《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/

单步法与多步法

- 前面几节中给出的求解初值问题的Taylor级数方法和Runge-Kutta方法具有一个共同特点，那就是解从x前进到$x+h$时，新计算出来的函数值只与x时刻的函数值有关，因此称为**单步法**。

  即若x_0, x_1, $\ldots$, x_i是沿x轴的点，那么y_{i+1}(即$y(x_{i+1})$的近似值)仅与y_i有关，而与y_{i-1}, y_{i-2}, $\ldots$, y_0的信息无关

- 如果在每一步利用解的某些先前的值，则可以设计出更有效的方法，这些方法称为**多步法**。

- 我们的目标是数值求解下列初值问题：

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

- 若真解为$y(x)$, 那么对上述方程的积分可以得到

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

- 前提条件：在某时刻，已经得到了x轴上点x_0, x_1, . . ., x_n (可以是不等距的)处的函数值。

基于数值积分的构造法

- 在x_{n+1}处函数值的公式为

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

右边的积分可以用数值积分格式逼近，结果是一个逐步生成近似解的公式

- 注意：这里的数值积分格式与前一章中的有些不同
  1. 前一章的格式：为了计算$[a, b]$上的积分，积分节点一般取在$[a, b]$内
  2. 这里为了计算$[x_n, x_{n+1}]$上面的积分，积分节点是前面的点x_n, $x_{n-1}, \cdots, x_{n-q}$，在$[x_n, x_{n+1}]$外

基于数值积分的构造法

- 若积分 $\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} y'(x)dx$ 用节点 $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-q}$ 作为积分点，则得到显格式，$q+1$ 阶 $r+1$ 步格式。$r=\max(p,q)$

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx \approx h(a_0 y'(x_n) + a_1 y'(x_{n-1}) + \cdots + a_q y'(x_{n-q})$$

利用 $y'(x_n) = f(x_n, y(x_n))$，有

$$y(x_{n+1}) = y(x_{n-p}) + h\sum_{j=0}^{q} a_j f(x_{n-j}, y(x_{n-j}))$$

- 积分系数

$$ha_j = \int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} l_j(x)dx$$

- 局部截断误差

$$\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} \frac{y^{(q+2)}(\xi)}{(q+1)!}\omega_q(x)dx$$

基于数值积分的构造法

- 若积分$\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} y'(x)dx$用节点$x_{n+1}, x_n, \cdots, x_{n+1-q}$作为积分点，则得到隐格式，$q+1$阶$r+1$步格式。$r=\max(p,q)$

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx \approx h(a_0 y'(x_{n+1}) + a_1 y'(x_n) + \cdots + a_q y'(x_{n-q+1})$$

利用$y'(x_n)=f(x_n, y(x_n))$，有

$$y(x_{n+1}) = y(x_{n-p}) + h\sum_{j=0}^{q} a_j f(x_{n+1-j}, y(x_{n+1-j}))$$

- 积分系数

$$ha_j = \int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} l_j(x)dx$$

- 局部截断误差

$$\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} \frac{y^{(q+2)}(\xi)}{(q+1)!}\omega_q(x)dx$$

线性多步法

线性多步法的一般形式为

$$a_k y_n + a_{k-1} y_{n-1} + \cdots + a_0 y_{n-k} = h(b_k f_n + b_{k-1} f_{n-1} + \cdots + b_0 f_{n-k})$$

- 这称为k步方法
- 系数a_i, b_i已知
- y_i表示解在x_i上的近似，$x_i = x_0 + ih$, f_i表示$f(x_i, y_i)$
- 假定$y_0, y_1, \ldots, y_{n-1}$的值已知，采用上式计算$y_n$. 因此可以假定$a_k \neq 0$
- 若$b_k = 0$, 方法称为**显式**的(explicit)，此时y_n可直接由上式简单计算出来
- 若$b_k \neq 0$, 则右端项f_n中包含未知数y_n, 因此称为**隐式**(implicit) 方法

建立$p=1,q=2$的显格式

- $p=1$,积分区间为$\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} y'(x)dx$
- q=2，显格式，积分节点为x_n，x_{n-1}，x_{n-2}

$$ha_0=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} \frac{(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})}{(x_n-x_{n-1})(x_n-x_{n-2})}dx=\frac{7}{3}h$$

$$ha_1=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} \frac{(x-x_n)(x-x_{n-2})}{(x_{n-1}-x_n)(x_{n-1}-x_{n-2})}dx=-\frac{2}{3}h$$

$$ha_2=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} \frac{(x-x_n)(x-x_{n-1})}{(x_{n-2}-x_{n-1})(x_{n-2}-x_{n-1})}dx=\frac{1}{3}h$$

