

《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/>



中国科学技术大学

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, \dots, 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 $y_{i-1}, y_{i-2}, \dots, y_0$ 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**。



中国科学技术大学

多步法的基本原理

- 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, \dots, 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
 - 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
 - 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 $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-q}$ ，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 $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-q}$ 作为积分点, 则得到显格式, $q+1$ 阶 $r+1$ 步格式。 $r = \max(p, q)$

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

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 $x_{n+1}, x_n, \dots, x_{n+1-q}$ 作为积分点, 则得到隐格式, $q+1$ 阶 $r+1$ 步格式。 $r = \max(p, q)$

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

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

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



中国科学技术大学

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, \dots, 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



中国科学技术大学

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

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

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

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

- 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 $x_i = y_0 + ih$, $i = 1, 2, \dots, n$ 的五阶Adams-Bashforth公式为

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

五阶Adams-Bashforth公式的推导

- 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

$$p_0(x) = 1$$

$$p_1(x) = x$$

$$p_2(x) = x(x+1)$$

$$p_3(x) = x(x+1)(x+2)$$

$$p_4(x) = x(x+1)(x+2)(x+3)$$

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

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

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

预估-校正过程的启动

- 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。

不动点理论与迭代函数

- 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。



中国科学技术大学

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, \dots, 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



中国科学技术大学

- 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, \dots, 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：

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

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：

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

- 为了计算系数 d_i ，写出 y 和 y' 的 Taylor 级数：

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

- 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：

$$d_0 = \sum_{i=0}^k a_i$$

$$d_1 = \sum_{i=0}^k (ia_i - b_i)$$

$$d_2 = \sum_{i=0}^k \left(\frac{1}{2} i^2 a_i - ib_i \right)$$

\vdots

$$d_j = \sum_{i=0}^k \left(\frac{i^j}{j!} a_i - \frac{i^{j-1}}{(j-1)!} b_i \right), \quad j \geq 1$$

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 .

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

$$d_0 = a_0 + a_1 + a_2 = 0$$

$$d_1 = -b_0 + (a_1 - b_1) + (2a_2 - b_2) = 0$$

$$d_2 = (a_1/2 - b_1) + (2a_2 - 2b_2) = 0$$



$$d_3 = \left(\frac{1}{6}a_1 - \frac{1}{2}b_1\right) + \left(\frac{4}{3}a_2 - 2b_2\right) = 0$$

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

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

所以方法是四阶的。

- 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

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

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 $x_i, i = 0, \dots, N$, N 为 $2^k, k = 3, \dots, 8$,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		