常微分方程数值解法

初值问题

表示未知函数、未知函数的导数和自变量之间关系的方程称为**微分方程**

若未知函数只与一个自变量有关，则称为常微分方程

微分方程中出现的未知函数的最高阶导数的阶数即为微分方程的阶

一般一阶，二阶微分方程的形式如下

$$
\begin{aligned}
y' &= f(x,y) \\
y'' &= f\left(x,y,y'\right)
\end{aligned}
$$

本章中要解决的问题是**初值问题**，即求一阶微分方程 $F(x,y,y')=0$ 满足初值条件 $\left.y\right|_{x=x_0}=y_0$ 的特解的问题，记为

$$
\begin{cases}
F\left(x,y,y'\right)=0 \\
\left.y\right|_{x=x_0}=y_0
\end{cases}
$$

而**数值解法**是指设法将常微分方程离散化，给出解在一些离散点上的近似值。设方程问题的解 $y(x)$ 的存在区间为 $[a,b]$ ，令 $a=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_n=b$ ，其中 $h_k=x_{k+1}-x_k$ 为步长（节点若等距则令 $h=\frac{b-a}{n}$ ），用数值解法求出 $y(x)$ 在每个节点 x_k 上 $y(x_k)$ 的近似值，用 y_k 表示，即 $y_k\approx y(x_k)$ ，则 $y_0,y_1,\ldots,y_n$ 称为**微分方程的数值解**

欧拉方法

欧拉格式

设节点为 $x_i=a+ih(i=0,1,2,\ldots,n)\quad h=\frac{b-a}{n}$，则欧拉格式为

$$
y_{i+1}=y_i+hf\left(x_i,y_i\right)\qquad(i=0,1,2\cdots,n-1)
$$

又被称为欧拉显格式，循环求解。几何意义为使用点 x_i 处的导数近似向前差商

$$
y'\left(x_i\right)\approx\frac{y\left(x_{i+1}\right)-y\left(x_i\right)}{h}
$$

故

$$y\left(x_{i+1}\right) \approx y\left(x_i\right)+h y^{\prime}\left(x_i\right)=y_i+h f\left(x_i, y_i\right)=y_{i+1}$$

而欧拉隐格式使用点 x_{i+1} 处的导数近似向后差商

$$y^{\prime}\left(x_{i+1}\right) \approx \frac{y\left(x_{i+1}\right)-y\left(x_i\right)}{h}$$

故

$$y\left(x_{i+1}\right) \approx y_i+h f\left(x_{i+1}, y\left(x_{i+1}\right)\right)$$

欧拉隐格式表示为

$$y_{i+1}=y_i+h f\left(x_{i+1}, y_{i+1}\right) \quad(i=0, \ldots, n-1)$$

由于未知数 y_{i+1} 出现在等式两边故称为隐式。在使用欧拉隐格式时一般用显式计算一个初值，再**迭代求解**

梯形格式

梯形格式即使用数值积分得到欧拉格式时采用梯形求积公式（欧拉显格式为左矩形公式，欧拉隐格式为右矩形公式），可看作欧拉显格式和欧拉隐格式的平均，表示为

$$\begin{gathered}
y\left(x_{i+1}\right) \approx y\left(x_i\right)+\frac{h}{2}\left[f\left(x_i, y\left(x_i\right)\right)+f\left(x_{i+1}, y\left(x_{i+1}\right)\right)\right] \\
y_{i+1}=y_i+\frac{h}{2}\left[f\left(x_i, y_i\right)+f(x_{i+1}, y_{i+1})\right] \quad(i=0,1,2, \ldots, n-1)
\end{gathered}$$

梯形格式为隐格式，实际使用中一般将其化为显格式，或是使用欧拉显格式确定初值后迭代求解

中点格式

使用点 x_i 处的导数近似中心差商，即

$$y^{\prime}\left(x_{i+1}\right) \approx \frac{y\left(x_{i+2}\right)-y\left(x_i\right)}{2 h}$$

故

$$y\left(x_{i+2}\right) \approx y\left(x_i\right)+2 h f\left(x_{i+1}, y\left(x_{i+1}\right)\right)$$

