《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

http://staff.ustc.edu.cn/~yxu/

- 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。

中国科学技术大学

- 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。

- 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。

- 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。

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。

中国科学技术大学

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。

- 考查初值问题

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

对任意的z，我们都可以应用前面的数值方法进行求解，记解为y_z。
因此对给定的β，当我们能选择z使得$y_z(b) = \beta$时，那么得到的y_z就是下列两点边值问题的解：

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

- 即首先猜测$y'(a)$的一个值，得到近似解，测试是否有$y(b) = \beta$. 若$y(b) \neq \beta$, 则修改猜测值，继续进行求解和测试。这个过程称为打靶(shooting).

中国科学技术大学

- 因此打靶法可以认为是求解下列的非线性方程：

$$\phi(z) \equiv y_z(b) - \beta$$

  这里的$y_z(x)$函数没有显式定义，只是满足对任意给定z，可以计算出对应的函数值，即新的边值与期望边值的差。
- 因此我们可以采用“数值代数”中求解非线性方程的方法进行求解。
  1. 二分法
  2. 割线法
  3. Newton法
  4. ……

- 割线法复习：对于方程$\phi(z)=0$以及给定的两个初值$\phi(z_1)$和$\phi(z_2)$，那么根是下述迭代的极限：

$$z_n = z_{n-1} - \frac{z_{n-1}-z_{n-2}}{\phi(z_{n-1})-\phi(z_{n-2})}\phi(z_{n-1})$$

- 当已经得到的z值使得$\phi(z)$几乎为零时，则停止这个迭代过程，并利用插值多项式去估计较好的零点值。
  - 假设$\phi(z_1),\dots,\phi(z_n)$很小，这里我们的目标是构造一个多项式$p(x)$满足$p(\phi(z_i))=z_i$, $i=1,2,\dots,n$. 则下一个估计值是由$p(0)=z_{n+1}$确定。
  - 这相当于用多项式逼近ϕ的反函数。方法成功的前提是ϕ的根在一个邻域内有一个可微的反函数。

说明

- 打靶法是非常耗时的方法，因此下面考查如何可以更有效地应用打靶法得出所需要的数值解。
  - 显然应该充分发掘$y'(a)$的任何信息。因为高精度在打靶法的第一步基本上是被浪费的，因此可以考虑用大步长求解初值问题。只有当$\phi(z)$值几乎是零时才使用较小的步长。
- 有一类问题，对其应用割线法可以一步得到精确解。实际上，当ϕ为线性函数时就会发生这种情况。同样当微分方程是线性的时候也会出现这种情况。

- 在线性情况下，两点边值问题具有形式

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

其中$u(x)$, $v(x)$, $w(x)$在区间$[a, b]$上连续。

- 假设已经用两个不同的初始条件两次求解上式相应的初值问题，得到解y_1和y_2，即

$$\begin{cases} y_1(a) = \alpha & y_1'(a) = z_1 \\ y_2(a) = \alpha & y_2'(a) = z_2 \end{cases}$$

- 考虑y_1和y_2的一个线性组合：

$$y(x) = \lambda y_1(x) + (1-\lambda) y_2(x)$$

其中λ为一个参数。容易验证$y(x)$满足微分方程以及第一个初值条件，即$y(a) = \alpha$. 可以选择参数λ使得$y(b) = \beta$, 即为了满足

$$\beta = y(b) = \lambda y_1(b) + (1-\lambda) y_2(b)$$

可得

$$\lambda = \frac{\beta - y_2(b)}{y_1(b) - y_2(b)}$$

从而对应的$y(x)$即为给定两点边值问题的解。

- 在计算机中实际上述想法时，我们可以通过下述方法同时得到y_1和y_2
  1. 所考虑的初值问题分别为

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

     其中$f(x,y,y') = u(x) + v(x)y + w(x)y'$. 第一个的解为$y_1$，第二个的解为$y_2$
  2. 为产生x不显式出现的一阶方程组，令$y_0 = x$，$y_3 = y_1'$，$y_4 = y_2'$，因而带有初值的微分方程组为

$$\begin{cases} y_0' = 1 & y_0(a) = a \\ y_1' = y_3 & y_1(a) = \alpha \\ y_2' = y_4 & y_2(a) = \alpha \\ y_3' = f(y_0, y_1, y_3) & y_3(a) = 0 \\ y_4' = f(y_0, y_1, y_4) & y_4(a) = 1 \end{cases}$$

  3. 对$a = x_0 \leqslant x_i \leqslant x_m = b$，离散函数近似值$y_1(x_i)$和$y_2(x_i)$应当存放在内存中。$\lambda$的值应用前面的公式计算，然后再分别计算出$x_i$上相应的$y$值。

Theorem

若u, v, w是闭区间$[a, b]$上的连续函数，则对任何实数对α和α'，初值问题

$$\begin{cases} y'' = u(x) + v(x)y + w(x)y' \\ y(a) = \alpha, \quad y'(a) = \alpha' \end{cases}$$