- 局部截断误差为

$$T_{n+1}=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} \frac{y^{(4)}(\xi)}{3!}(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})dx=\frac{1}{3}h^4y^{(4)}(\eta)$$

建立$p=2,q=2$的隐格式

- $p=2$,积分区间为$\int_{x_{n-2}}^{x_{n+1}} y'(x)dx$
- q=2，隐格式，积分节点为x_{n+1}，x_n，x_{n-1}

$$ha_0=\int_{x_{n-2}}^{x_{n+1}} \frac{(x-x_n)(x-x_{n-1})}{(x_{n+1}-x_n)(x_{n+1}-x_{n-1})}dx=\frac{3}{4}h$$

$$ha_1=\int_{x_{n-2}}^{x_{n+1}} \frac{(x-x_{n+1})(x-x_{n-1})}{(x_n-x_{n+1})(x_n-x_{n-1})}dx=0$$

$$ha_2=\int_{x_{n-2}}^{x_{n+1}} \frac{(x-x_{n+1})(x-x_n)}{(x_{n-1}-x_{n+1})(x_{n-1}-x_n)}dx=\frac{9}{4}h$$

- 局部截断误差为

$$T_{n+1}=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} \frac{y^{(4)}(\xi)}{3!}(x-x_n)(x-x_{n+1})(x-x_{n-1})dx=-\frac{3}{8}h^4y^{(4)}(\eta)$$

- 公式类型为

$$y_{n+1} = y_n + af_n + bf_{n-1} + cf_{n-2} + \cdots$$

其中$f_i = f(x_i, y_i)$. 这类公式称为Adams-Bashforth公式

- 基于等距节点$x_i = y_0 + ih$, $i = 1, 2, \ldots, n$的五阶Adams-Bashforth公式为

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}\big(1901f_n - 2774f_{n-1} + 2616f_{n-2} - 1274f_{n-3} + 251f_{n-4}\big)$$

- 系数来自于下述数值积分

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx \approx h(Af_n + Bf_{n-1} + Cf_{n-2} + Df_{n-3} + Ef_{n-4})$$

为了确定系数A, B, C, D, E，要求当被积函数在Π_4中公式精确成立

- 不失一般性，假设$x_n = 0,\ h = 1$
- 通过取Π_4中的五个Newton基作为测试函数，可以求解出所需要的系数。注意这并不是Newton-Cotes公式，因为积分节点在积分区间外

- 五个Newton基函数为

$$
\begin{aligned}
p_0(x) &= 1 \\
p_1(x) &= x \\
p_2(x) &= x(x+1) \\
p_3(x) &= x(x+1)(x+2) \\
p_4(x) &= x(x+1)(x+2)(x+3)
\end{aligned}
$$

代入下式

$$\int_0^1 p_n(x)dx = Ap_n(0)+Bp_n(-1)+Cp_n(-2)+Dp_n(-3)+Ep_n(-4)$$

得到确定系数A, B, C, D, E的五个方程。

- 这个方程组为

$$
\begin{cases}
A+B+C+D+E=1 \\
-B-2C-3D-4E=1/2 \\
2C+6D+12E=5/6 \\
-6D-24E=9/4 \\
24E=251/30
\end{cases}
$$

从而得到前面列出的解。

- 上述过程称为**待定系数法**。原则上，它可以用来确定高阶和各种各样其他情况的类似公式。
- 另外，由于$y'=f$，因此令$y=p_n$并且应用$f=p_n'$可以得到类似的方程组以确定公式中的系数。
- 在数值实践中，很少直接使用Adams-Bashforth公式，而是把它与其它公式联合起来，因为其中的积分是采用外推方法计算的。

Adams-Moulton公式

- 应用待定系数法可以构造如下所示的公式，其中包含f_{n+1}项：

$$y_{n+1} = y_n + af_{n+1} + bf_n + cf_{n-1} + \cdots$$

- 例如，五阶的Adams-Moulton公式如下：

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}(251f_{n+1} + 646f_n - 264f_{n-1} + 106f_{n-2} - 19f_{n-3})$$

- 这类公式不能直接用于步进求解，因为y_{n+1}同时出现在公式的两边。
    - f_i表示$f(x_i, y_i)$，因此包含f_{n+1}的项仅在y_{n+1}知道后才能计算。
    - 有两种方法解决这个问题：预估–校正、迭代泛函