迭代公式为

$$y_{i+1}=y_{i-1}+2hf\left(x_i,y_i\right)\quad i=1,\ldots,n-1$$

相比欧拉显格式，需要两个初值

欧拉预估-校正法

比较之前的各种方法

方法	优点	缺点
欧拉显格式	简单	精度低
欧拉隐格式	稳定性最好	精度低，计算量大
梯形格式	精度提高	计算量大
中点格式	精度提高，显式	需要两个初值，影响精度

结合欧拉格式和梯形公式可以得到欧拉预估-校正法，又被称为改进的欧拉法

第一步：使用欧拉显格式预测，得到

$$\overline{y}_{i+1}=y_i+hf\left(x_i,y_i\right)$$

第二步：将求得的 $\overline{y}_{i+1}$ 带入梯形格式矫正，得到

$$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{2}\left[f\left(x_i,y_i\right)+f\left(x_{i+1},\overline{y}_{i+1}\right)\right]$$

改进的欧拉法可表示为

$$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{2}\left[f\left(x_i,y_i\right)+f\left(x_{i+1},y_i+hf\left(x_i,y_i\right)\right)\right]\quad(i=0,\ldots,n-1)$$

也可写成

$$\begin{cases}y_{i+1}=y_i+\frac{h}{2}\left(K_1+K_2\right)\quad i=0,1,2\cdots,n-1\\K_1=f\left(x_i,y_i\right)\\K_2=f\left(x_i+h,y_i+hK_1\right)\\y_0=\alpha\end{cases}$$

基本概念

显式方法：计算 y_{i+1} 不用解方程，可以直接求出，如欧拉显格式，中点格式

隐式方法：计算 y_{i+1} 需要解方程，或是使用迭代法，如欧拉隐格式，梯形格式

单步方法：计算 y_{i+1} 只用到 y_i 的值，如欧拉显/隐格式，梯形格式

多步方法：计算 y_{i+1} ，需要用到 $y_i, y_{i-1}, \ldots, y_{i-k+1}$ 等 k 点的值，如中点格式

局部截断误差：离散化微分方程得到数值解时被舍去的部分，即 $|y(x_i)-y_i|$

方法	局部截断误差
欧拉显格式	O(h^2)
欧拉隐格式	O(h^2)
中点格式	O(h^3)
梯形格式	O(h^3)

整体截断误差：$\varepsilon_n=\sum_{i=0}^n|y(x_i)-y_i|$ ，即局部截断误差在每步的积累，比局部截断误差低一阶

数值方法的阶：若数值方法整体截断误差为 $O(h^p)$ ，则称该方法阶为 p

Runge-Kutta 方法

2 阶 Runge-Kutta 格式

目的：建立高精度的单步递推格式

单步递推法的基本思想是从 (x_i, y_i) 出发，以**某个斜率**沿直线到达 (x_{i+1}, y_{i+1}) ，欧拉法及其变形最多能到达的精度为 2 阶

思路：推广改进欧拉法

$$\left\{\begin{array}{l}
y_{i+1}=y_i+h\left[\lambda_1 K_1+\lambda_2 K_2\right] \\
K_1=f\left(x_i, y_i\right) \\
K_2=f\left(x_i+p h, y_i+p h K_1\right)
\end{array}\right.$$

引入三个系数 λ_1, λ_2, p （当 $\lambda_1=\lambda_2=\frac{1}{2}, p=1$ 时即为改进欧拉法）

希望能在 $y_i=y(x_i)$ 的前提下有 2 阶精度，即

$$R_i=y\left(x_{i+1}\right)-y_{i+1}=O\left(h^3\right)$$

需要满足

$$\lambda_1 + \lambda_2 = 1, \quad \lambda_2 p = \frac{1}{2}$$

存在无穷多个解，所有满足上式的格式均称为 2 阶 Runge-Kutta 格式

高阶 Runge-Kutta 格式

为了获得更高精度，进一步推广

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h\left[\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2 + \ldots + \lambda_m K_m\right] \\ K_1 = f\left(x_i, y_i\right) \\ K_2 = f\left(x_i + \alpha_2 h, y_i + \beta_{21} h K_1\right) \\ K_3 = f\left(x_i + \alpha_3 h, y_i + \beta_{31} h K_1 + \beta_{32} h K_2\right) \\ \ldots \\ K_m = f\left(x_i + \alpha_3 h, y + \beta_{m1} h K_1 + \beta_{m2} h K_2 + \ldots + \beta_{mm-1} h K_{m-1}\right) \end{cases}$$

