《数值分析》之

常微分方程数值方法

徐岩

中国科学技术大学数学系

yxu@ustc.edu.cn

https://faculty.ustc.edu.cn/yxu

初值问题与边值问题

- 我们现在可以求解如下方程：

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ y(a) = \alpha, \quad y'(a) = \beta \end{cases}$$

- 因为取$y_1 = y$, $y_2 = y'$可以把它转换成一阶方程组的形式

$$\begin{cases} y_1' = y_2, & y_1(a) = \alpha \\ y_2' = f(x, y_1, y_2), & y_2(a) = \beta \end{cases}$$

从而可以应用前面的步进方法进行求解。

- 然而如果问题改为

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta \end{cases}$$

则前面方法失效。

边值问题的求解困难

- 步进方法不适合用于求解边值问题，因为没有完整的初值，数值求解无法开始。
- 前面是一个典型的两点边值问题。此类问题的求解难度要比初值问题大很多。
- 只有极个别的两点边值问题不需要用数值方法求解。如

$$\begin{cases} y'' = -y \\ y(0) = 3, \quad y(\pi/2) = 7 \end{cases}$$

  方程的通解为$y(x) = A\sin x + B\cos x$，从而可以应用两点边值确定A, B，以得到方程的解为$y(x) = 7\sin x + 3\cos x$.
- 如果其中的微分方程通解不知道的话，刚才的方法无效。我们的目标是给出可处理任何两点边值问题的数值方法。

存在性和唯一性

- 一般来说，只假设f是一个“好”的函数并不能保证解的存在性。如

$$\begin{cases} y'' = -y \\ y(0) = 3, \quad y(\pi) = 7 \end{cases}$$

其中同前得到通解后，应用边值条件确定组合系数时，得到矛盾的方程组$3 = B$和$7 = -B$，因此问题无解。

- 关于两点边值问题解的存在性定理是相当复杂的。下面是Keller给出的一个结果。

Theorem (边值问题解的存在性定理)

当$\partial f/\partial y$连续、非负且在不等式$0 \leqslant x \leqslant 1, -\infty < y < +\infty$定义的无限带内有界时，边值问题

$$\begin{cases} y'' = f(x, y) \\ y(0) = 0, \quad y(1) = 0 \end{cases}$$

有唯一解

证明下述边值问题有唯一解：

$$\begin{cases} y'' = (5y + \sin 3y)e^x \\ y(0) = y(1) = 0 \end{cases}$$

- 这里

$$\frac{\partial f}{\partial y} = (5 + 3\cos 3y)e^x$$

它在无限带$0 \leqslant x \leqslant 1$, $-\infty < y < +\infty$内是连续的，而且它以$8e$为上界。另外，由于$3\cos 3y \geqslant -3$, 所以它是非负的。因此上述定理所需要的条件满足。

变量代换

- 前节定理讨论的是一种特殊情形。但是通过简单的变量代换，就可以把更一般的问题化为这里的特殊情形。
- 假设原问题为

$$\begin{cases} y'' = f(x,y) \\ y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta \end{cases}$$

令$x = a + (b-a)s$, $z(s) = y(a+\lambda s)$, $\lambda = b - a$. 则有$z'(s) = \lambda y'(a+\lambda s)$, $z''(s) = \lambda^2 y''(a+\lambda s)$. 同样地，$z(0) = y(a) = \alpha$, $z(1) = y(b) = \beta$, 于是若y是上述边值问题的解，则z是下述边值问题的解：

$$\begin{cases} z'' = \lambda^2 f(a+\lambda s, z(s)) \\ z(0) = \alpha, \quad z(1) = \beta \end{cases}$$

反之亦然，即若y是后者的解，
则$y(x) = z((x-a)/(b-a))$是前者的解。

Theorem

考查下列两点边值问题：

$$1.\ \begin{cases} y'' = f(x,y) \\ y(a)=\alpha, \quad y(b)=\beta \end{cases}$$

$$2.\ \begin{cases} z'' = g(x,z) \\ z(0)=\alpha, \quad z(1)=\beta \end{cases}$$

其中$g(p,q)=(b-a)^2 f(a+(b-a)p,q)$. 若$z$是问题2的解，则函数$y(x)=z((x-a)/(b-a))$是问题1的解；反之，若$y$是问题1的解，则$z(x)=y(a+(b-a)x)$是问题2的解。

齐次化

- 为了简化两点边值问题

$$\begin{cases} y'' = g(x,y) \\ y(0) = \alpha, \quad y(1) = \beta \end{cases}$$

为一个具有齐次边值的问题，从y中减去一个在0和1取值为α和β的线性函数。

Theorem (两点边值问题的第二定理)