中国科学技术大学

- 我们可以用Adams-Bashforth公式预估y_{n+1}的**试验**值y_{n+1}^*，然后使用Adams-Moulton公式计算y_{n+1}的**校正**值，即组合计算公式为

$$
\begin{aligned}
y_{n+1}^* = y_n + \frac{h}{720}\big(&1901 f_n - 2774 f_{n-1} + 2616 f_{n-2} \\
&- 1274 f_{n-3} + 251 f_{n-4}\big) \\
y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}\big(&251 f(x_{n+1}, y_{n+1}^*) + 646 f_n - 264 f_{n-1} \\
&+ 106 f_{n-2} - 19 f_{n-3}\big)
\end{aligned}
$$

- 在应用上述的预估–校正过程中，第一步只是知道y_0，还没有足够的信息进行上述预估–校正过程，所以需要采用特殊的过程进行方法启动。
  - 在知道y_1，y_2，y_3，y_4的值后才能启动公式。
- 采用Runge-Kutta方法得到上述值是一种不错的选择。
  - 通常同阶的公式一起使用，即这里采用五阶的Runge-Kutta方法与Adams-Bashforth，Adams-Moulton公式一起使用。

- Adams-Moulton公式说明y_{n+1}是某个映射的不动点，这里的映射定义为
$$\phi(z) = \frac{251}{720} hf(x_{n+1}, z) + C$$
- 所以泛函迭代法可以作为计算y_{n+1}的一种方法。
  - 根据泛函迭代理论，在适当的假设下，由$z_{k+1} = \phi(z_k)$确定的序列收敛于ϕ的不动点
  - 若ξ是ϕ的不动点，即所求的y_{n+1}值，那么迭代应当从中心在ξ的区间中一点z_0出发，在这个区间中每点满足$|\phi'(z)| < 1$. 这里需要假定ϕ'是连续的。此时
$$\phi'(z) = \frac{251}{720} h \frac{\partial f(x_{n+1}, z)}{\partial z}$$
通过变小步长h, 可以使得上式变得足够小。
  - 实际中，通常只需要一到两步迭代就可以找到y_{n+1}的足够精度的近似值。

线性多步法的分析

- 本节余下部分讨论一般的线性多步法理论。
- 线性多步法的一般形式为

$$a_k y_n + a_{k-1} y_{n-1} + \cdots + a_0 y_{n-k} = h(b_k f_n + b_{k-1} f_{n-1} + \cdots + b_0 f_{n-k})$$

  - 这称为k步方法
  - 系数a_i, b_i已知
  - y_i表示解在x_i上的近似，$x_i = x_0 + ih$, f_i表示$f(x_i, y_i)$
  - 假定y_0, y_1, …, y_{n-1}的值已知，采用上式计算y_n. 因此可以假定$a_k \neq 0$
  - 若$b_k = 0$, 方法称为**显式**的(explicit)，此时y_n可直接由上式简单计算出来
  - 若$b_k \neq 0$, 则右端项f_n中包含未知数y_n, 因此称为**隐式**(implicit) 方法

- 微分方程数值解的精度在很大程度上是由使用的算法的阶确定的
- 阶表明方法所模拟的Taylor级数解中有多少项被考虑。
  - 例如，在Adams-Bashforth公式中，它之所以被称为五阶的，是因为它近似地产生与带有$h, \ldots, h^5$的Taylor级数方法相同的精度
  - 从而在利用Adams-Bashforth公式求解的每一步中误差都可以期望是$\mathcal{O}(h^6)$
- 下面的论述将把阶的概念变得更精确

线性泛函

- 定义线性泛函如下：

$$Ly = \sum_{i=0}^{k} \Big(a_i y(ih) - hb_i y'(ih) \Big)$$

这里为了简化记号，设$k = n$, 并且第一个值是在$x = 0$，而不是$x = n - k$

- 上述泛函可作用到任何可微的函数y上。在下面的分析中，假定y是由$x = 0$的Taylor级数表示。利用y的Taylor级数，可以把L表示为下列形式：

$$Ly = d_0 y(0) + d_1 hy'(0) + d_2 h^2 y''(0) + \cdots$$

- 为了计算系数d_i, 写出y和y'的Taylor级数：

$$y(ih) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(ih)^j}{j!} y^{(j)}(0) \qquad y'(ih) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(ih)^j}{j!} y^{(j+1)}(0)$$