其中 $\lambda_i(i=1,\ldots,m), \alpha_i(i=2,\ldots,m)$，$\beta_{ij}(i=2,\ldots m; j=1,2,\ldots i-1)$ 均为待定系数

3 阶 Runge-Kutta

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3) \\ K_1 = f\left(x_i, y_i\right) \\ K_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} K_1\right) \\ K_3 = f\left(x_i + h, y_i - hK_1 + 2hK_2\right) \end{cases}$$

最常用的 **4 阶 Runge-Kutta**

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \dfrac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f\left(x_i, y_i\right) \\ K_2 = f\left(x_i + \dfrac{h}{2}, y_i + \dfrac{h}{2} K_1\right) \\ K_3 = f\left(x_i + \dfrac{h}{2}, y_i + \dfrac{h}{2} K_2\right) \\ K_4 = f\left(x_i + h, y_i + hK_3\right) \end{cases}$$

Butcher 与 1965 年给出了需要计算的 K_i 数量与精度的关系

计算 K_i 个数	最高精度/阶
2	2
3	3
4	4
5	4
6	5
7	6
8 及以上	n - 2

Runge-Kutta 的精度主要受函数光滑性影响，光滑性不好的情况最好用低阶算法并取较小步长

收敛性与稳定性

收敛性

> 收敛性：若某算法对任意固定 $x = x_i = x_0 + ih$ ，当 $h \to 0, i \to \infty$ 时有 $y_i \to y(x_i)$ 则称该算法是收敛的

如考察初值问题

$$\begin{cases} y' = \lambda y \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

考察欧拉显格式的收敛性，易得该问题的精确解为

$$y(x) = y_0 e^{\lambda x}$$

欧拉显格式为

$$y_{i+1} = y_i + h\lambda y_i = (1+\lambda h) y_i$$

对任意固定的 $x = x_i = x_0 + ih = ih$ ，有

$$\begin{aligned} y_i &= y_0 (1+\lambda h)^{x_i/h} \\ &= y_0 \left[(1+\lambda h)^{1/\lambda h}\right]^{\lambda x_i} \end{aligned}$$

当 $h \to 0, i \to \infty$ 时有

$$y_i \to y_0 e^{\lambda x_i} = y(x_i)$$

欧拉显式法收敛

稳定性

> 稳定性：若某算法在计算过程中任意一步产生的误差在以后的计算中都逐步衰减，则称该算法是绝对稳定的

一般分析时考察模型方程

$$y' = \lambda y$$

当步长取 h ，将某算法应用于上式，并且假设只在初值时产生误差 $\varepsilon_0 = y_0 - \bar{y}_0$ ，若此误差之后逐步衰减，称该算法相对于 $\bar{h} = \lambda h$ 绝对稳定，$\bar{h}$ 全体构成绝对稳定区域

考察显式欧拉法

$$y_{i+1} = y_i + h\lambda y_i = (1 + h\lambda)^{i+1} y_0$$

对于之后计算的误差，有

$$\varepsilon_{i+1} = y_{i+1} - \bar{y}_{i+1} = (1 + \bar{h})^{i+1} \varepsilon_0$$