考查下列两点边值问题：

$$1. \begin{cases} y'' = g(x,y) \\ y(0) = \alpha, \quad y(1) = \beta \end{cases}$$

$$2. \begin{cases} z'' = h(x,z) \\ z(0) = 0, \quad z(1) = 0 \end{cases}$$

其中$h(p,q) = g(p, q+\alpha+(\beta-\alpha)p)$. 若$z$是问题2的解，则函数$y(x) = z(x)+\alpha+(\beta-\alpha)x$是问题1的解；反之，若$x$是问题1的解，则$z(x) = y(x)-(\alpha+(\beta-\alpha)x)$是问题2的解。

说明下列问题有唯一解:

$$\begin{cases} y'' = [5y - 10x + 35 + \sin(3y - 6x + 21)]e^x \\ y(0) = -7, \quad y(1) = -5 \end{cases}$$

- 边界值非齐次，不能直接应用Keller定理。首先齐次化，设

$$z(x) = y(x) - \ell(x), \quad \ell(x) = -7 + 2x$$

则

$$\begin{aligned} z'' = y'' &= [5y - 10x + 35 + \sin(3y - 6x + 21)]e^x \\ &= \{5(z+\ell) - 10x + 35 + \sin[3(z+\ell) - 6x + 21]\}e^x \\ &= \{5z + \sin 3z\}e^x \end{aligned}$$

新变量z的边界值为齐次的，根据前面的例题，此问题解存在唯一。

例

把下列问题转化为$[0,1]$区间上的齐次边界值问题：

$$\begin{cases} u'' = u^2 + 3 - x^2 + ux \\ u(3) = 7, \quad u(5) = 9 \end{cases}$$

- 由第一定理，此问题的等价问题为

$$\begin{cases} y'' = g(x,y) \\ y(0) = 7, \quad y(1) = 9 \end{cases}$$

其中$g(x,y) = 4f(3+2x,y)$
$= 4[y^2 + 3 - (3+2x)^2 + (3+2x)y]$。再由第二定理，另一个等价问题为

$$\begin{cases} z'' = h(x,z) \\ z(0) = 0, \quad z(1) = 0 \end{cases}$$

其中

$$\begin{aligned} h(x,z) &= g(x, z+7+2x) \\ &= 4[(z+7+2x)^2 + 3 - (3+2x)^2 + (z+7+2x)(3+2x)] \end{aligned}$$

Theorem (边值问题唯一解定理)

设f为(x,s)的连续函数，其中$0 \leqslant x \leqslant 1$, $-\infty < s < +\infty$. 假如在这个区域上

$$|f(x,s_1) - f(x,s_2)| \leqslant k|s_1 - s_2|, \quad k < 8$$

则两点边值问题

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

在$C[0,1]$中有唯一解。

- 证明：采用Green公式和Banach压缩映射定理。

例

证明下列问题有唯一解：

$$\begin{cases} y'' = 2e^{x\cos y} \\ y(0) = y(1) = 0 \end{cases}$$

- 这里$f(x,s) = 2e^{x\cos s}$，由中值定理，

$$|f(x,s_1) - f(x,s_2)| = \left|\frac{\partial f}{\partial s}(x,s_3)\right||s_1 - s_2|$$

其中所需要的导数满足

$$\left|\frac{\partial f}{\partial s}\right| = |2e^{x\cos s}(-x\sin s)| \leqslant 2e < 8$$

从而由定理，问题的解唯一。

- 同样考虑的是如下两点边值问题：

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta \end{cases}$$

- 把区间$[a, b]$离散化为$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n+1} = b$. 虽然不需要是均匀分布，但为了简化形式，后面假设

$$x_i = a + ih, \quad h = \frac{b-a}{n+1}, \quad i = 0, 1, \ldots, n+1$$

- 导数的近似计算公式为

$$y'(x) = \frac{1}{2h}(y(x+h) - y(x-h)) - \frac{1}{6}h^2 y'''(\xi)$$
$$y''(x) = \frac{1}{h^2}(y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)) - \frac{1}{12}h^2 y^{(4)}(\tau)$$

离散形式

- 用y_i表示$y(x_i)$的近似值。把边值问题中的导数用前面的数值公式代替，则有如下离散形式

$$\begin{cases} y_0 = \alpha \\ \dfrac{1}{h^2}(y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}) = f\left(x, y_i, (y_{i+1} - y_{i-1})/(2h)\right), \\ \qquad\qquad i = 1, 2, \ldots, n \\ y_{n+1} = \beta \end{cases}$$