- 然后代入到泛函L的定义式中，按h的幂次重新整理，得到d_i的值如下：

$$
\begin{aligned}
d_0 &= \sum_{i=0}^{k} a_i \\
d_1 &= \sum_{i=0}^{k} (i a_i - b_i) \\
d_2 &= \sum_{i=0}^{k} \left(\frac{1}{2} i^2 a_i - i b_i\right) \\
&\vdots \\
d_j &= \sum_{i=0}^{k} \left(\frac{i^j}{j!} a_i - \frac{i^{j-1}}{(j-1)!} b_i\right), \quad j \geqslant 1
\end{aligned}
$$

Theorem

线性多步法的下列三个性质等价：

1. $d_0 = d_1 = \cdots = d_m = 0$
2. 对每个次数不超过m的多项式p有$Lp = 0$
3. 对一切$y \in C^{m+1}$, Ly是$\mathcal{O}(h^{m+1})$

证明：若性质1成立，则泛函为

$$Ly = d_{m+1} h^{m+1} y^{(m+1)}(0) + \cdots$$

而对于次数不超过m的多项式p, $p^{(j)}(0) = 0, j > m$。所以$Lp = 0$,
即性质2成立。

假设性质2成立。若$y \in C^{m+1}$，则由Taylor定理，记$y = p + r$，其中p是一个次数不超过m的多项式，函数r在0点的前m阶导数为零，从而

$$Ly = Lr = d_{m+1} h^{m+1} r^{(m+1)}(\xi) = \mathcal{O}(h^{m+1})$$

所以性质3成立。
最后，若性质3成立，则必定有$d_0 = d_1 = \cdots = d_m = 0$，即性质1成立。 □

- 因此阶的严格定义是唯一使得

$$d_0 = d_1 = \cdots = d_m = 0 \neq d_{m+1}$$

成立的自然数m.

例

分析由下式确定的Milne方法的阶是多少?

$$y_n - y_{n-2} = \frac{1}{3}h(f_n + 4f_{n-1} + f_{n-2})$$

- $a_0 = -1,\ a_1 = 0,\ a_2 = 1,\ b_0 = 1/3,\ b_1 = 4/3,\ b_2 = 1/3$
- 因此有

$$\begin{aligned} d_0 &= a_0 + a_1 + a_2 = 0 \\ d_1 &= -b_0 + (a_1 - b_1) + (2a_2 - b_2) = 0 \\ d_2 &= (a_1/2 - b_1) + (2a_2 - 2b_2) = 0 \end{aligned}$$

- $$d_3 = \left(\frac{1}{6}a_1 - \frac{1}{2}b_1\right) + \left(\frac{4}{3}a_2 - 2b_2\right) = 0$$
  $$d_4 = \left(\frac{1}{24}a_1 - \frac{1}{6}b_1\right) + \left(\frac{2}{3}a_2 - \frac{4}{3}b_2\right) = 0$$
  $$d_5 = \left(\frac{1}{120}a_1 - \frac{1}{24}b_1\right) + \left(\frac{4}{15}a_2 - \frac{2}{3}b_2\right) = -\frac{1}{90}$$

  所以方法是四阶的。

说明

- 如果其它特性不相上下的话，我们可能更喜欢高阶方法。
- 为了产生一个$2k$阶的k步方法，那么考虑下述$2k+1$个方程：

$$d_0 = d_1 = \cdots = d_{2k} = 0$$

  这是一个有$2k+2$个未知数的$2k+1$个齐次线性方程构造的方程组，因此必定有非平凡解
- 1956年Dahlquist证明了对于$a_k \neq 0$存在一个解
- 但是多步法的首要特征是稳定性。Dahlquist证明了一个稳定k步法不能有大于$k+2$的阶

初值问题

$$x' = \frac{t - e^{-t}}{x + e^{x}}$$
$$x(0) = 0$$

该方程的真解由等式

$$x^2 - t^2 + 2e^{x} - 2e^{-t} = 0$$

隐式给出。

- 当$t = 1$时，数值求解等式$x^2 - t^2 + 2e^{x} - 2e^{-t} = 0$，将这一数值解作为参考的准确解。

- 利用Adams-Bashforth公式计算方程在$t=1$的数值解，利用Runge − Kunta格式得到初值，取节点$x_i, i=0,\cdots,N$, N为$2^k, k=3,\cdots,8$,给出如下的误差表格,其中阶为

$$\frac{\ln(Error_{old}/Error_{now})}{\ln(N_{now}/N_{old})}$$

N	误差	阶
8		
16		
32		
64		

中国科学技术大学