

常微分方程的几种数值解法及其性能比较

前言

实际物理学研究中，可以解析求解的系统只占实际问题中的很小一部分，而绝大部分问题都没有严格的解析结果。为了能够研究这些问题，数值计算成为了一个重要的研究方向，尤其是进入信息时代以来计算机的发明大大提高了人类的数值运算能力，使很多问题的数值求解成为了可能，为我们提供了一个很好的认识世界的手段。

本文将主要介绍三种常微分方程的求解方法：Euler 法，Runge-Kutta 法和中值法的主要原理，并对这三种方法的运算性能做一定的讨论。

一、Euler 法

对于一个初值问题

$$\dot{y} = f(t, y), y(t_0) = y_0 \quad (1)$$

我们取计算的最小时间单元为 h ，为一足够小的时间量。那么我们可以把 y 对时间的导数 \dot{y} 重写为如下的近似形式：

$$\dot{y} \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h} \quad (2)$$

(2)式可以整理得到

$$y(t+h) \approx y(t) + h\dot{y}$$

再代入(1)式，有：

$$y(t+h) \approx y(t) + hf(t, y(t)) \quad (3)$$

于是对于一个问题，我们构造数列形如

$$\{t_n\} = t_0 + n \times h$$

并令 y_n 表示相应时刻 t_n 时方程的解 $y(t_n)$ 的近似。由此可以得到递推公式

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) \quad (4)$$

这就是用 Euler 法数值求解常微分方程的公式。已知 y_0 和 t_0 ，我们容易得到接下来的一系列 y 值的近似。

接下来我们分析 Euler 法的性能。可以看到对于一个 n 步的模拟，Euler 法的时间复杂度

和空间复杂度都是 $O(n)$ 。而且显然 h 越小时(2)式的近似就越精确，相应的 y_n 误差越小。我们

还可以对 $y(t)$ 在 $t=0$ 附近做泰勒展开得到

$$y(h) = y(0) + \frac{dy}{dt}h + \frac{1}{2} \frac{d^2y}{dt^2}h^2 + \dots$$

可以看到 Euler 法实际上截取了泰勒展开的前两项。所以 Euler 法的误差可以预计在 $O(h^2)$ 。

二、Runge-Kutta 法

对于（一）中的初值问题，我们也可以用以下的一种方法来做近似计算：

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + k_2 + k_3 + k_4)$$

$$t_{n+1} = t_n + h$$

$$k_1 = f(t_n, y_n)$$

$$k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3)$$

此种方法称作 4 阶 Runge-Kutta 法，具有同样 $O(n)$ 的时间和空间复杂度，但相比 Euler 法在时间复杂度上多出了一个常数因子，因此计算代价会略高于 Euler 法。并且注意到这是一种四阶方法，计算的误差在 $O(h^5)$ 量级。

可以观察到 4 阶 RK 方法中的第一项 k_1 即为 Euler 法中我们推得的增量。

三、中值法

本文介绍的最后一种常微分方程解法为中值法，它是 Euler 法的一种改良。

对 Euler 法中的(2)式，我们取一种更加精确的近似：

$$y'\left(t + \frac{h}{2}\right) \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h}$$

于是可以整理得到：

$$y(t+h) \approx y(t) + hf\left(t + \frac{h}{2}, y\left(t + \frac{h}{2}\right)\right)$$

由于我们不能求得 $y\left(t + \frac{h}{2}\right)$ 的准确值，于是我们要采用泰勒展开求其近似值：

$$y\left(t + \frac{h}{2}\right) \approx y(t) + \frac{h}{2}y'(t) = y(t) + \frac{h}{2}f(t, y(t))$$

把该近似值代入上式中便可以得到：

$$y(t+h) \approx y(t) + hf\left(t + \frac{h}{2}, y(t) + \frac{h}{2}f(t, y(t))\right)$$