- 未知数为$y_1, \ldots, y_n$，方程个数为n. 若f为y_i的非线性形式，那么这些方程是非线性的，求解将变得非常困难。

线性情况

- 现在假定f关于y和y'是线性的，即

$$f(x,y,y') = u(x) + v(x)y + w(x)y'$$

则上述方程组成为线性方程组，形式为

$$\begin{cases} y_0 = \alpha \\ \left(-1-\frac{1}{2}hw_i\right)y_{i-1} + (2+h^2v_i)y_i \\ \quad + \left(-1+\frac{1}{2}hw_i\right)y_{i+1} = -h^2u_i, \qquad i = 1,2,\dots,n \\ y_{n+1} = \beta \end{cases}$$

其中$u_i = u(x_i)$, $v_i = v(x_i)$, $w_i = w(x_i)$

- 引进缩写

$$a_i = -1 - \frac{1}{2} h w_{i+1}, d_i = 2 + h^2 v_i, c_i = -1 + \frac{1}{2} h w_i, b_i = -h^2 u_i$$

则方程组的矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} d_1 & c_1 & & & & \\ a_1 & d_2 & c_2 & & & \\ & a_2 & d_3 & c_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{n-2} & d_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & a_{n-1} & d_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 - a_0\alpha \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n - c_n\beta \end{pmatrix}$$

- 系数矩阵为三对角的，所以可用特殊的Gauss消去法求解。
- 特别地，当h足够小，而且$v_i > 0$时，矩阵是对角占优的，因为

$$|2 + h^2 v_i| > \left|1 + \frac{1}{2} h w_i\right| + \left|1 - \frac{1}{2} h w_i\right| = 2$$

- 在后面的收敛性分析中需要下面这个等式：

$$\begin{aligned} |d_i| - |c_i| - |a_{i-1}| &= 2 + h^2 v_i - \left(1 - \frac{1}{2} h w_i\right) - \left(1 + \frac{1}{2} h w_i\right) \\ &= h^2 v_i \end{aligned}$$

- 下面证明当$h \to 0$时，离散解收敛于边值问题的解。为了知道边值问题
$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta \end{cases}$$
是否有唯一解，引用下面Keller给出的一个定理。

Theorem

边值问题
$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ c_{11}y(a) + c_{12}y'(a) = c_{13} \\ c_{21}y(b) + c_{22}y'(b) = c_{23} \end{cases}$$
若满足下列条件，则在$[a, b]$上有唯一解

1. f及其一阶偏导数f_x, f_y, $f_{y'}$在域$D = [a, b] \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$上连续；
2. 在D上$f_y > 0$, $|f_y| \leqslant M$, $|f_{y'}| \leqslant M$；
3. $|c_{11}| + |c_{12}| > 0$, $|c_{21}| + |c_{22}| > 0$, $|c_{11}| + |c_{21}| > 0$, $c_{11}c_{12} \leqslant 0 \leqslant c_{21}c_{22}$

- 因此在线性问题中我们假设$u, v, w \in C[a, b]$, $v > 0$. 这样我们所考虑的两点边值问题有唯一解。
- 用$y(x)$表示问题的真解，y_i表示离散问题的解。这里y_i与h有关。我们将估计$|y(x_i) - y_i|$，并指出当$h \to 0$时它也趋向于零。
- $y(x)$满足下列方程组

$$\begin{aligned}&\frac{1}{h^2}(y(x_{i-1}) - 2y(x_i) + y(x_{i+1})) - \frac{1}{12}h^2 y^{(4)}(\tau_i)\\ &= u_i + v_i y(x_i) + w_i\left[\frac{1}{2h}(y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})) - \frac{1}{6}h^2 y'''(\xi_i)\right]\end{aligned}$$

- 另外一方面，离散解满足下述方程

$$\frac{1}{h^2}(y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}) = u_i + v_i y_i + \frac{1}{2h}w_i(y_{i+1} - y_{i-1}))$$

- 两式相减，并记$e_i = y(x_i) - y_i$，则有

$$\frac{1}{h^2}(e_{i-1} - 2e_i + e_{i+1}) = v_i e_i + \frac{1}{2h} w_i (e_{i+1} - e_{i-1}) + h^2 g_i$$

其中

$$g_i = \frac{1}{12} y^{(4)}(\tau_i) - \frac{1}{6} y'''(\xi_i)$$

- 合并同类项，并且两边同乘以$-h^2$后，得到

$$\left(-1 - \frac{1}{2} h w_i\right) e_{i-1} + (2 + h^2 v_i) e_i + \left(-1 + \frac{1}{2} h w_i\right) e_{i+1} = -h^4 g_i$$