若要保证初始误差 ε_0 逐步衰减，需要满足 $|1 + \bar{h}| < 1$

考察隐式欧拉法

$$y_{i+1} = y_i + h\lambda y_{i+1}$$

可得

$$y_{i+1} = \left(\frac{1}{1 - \bar{h}}\right) y_i$$

故

$$\varepsilon_{i+1} = \left(\frac{1}{1 - \bar{h}}\right)^{i+1} \varepsilon_0$$

绝对稳定区域为 $|1 - \bar{h}| > 1$

可以看出隐式法绝对稳定性好于显式法

Adams 法

一般的线性多步法

不同于单步法，多步法利用已知的 $y_i, y_{i-1}, \ldots$ 及 $f(x_i, y_i), f(x_{i-1}, y_{i-1}), \ldots$ 构造精度高，计算量小的差分公式，使用若干节点处的 y, y' 的线性组合来近似 $y(x_{i+1})$ 即为线性多步法，通式为

$$y_{i+1} = \alpha_0 y_i + \alpha_1 y_{i-1} + \ldots + \alpha_k y_{i-k} + h\left(\beta_{-1} f_{i+1} + \beta_0 f_i + \beta_1 f_{i-1} + \ldots + \beta_k f_{i-k}\right)$$

当 $\beta_{-1} \neq 0$ 时为隐式公式，$\beta_{-1} = 0$ 为显式公式

显式 Adams

令 $f_m = f(x_m, y_m)$ 为 $f(x_m, y(x_m))$ 的近似

用经过 $k+1$ 个点 $(x_i, f_i), (x_{i-1}, f_{i-1}), \ldots, (x_{i-k}, f_{i-k})$ 的插值多项式 $P_k(x)$ 作为 $f(x, y(x))$ 在 x_i, x_{i+1} 之间的近似式（外插），则

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_k(x) dx$$

构造 k 阶牛顿后插多项式 $N_k(x_i + th), t \in [0, 1]$，则有

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx = \int_0^1 N_k\left(x_i + th\right) h dt + \int_0^1 R_k\left(x_i + th\right) h dt$$

得到显式公式

$$y_{i+1} = y_i + h \int_0^1 N_k\left(x_i + th\right) dt$$

局部截断误差为

$$R_i = y\left(x_{i+1}\right) - y_{i+1} = h \int_0^1 R_k\left(x_i + th\right) dt$$

> 一般有 $R_i = B_k h^{k+2} y^{(k+2)}\left(\xi_i\right)$，其中 B_k 以及计算 y_{i+1} 时各项系数均可查表得到

k	f_i	f_{i-1}	f_{i-2}	f_{i-3}	......	B_k
0	1					1/2
1	3/2	-1/2				5/12
2	23/12	-16/12	5/12			3/8
3	55/24	-59/24	37/24	-9/24		251/720
......						

$k=1$ 时得到二步公式

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

$k=3$ 时得到四步公式

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}(55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3})$$

Adams 方法需要另外的方法求出所需的初始值，如借助四阶 Runge-Kutta 法

隐式 Adams

用经过 $k+1$ 个点 $(x_{i+1},f_{i+1}),(x_i,f_i),(x_{i-1},f_{i-1}),\ldots,(x_{i-k+1},f_{i-k+1})$ 的插值多项式 $P_k(x)$ 作为 $f(x,y(x))$ 在 x_i,x_{i+1} 之间的近似式（内插）。构造 k 阶牛顿前插多项式，与显式 Adams 类似可得到一系列隐式公式

> 一般有 $R_i=B_kh^{k+2}y^{(k+2)}(\xi_i)$，其中 B_k 以及计算 y_{i+1} 时各项系数均可查表得到
>
> | k | f_{i+1} | f_{i} | f_{i-1} | f_{i-2} | ...... | B_k |
> |---|---|---|---|---|---|---|
> | 0 | 1 | | | | | -1/2 |
> | 1 | 1/2 | 1/2 | | | | -1/12 |
> | 2 | 5/12 | 8/12 | -1/12 | | | -1/24 |
> | 3 | 9/24 | 19/24 | -5/24 | 1/24 | | -19/720 |
> | ...... | | | | | | |

$k=3$ 时得到三步公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}[9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}]$$

一般 k 步的显式 Adams 有 k 阶精度，k 步的隐式 Adams 有 $k+1$ 阶精度

Adams 预测-校正

第一步用 Runge-Kutta 法计算前 k 个初值

第二步用显式 Adams 计算预测值

第三步用同阶的隐式 Adams 计算校正值

三步所用的公式精度需要相同，一般用经典 Runge-Kutta 配合 4 阶 Adams