于是可以推知中值法求解的递推公式：

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + hf\left(t + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}f(t_n, y_n)\right) \\ t_{n+1} &= t_n + h \end{aligned}$$

显然，中值法的时间复杂度 $O(n)$ ，常数因子大小介于 Euler 法和 RK4 法之间。本方法有计算误差 $O(h^3)$ 。

四、三种算法的性能研究

接下来我们在一个具体问题中考察这几种算法的性能。

4.1 问题描述

考虑一种放射性元素，在时刻 t 共存在 Nu 个原子。该元素有如下的衰变规律：

$$\frac{dNu}{dt} = -\frac{Nu}{\tau}$$

式中 τ 是衰变的时间常数，它表征了放射性元素的稳定性。已知初值 Nu_0 、时间常数 τ 、计算步长 h ，求时刻 t 的原子数。

4.2 算法误差的比较

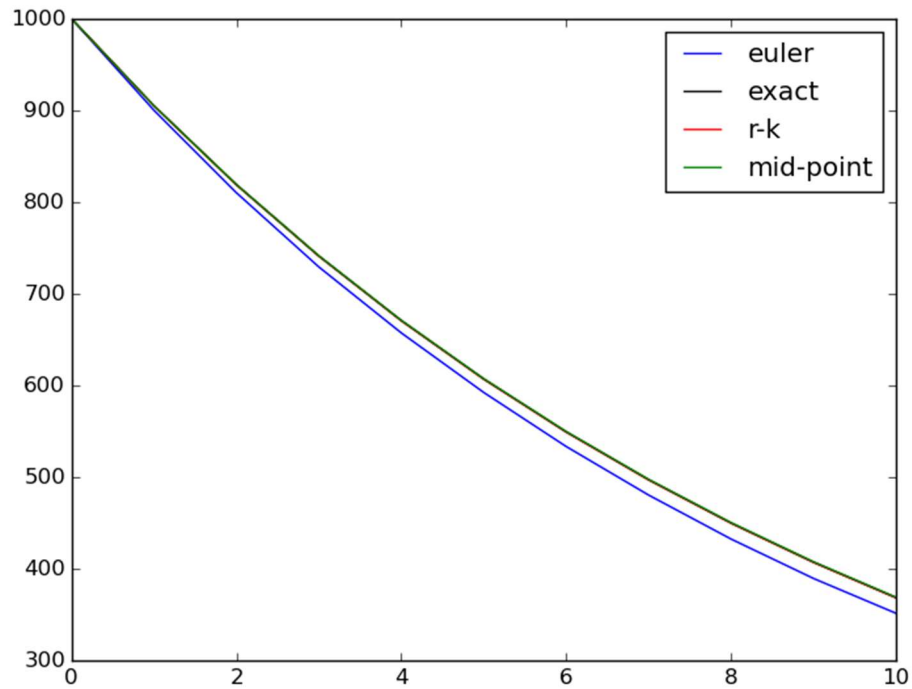
本问题有解析解

$$Nu(t) = Nu_0 e^{-t/\tau}$$

首先我计算了三种方法求得的近似解 Nu_n 和精确解 $Nu(t_n)$ 之间的差值，并将这个差值

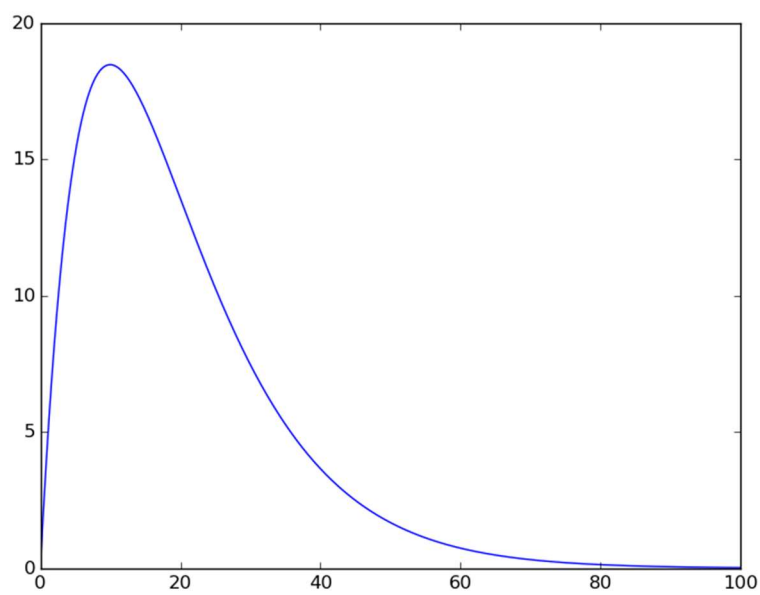
按 t_n 作图。

首先我作出了三种计算方法最初几步的示意图：

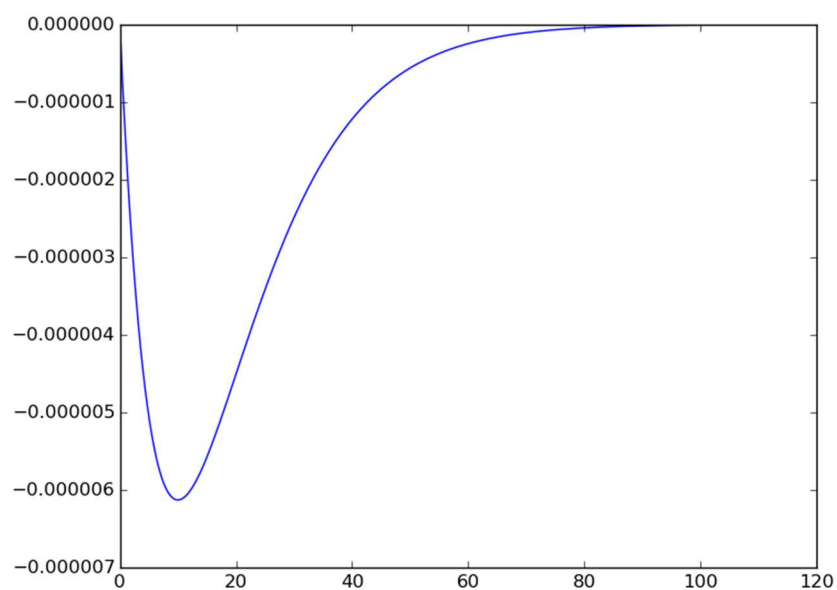


$$Nu = 1000, \tau = 10, h = 1, time = 10$$

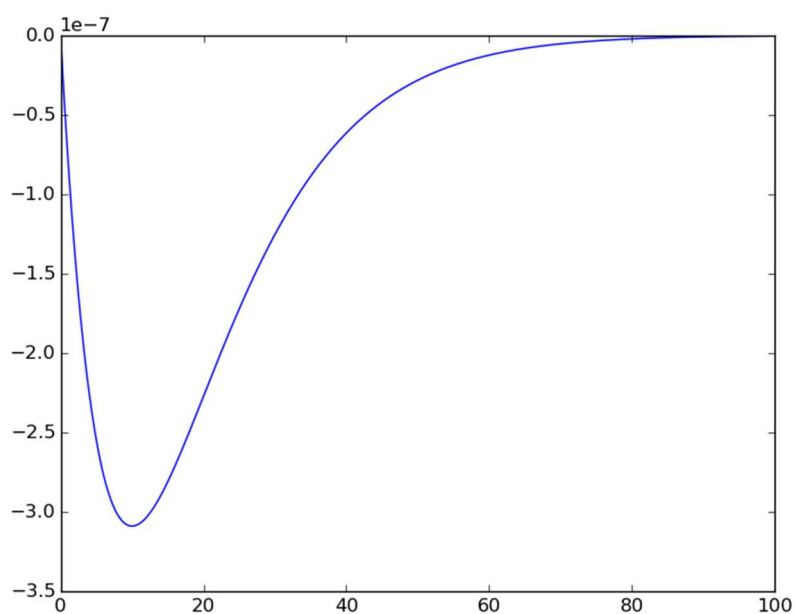
可以直观的看到，Euler 法与精确解的偏差较大，而其余两种的误差还比较小。
接下来是三种计算方法的误差-模拟时间图像：