即

$$a_{i-1} e_{i-1} + d_i e_i + c_i e_{i+1} = -h^4 g_i$$

- 设$\lambda = \|e\|_\infty$，并且指标i满足

$$|e_i| = \|e\|_\infty = \lambda$$

这里e为向量$e = (e_1, e_2, \ldots, e_n)$. 这样从上式我们有

$$|d_i||e_i| \leqslant h^4|g_i| + |c_i||e_{i+1}| + |a_{i-1}||e_{i-1}|$$

- 因此有

$$\begin{aligned} |d_i|\lambda &\leqslant h^4\|g\|_\infty + |c_i|\lambda + |a_{i-1}|\lambda \\ \lambda(|d_i| - |c_i| - |a_{i-1}|) &\leqslant h^4\|g\|_\infty \\ h^2 v_i \lambda &\leqslant h^4\|g\|_\infty \\ \|e\|_\infty &\leqslant h^2 \frac{\|g\|_\infty}{\inf v(x)} \end{aligned}$$

其中$\|g\|_\infty \leqslant \frac{1}{12}\|y^{(4)}\|_\infty + \frac{1}{6}\|y'''\|_\infty$。而$\|g\|_\infty / \inf v(x)$是一个与$h$无关的项，因此当$h \to 0$时$\|e\|_\infty$是$\mathcal{O}(h^2)$。

配置法：基本想法

- 配置法所提供的思路可以用来解决应用数学中的许多问题。
- 假设给定一个线性算子L (例如，积分算子或者微分算子)，并且希望求解方程
$$Lu = w$$
其中w已知，u未知。
- 配置法求解此类问题的思路为：
  1. 选取某个基向量组$\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$，然后待定向量
  $$u = c_1 v_1 + c_2 v_2 + \cdots + c_n v_n$$
  2. 为了尝试求解$Lu = w$，把u的待定形式代入，得到
  $$Lu = \sum_{j=1}^{n} c_j L v_j$$
  从而得到
  $$\sum_{j=1}^{n} c_j L v_j = w$$

- 一般来说，无法从

$$\sum_{j=1}^{n} c_j L v_j = w$$

中解出系数$c_1, c_2, \ldots, c_n$，但我们可以使之几乎成立。

- 在配置法中，向量u，w，v_j定义在相同的区域上。我们可以要求函数w与$\sum_{j=1}^{n} c_j L v_j$在n个给定点上的值相同，即

$$\sum_{j=1}^{n} c_j (L v_j)(x_i) = w(x_i), \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

- 这是一个由n个方程，n个未知数构成的线性方程组。因此可以计算出所需要的系数。当然我们应该选择函数v_j和点x_i使得上述线性方程组对应的矩阵非奇异。

例：Sturm-Liouville边值问题

- 问题的描述为

$$\begin{cases} u'' + pu' + qu = w \\ u(0) = 0, \quad u(1) = 0 \end{cases}$$

其中p, q, w已知，并且在$[0,1]$上连续。未知函数u也定义在区间$[0,1]$上，但期望它是二阶连续的。

- 定义

$$Lu \equiv u'' + pu' + qu$$

- 定义向量空间：

$$V = \{u \in C^2[0,1] : u(0) = u(1) = 0\}$$

我们的目标是在V中寻找$Lu = w$的一个解。

- 如果从V中取一组基函数$\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$, 则齐次边界条件自然满足。一种选择是

$$v_{jk}(x) = x^j(1-x)^k, \quad j,k \geqslant 1$$

容易验证这组基函数满足

$$\begin{aligned} v'_{jk} &= j v_{j-1,k} - k v_{j,k-1}, \\ v''_{jk} &= j(j-1) v_{j-2,k} - 2jk v_{j-1,k-1} + k(k-1) v_{j,k-2} \end{aligned}$$

- 因此很容易写出Lv_{jk}的表达式。从而可以采用配置法求解前面的问题。

- 下面考虑稍微更一般的问题：

$$\begin{cases} u'' + pu' + qu = w \\ u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta \end{cases}$$

这时可能更好的基函数选择是B样条。

- 为了使基函数具有二阶连续导数，考虑三次B样条，并且为了简化记号，取$x_{i+1} - x_i = h$. 并且用样条结点作为配置点。
- 设n是采用的基函数个数。为了确定n个系数，需要n个条件。其中包括两个端点条件：

$$\sum_{j=1}^{n} c_j v_j(a) = \alpha, \quad \sum_{j=1}^{n} c_j v_j(b) = \beta$$

- 而由于维数为n的三次样条空间，有$n-2$个结点，因此恰好取这些内结点作为配置结点，从而得到另外的$n-2$个条件:

$$\sum_{j=1}^{n} c_j(Lv_j)(x_i) = w(x_i), \quad i = 1, 2, \ldots, n-2$$

其中

$$h = \frac{b-a}{n-3}, \quad x_i = a + (i-1)h$$

这样我们有$a = x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-2} = b$. 另外，为了定义完全的B样条基函数，需要对这些结点进行扩充。

- 此时对应的系数矩阵是带状的，可以考虑如何充分利用这一稀疏性质以提高效率。