。设$f\in F_1(a,\ b)$，并记$y(x)$为初值问题

$$y'=f(x,\ y),\quad y(x_0)=y_0$$

的精确解。对一些$x\neq x_0$，通过$\Phi(x,\ y,\ h)$给出一种单步法递推格式

$$\eta_0=y_0$$
$$\eta_{i+1}=\eta_i+h\Phi(x_i,\ \eta_i,\ h)$$
$$x_{i+1}=x_i+h,\quad i=0,\ 1,\ 2,\ \cdots。$$

由上述递推式给出在x处精确解$y(x)$的近似值$\eta(x,\ h)$为

$$\eta(x;\ h)=\eta_n,\quad x=x_n=x_0+nh。$$

我们感兴趣于总体离散化误差

$$e(x;\ h)=\eta(x;\ h)-y(x),$$

对固定的x，当$h\to 0$，$h\in H_x$（2.1.5）时的性态。因为$e(x;\ h)$如同$\eta(x;\ h)$那样只对$h\in \tilde{H}$有定义，我们要研究的只是$e(x;\ h_n)$当$n\to\infty$时的收敛性，其中$h_n\in H_x$。

如果

$$\lim_{n\to 0} e(x;\ h_n)=0 \tag{2.2.1}$$

对所有$x\in[a,\ b]$和所有$f\in F_1(a,\ b)$成立，则我们称Φ所对应的单步法是收敛的。

下面将证明，按照局部离散化误差的阶次定义的p阶方法（2.1.11）当 $p>0$时通常是收敛的。甚至还有

$$e(x;\ h_n)=O(h_n^p),$$

也就是说，总体离散化误差的阶次等于局部离散化误差的阶次。为了证明这个结论，首先证明一个引理。

引理2.1 若数列ξ_i满足形为

$$|\xi_{i+1}|\leqslant(1+\delta)\ |\xi_i|\ +B,\ \delta>0,\ B\geqslant 0\text{。}$$
$$i=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$$

的一个估计，则成立有

$$|\xi_n|\leqslant e^{n\delta}\ |\xi_0+|\ \frac{e^{n\delta}-1}{\delta}B$$

证明　由前提立即得到

$$|\xi_1|\leqslant(1+\delta)\ |\xi_0|\ +B,$$
$$|\xi_2|\leqslant(1+\delta)^2\ |\xi_0|\ +B(1+\delta)+B\ ,$$
$$\cdots$$
$$\begin{aligned}|\xi_n|&\leqslant(1+\delta)^n\ |\xi_0|\ +B[1+(+\delta)+(1+\delta)^2+\cdots+(1+\delta)^{n-1}]\\&=(1+\delta)^n\ |\xi_0|\ +B\frac{(1+\delta)^n-1}{\delta}\\&\leqslant e^{n\delta}\ |\xi_0|\ +B\frac{e^{n\delta}-1}{\delta},\end{aligned}$$

因为对$\delta>-1$有$0<1+\delta\leqslant e^{\delta}$，即得欲证。

利用这个引理可以证明以下主要定理。

定理2.2 设对$x_0\in[a,\ b]$，$y_0\in\mathbf{R}$给定了精确解为$y(x)$的初值问题（2.1.1），并设Φ在$G=\{(x,\ y,\ h)\ |a\leqslant x\leqslant b,\ \ |y-y(x)|\leqslant\gamma,\ \ |h|\leqslant h_0\ ,\ \gamma>0,\ h_0>0\}$上连续，又若存在正常数$M$和$N$，使得

$$|\Phi(x,\ y,\ h)-\Phi(x,\ y_2,\ h)|\leqslant M\ |y_1-y_2|\ , \tag{2.2.2}$$

对所有$(x,\ y_i,\ h)\in G$成立，其中$i=1,\ 2$，以及

$$\begin{aligned}|\tau(x,\ y(x),\ h)|&=|\Delta(x,\ y(x),\ h)-\Phi(x,\ y(x),\ h)|\\&\leqslant N\ |h^p|\ ,\ p>0,\end{aligned} \tag{2.2.3}$$

对所有$x\in[a,\ b]$，$|h|\leqslant h_0$成立，则存在$\bar{h}$，$0<\bar{h}\leqslant h_0$，，使得总体离散化误差$e(x;\ h)=\eta(x;\ h)-y(x)$对所有$x\in[a,\ b]$和所有$h_n\in H_x$，$|h_n|\leqslant\bar{h}$成立有

$$|e(x,\ h_n)|\leqslant|\ h_n\ |^pN\frac{e^{M\ |x-x_0|}-1}{M}\text{。}$$