Euler 法



中值法

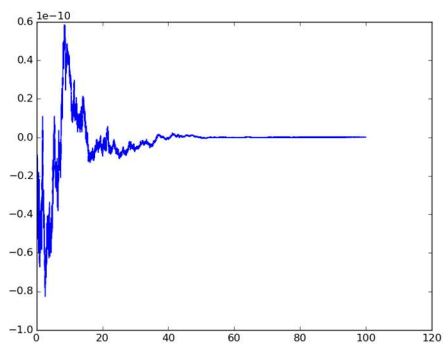


Runge-Kutta 法

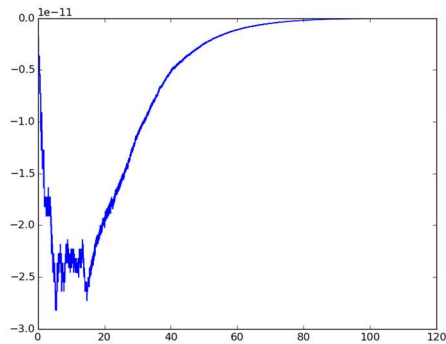
可以看到，误差的最大值上 Euler 法大于 Runge-Kutta 法大于中值法。

另外观察到一个现象是最终误差都会趋近于零，我认为这是由于本问题中最终原子数总会趋于零导致的一个特殊情况，可能会对分析造成一定的影响。

其中我还观察到，当 h 值小到一定程度时，Runge-Kutta 法得到的误差值会出现震荡：



$h = 0.0001$



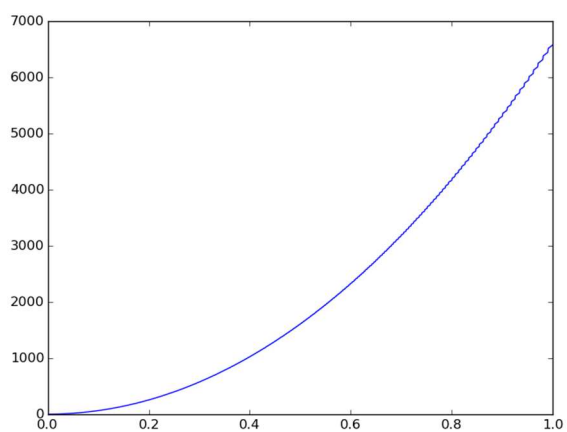
$h = 0.001$

接下来我研究了不同计算步长 h 下计算误差的变化。定义计算的总体偏差为

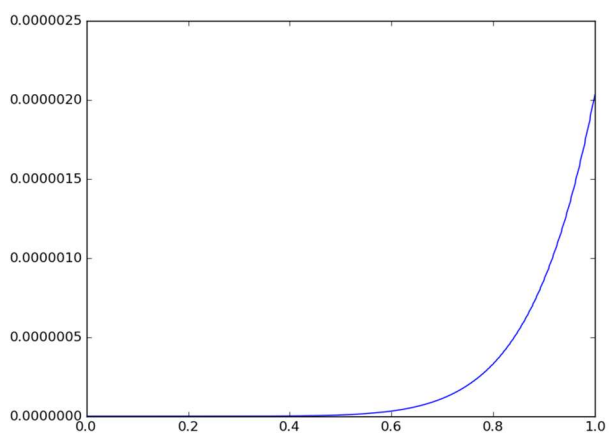
$$\frac{1}{n} \sum (Nu(t_n) - Nu_n)^2$$

可以计算得到三种方法的偏差与 h 的关系如下图:

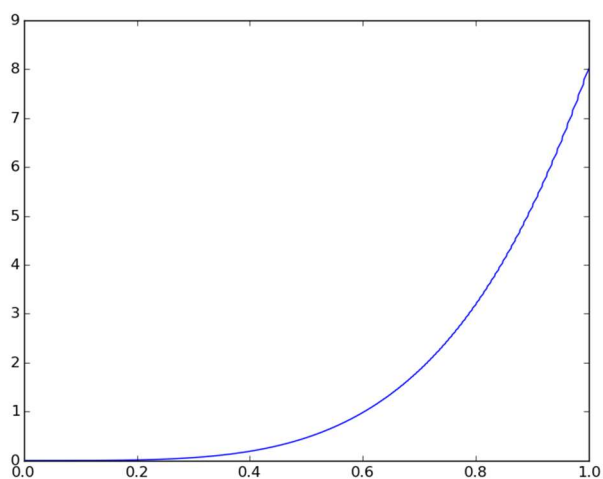
(h 范围为从 1 到 0.001, 计算总时间固定为 100)



Euler 法



Runge-Kutta 法

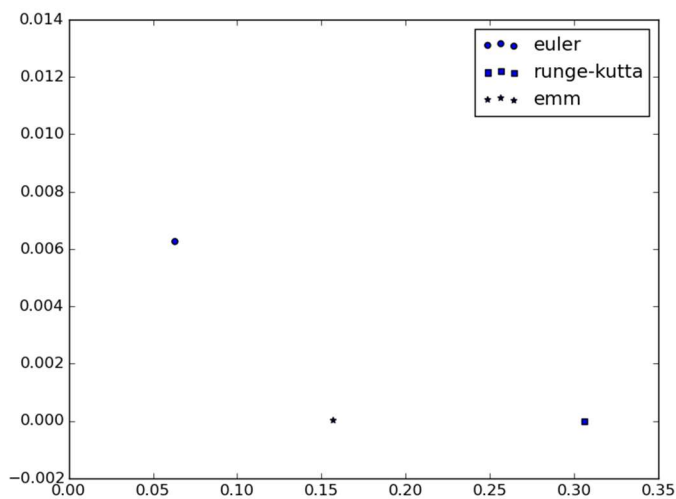


中值法

可以看出，平均的偏差上 Euler 法最大，Runge-Kutta 法最小，中值法居中，并且随着 h 值的减小，三种方法的平均偏差都逐步减小，这与我们之前的分析是一致的。观察误差曲线的陡峭程度，可以看出之前分析中得到的误差阶数也基本正确。

4.3 误差-时间的综合比较

我接下来选取了 $Nu_0 = 10000, \tau = 100, h = 0.01, time = 500$ 的条件用三种算法进行计算，并综合比较了它们的时间代价和计算误差，结果如下：（横坐标为时间，纵坐标为误差）



三种方法中 Euler 法误差最大而用时最短，中值法与 runge-kutta 法误差相近但中值法用时只为 RK 法的约一半。在此问题上中值法有最好的效果。

五、结论

综上所述我们介绍并讨论了三种数值求解常微分方程的方法。其中 Euler 法在时间上有很大

优势，但是精确性一般；Runge-Kutta 法运算耗时最多，但相对精度最好，考虑到这三种算法均为线性时间复杂度，精确计算中建议选取这种方法；中值法耗时约为 RK 方法的一半但是在这个问题中有了接近 RK 法的精度，在其它计算中也可以作为精度和时间平衡的一种算法。

值得一提的是，本文中提到的三种算法都是显式的，计算的稳定性比较差，而隐式的算法则会在理论值附近波动，更加稳定但复杂，在此不作更多说明。