《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/

求解目标

- 对于微分方程，很少能直接得到显式解，通常要采用数值方法
- 常微分方程的解是一个函数，但是，计算机没有办法对函数进行运算。
- 常微分方程的数值解并不是求函数的近似，而是求解函数在某些节点的近似值。
- 通常要求构造下列形式的函数值表格：

x_0	x_1	x_2	x_3	$\cdots$	x_m
y_0	y_1	y_2	y_3	$\cdots$	y_m

  其中y_i是在x_i的精确解$y(x_i)$的近似计算值
- 因此常微分方程数值解的目标就是产生上面那样的表格

例

考察初值问题

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

我们对区间做等距分割：$x_i = hi$，$h = (b-a)/m$. 设解函数在节点的近似为$\{y_i\}$，则

$$y'|_{x=x_i} = f(x, y)|_{x=x_i}$$

由数值微分公式，我们有

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} \approx f(x_i, y_i)$$

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$$

可以看到，给出初值，就可以用上式求出所有的$\{y_i\}$.

基本步骤如下：

- 对区间作分割：$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 求$y(x)$在x_i的近似值y_i，称为分割上的格点函数
- 由微分方程出发，建立求格点函数的差分方程。这个方程满足：
    - 解存在唯一
    - 稳定，收敛
    - 相容
- 解差分方程，求出格点函数

为了考察数值方法提供的数值解，是否有实用价值，需要知道如下几个结论：

- 收敛性问题
  步长充分小时，所得到的数值解能否逼近问题的真解
- 误差估计
- 稳定性问题
  舍入误差，在以后各步的计算中，是否会无限制扩大

Euler方法（向前差商公式）

做等距分割，利用数值微分代替导数项，建立差分方程。

- 形式为：
$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$
- 显示格式：由y_n直接算出y_{n+1}
- 优点：不需要对f求导数
- 缺陷：为了得到满意的精度，需要较小的h
- 由于该方法只需要在存在性定理成立的基础上就可以采用，因此具有理论上的重要意义

误差

在微分方程数值解中会出现若干种类型的误差。一种分类方法如下：

- 局部截断误差
- 局部舍入误差
- 整体截断误差
- 整体舍入误差
- 总误差

局部截断误差

在假设$y_i = y(x_i)$，即第i步计算是精确的前提下，考虑的截断误差$R_i = y(x_{i+1}) - y_{i+1}$ 称为局部截断误差

- 局部截断误差:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hf(x_n, y(x_n)) + \frac{h^2}{2}y''(\xi_n)$$

$$hT_{n+1} = \frac{h^2}{2}y''(\xi_n) = \mathcal{O}(h^2)$$

- 这个误差在逐步计算过程中会传播，积累。
- 这类误差出现在数值解的每一步
- 局部截断误差是所选用方法固有的，与舍入误差完全无关

局部舍入误差

- 局部舍入误差是在每一步计算过程中由于计算机的有限精度而引起的误差，它的值与计算机的字长有关(即与浮点机器数尾数中的位数有关)
- 在向机器中输入数据时会发生舍入误差，算术运算后也会发生舍入误差
- 通常的舍入模式是舍入到最接近数：选择实数左右两边较近的那个机器数。在距离相同时，采用舍入到偶数
- 也可以采用其它的舍入模式：向零舍入(也称截断)，向$+\infty$舍入，向$-\infty$舍入

整体截断误差

- 许多局部截断误差的全体累积起构成整体截断误差
- 整体舍入误差是前面步骤中局部舍入误差的累积
- 总误差是整体截断误差和整体舍入误差的和
  - 即使所有的计算都是精确的值，这个误差还是会出现
  - 它与方法有关，而与执行计算的计算机无关
  - 若局部截断误差是$\mathcal{O}(h^{p+1})$, 则整体截断误差必定是$\mathcal{O}(h^p)$

精度

若某算法的局部截断误差为$\mathcal{O}(h^{p+1})$，则称该算法有p阶精度。

UNIVERSITY OF SCIENCE & TECHNOLOGY OF CHINA
中国科学技术大学

稳定性

- 误差在以后各步的计算中不会无限制扩大。
- 考虑简单情况：仅初值有误差，而其他计算步骤无误差。
- 设$\{z_i\}$是初值有误差后的计算值，则

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + hf(x_n, y_n) \\
z_{n+1} &= z_n + hf(x_n, z_n)
\end{aligned}
$$

所以，我们有

$$
\begin{aligned}
|e_{n+1}| &= |y_{n+1} - z_{n+1}| \\
&\le |e_n| + h|f(x_n, y_n) - f(x_n, z_n)| \\
&\le |e_n| + hL|y_n - z_n| \\
&= |e_n|(1 + hL) \\
&\le \cdots \le |e_0|(1 + hL)^{n+1} \\
&\le |e_0| \exp((n+1)hL)
\end{aligned}
$$

- 向前差商公式关于初值是稳定的。当初始误差充分小，以后各步的误差也充分小

Euler方法（向后差商公式）

- 形式为：

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$$

- 隐示格式：通常$f(x,y)$是关于y_{n+1}的非线性方程，需要通过迭代法求得y_{n+1}

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(0)} &= y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{(k+1)} &= y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)}),\ k = 0, 1, 2\cdots \end{aligned}$$

直到

$$|y_{n+1}^{(k+1)} - y_{n+1}^{(k)}| < \varepsilon$$

Euler方法（中心差商公式）

- 形式为：

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf(x_n, y_n)$$

- 是多步，2阶格式，该格式不稳定

基于数值积分的公式

对微分方程

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

做积分，则：

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

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

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

中国科学技术大学

用矩形积分公式近似计算$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx$.

- 取$y'(x) \approx y'(x_n) = f(x_n, y(x_n))$

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

即为向前Euler公式。

- 取$y'(x) \approx y'(x_{n+1}) = f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$

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

即为向后Euler公式。

梯形公式

用梯形积分公式近似计算$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx$.

$$\begin{aligned}\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx &\approx \frac{1}{2}(x_{n+1}-x_n)(y'(x_{n+1})+y'(x_n)) \\ &= \frac{h}{2}(f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1})))\end{aligned}$$

得到梯形公式

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \frac{h}{2}(f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1})))$$

- 局部截断误差: $-\frac{h^3}{2}f''(\xi)$
- 误差估计: $e_{n+1} = \mathcal{O}(h^2)$
- 隐式方法，要用迭代法求解