在$[a, b]$上有唯一解。

Theorem

非齐次方程

$$y'' - vy - wy' = u$$

的每个解可以表示成$y_0 + c_1 y_1 + c_2 y_2$的形式，其中y_0为上述方程的特解，而y_1和y_2构成齐次方程

$$y'' - vy - wy' = 0$$

的线性无关的解集。

Theorem

若线性两点边值问题

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

有解，而且若y_1不是解，那么则有$y_1(b) - y_2(b) \neq 0$，而且y是所需要的解。(这里的y_1，y_2定义就是相应的初值问题的解，在a点导数值分别为0和1)

证明：设y_0，y_1，y_2分别是下列初值问题的解：

$$\begin{array}{lll} y_0'' = u + vy_0 + wy_0' & y_0(a) = \alpha & y_0'(a) = 0 \\ y_1'' = vy_1 + wy_1' & y_1(a) = 1 & y_1'(a) = 0 \\ y_2'' = vy_2 + wy_2' & y_2(a) = 0 & y_2'(a) = 1 \end{array}$$

由二阶线性微分方程理论，定理中给定的微分方程通解为

$$y_0 + c_1 y_1 + c_2 y_2$$

其中c_1，c_2为任意常数。

前面讨论的y_1和y_2是通解的特殊情况。它们由下式给出：

$$y_1 = y_0 + z_1 y_2, \quad y_2 = y_0 + z_2 y_2$$

我们已经假定定理中的两点边值问题有解，那么存在c_1, c_2使得

$$\alpha = y_0(a) + c_1 y_1(a) + c_2 y_2(a)$$
$$\beta = y_0(b) + c_1 y_1(b) + c_2 y_2(b)$$

其中第一个式即为$c_1 = 0$. 于是c_2应当满足的式子为

$$\beta = y_0(b) + c_2 y_2(b)$$

若$y_1(b) - y_2(b) \neq 0$, 则前面定义的y就是所需要的解。
若$y_1(b) - y_2(b) = 0$, 此即$y_2(b) = 0$, 从而$y_0(b) = \beta$, 所以y_1是所需的解。 $\square$

- 现在讨论如何应用Newton方法求解两点边问题。
- 设y_z为下列问题的解

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

我们要选择z使得$\phi(z) \equiv y_z(b) - \beta = 0$.

- 关于ϕ的Newton公式是

$$z_{n+1} = z_n - \frac{\phi(z_n)}{\phi'(z_n)}$$

- 为了确定ϕ'，对两点边值问题关于z求偏导，得到

$$\begin{cases} \dfrac{\partial y_z''}{\partial z} = \dfrac{\partial f}{\partial y_z}\dfrac{\partial y_z}{\partial z} + \dfrac{\partial f}{\partial y_z'}\dfrac{\partial y_z'}{\partial z} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} y_z(a) = 0, \quad \dfrac{\partial}{\partial z} y_z'(a) = 1 \end{cases}$$

- 令$v = \partial y_z / \partial z$, 上式简化为

$$\begin{cases} v'' = f_{y_z}(x, y_z, y_z')v + f_{y_z'}(x, y_z, y_z')v' \\ v(a) = 0, \quad v'(a) = 1 \end{cases}$$

这是一个初值问题，称为第一变分方程。它可以与关于y_z的初值问题一起求解。然后利用$v(b)$得到$\phi'(z)$:

$$v(b) = \frac{\partial y_z(b)}{\partial z} = \phi'(z)$$

从而可以应用Newton方法求解问题。

- 多重打靶法(multiple shooting)是打靶法的一个重要发展。其基本策略是把给定的区间$[a, b]$分成子区间，并试图在每个小段上求解整体问题。
- 下面以区间$[a, b]$被分成$[a, c]$和$[c, b]$的情况说明多重打靶法。此时考虑的问题仍然为

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

- 在每个子区间上，求解下列两个初值问题，得到解为y_1和y_2.

$$\begin{cases} y_1'' = f(x, y_1, y_1') & y_1(a) = \alpha & y_1'(a) = z_1, & a \leqslant x \leqslant c \\ y_2'' = f(x, y_2, y_2') & y_2(b) = \beta & y_2'(b) = z_2, & c \leqslant x \leqslant b \end{cases}$$

这里z_1和z_2是所配置的参数。y_2的数值解按x递减方向进行。

- 下面的目标是调整参数z_1和z_2直到分段函数

$$y(x) = \begin{cases} y_1(x) & a \leqslant x \leqslant c \\ y_2(x) & c \leqslant x \leqslant b \end{cases}$$

变成问题的解。因此需要y和y'在c点上满足：

$$y_1(c) - y_2(c) = 0, \quad y_1'(c) - y_2'(c) = 0$$

- 通常选择z_1和z_2可以实现这一目标。可以采用二维Newton方法处理这一问题。
- 对k个子区间的多重打靶法将涉及到k个子函数。每个子函数通过求解一个初值问题得到。这k个子函数的初值构成一个有$2k$个参数的集合。在区间的$k-1$个内分点上的连续性得到$2k-2$个条件，再加上端点条件，正好参数个数与条件个数匹配。同样采用非线性方程组迭代求解。