

# 《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

- 定义 $V$ 表示所有无穷复数序列组成的集合, 即 $V$ 中元素具有形式

$$y = (y_1, y_2, y_3, \dots), \quad y_i \in \mathbb{C}$$

实际上,  $y$ 可以看作是正整数 $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$ 上的复值函数。用 $y_n$ 代替函数 $y$ 在自变量 $n$ 处的值 $y(n)$ 只是为了方便。

- 在 $V$ 中定义通常的加法和数乘,  $V$ 就成为线性空间, 这个空间是无限维的。
- 考虑线性算子 $L: V \rightarrow V$ , 其中最重要的一类就是移位算子, 记为 $E$ , 定义为

$$Ey = (y_2, y_3, y_4, \dots)$$

$$\text{即 } (Ey)_n = y_{n+1}$$

# 线性差分算子

- 移位算子可以连续复合在一起, 例如  $(EEy)_n = y_{n+2}$ ,  $(E^k y)_n = y_{n+k}$ .
- 由  $E$  的幂次有限线性组合表示的线性算子, 称为线性差分算子, 它的形式为

$$L = \sum_{i=0}^m c_i E^i$$

其中  $E^0$  为恒等算子。

- $V$  的所有线性差分算子构成从  $V$  到  $V$  的所有线性算子形成的空间的子空间,  $E$  的幂次就是这个空间的一组基。
- 此处我们主要研究线性差分方程  $Ly = 0$  的所有解。显然集合  $\{y : Ly = 0\}$  是  $V$  的一个线性子空间, 称为  $L$  的零空间。当找到这个子空间的一组基后, 我们就认为求解出了方程  $Ly = 0$ 。



中国科学技术大学

# 特征多项式

- $L$  是  $E$  的一个多项式, 记  $L = p(E)$ , 其中  $p$  是一个多项式, 称为  $L$  的特征多项式, 定义为

$$p(\lambda) = \sum_{i=0}^m c_i \lambda^i$$

- 例: 当  $c_0 = 2$ ,  $c_1 = -3$ ,  $c_2 = 1$ , 其它  $c_i = 0$ , 对应的线性差分方程为

$$(E^2 - 3E^1 + 2E^0)y = 0 \quad \text{或者}$$

$$y_{n+2} - 3y_{n+1} + 2y_n = 0, \quad n \geq 1, \quad \text{或者}$$

$$p(E)y = 0, \quad p(\lambda) = \lambda^2 - 3\lambda + 2$$

- 很容易得到上述方程的解。实际上，可以任意选择 $y_1, y_2$ ，那用应用 $y_{n+2} - 3y_{n+1} + 2y_n = 0$ 就可以迭代确定后面的分量。  
例如

$$(1, 0, -2, -6, -14, -30, \dots)$$

$$(1, 1, 1, 1, \dots)$$

$$(2, 4, 8, 16, \dots)$$

其中第一个很难看出通项，而后两个解的形式为 $y_n = \lambda^n$ ， $\lambda = 1, 2$ 。而这两个数就是特征多项式的根

- 是否存在其它形式为 $\lambda^n$ 的解呢？把 $y_n = \lambda^n$ 代入 $y_{n+2} - 3y_{n+1} + 2y_n = 0$ 可得

$$\lambda^n(\lambda - 1)(\lambda - 2) = 0$$

因此此类形式的其它解只可能是 $(0, 0, 0, \dots)$



中国科学技术大学

- 实际上, 由  $u_n = 1$  和  $v_n = 2^n$  定义的解形成了零空间的一组基. 实际上, 设  $y$  是任意解, 下面求解常数  $\alpha, \beta$  使得  $y = \alpha u + \beta v$ . 这个等式即

$$y_n = \alpha u_n + \beta v_n$$

特别地, 对于  $n = 1, 2$ , 有

$$y_1 = \alpha + 2\beta, \quad y_2 = \alpha + 4\beta$$

方程组有唯一解  $\alpha, \beta$ . 对于其它的  $n$ :

$$\begin{aligned} y_n &= 3y_{n-1} - 2y_{n-2} \\ &= 3(\alpha u_{n-1} + \beta v_{n-1}) - 2(\alpha u_{n-2} + \beta v_{n-2}) \\ &= \alpha(3u_{n-1} - 2u_{n-2}) + \beta(3v_{n-1} - 2v_{n-2}) \\ &= \alpha u_n + \beta v_n \end{aligned}$$



中国科学技术大学

## Theorem (零空间定理)

若 $\lambda$ 是多项式 $p$ 的一个根, 则 $(\lambda, \lambda^2, \lambda^3, \dots)$ 是差分方程 $p(E)y = 0$ 的一个解。若 $p$ 的所有根为单根, 则差分方程的每个解是这些特解的一个线性组合。

证明: 若 $\lambda$ 为任意复数,  $u = (\lambda, \lambda^2, \lambda^3, \dots)$ , 则有 $(Eu)_n = \lambda u_n$ , 即 $Eu = \lambda u$ . 从而有 $E^i u = \lambda^i u$ . 由此可得

$$p(E)u = \left( \sum_{i=0}^m c_i E^i \right) u = \sum_{i=0}^m c_i (E^i u) = \sum_{i=0}^m c_i \lambda^i u = p(\lambda)u$$

所以若 $p(\lambda) = 0$ , 则有 $p(E)u = 0$ .

设多项式 $p$ 的所有根 $\lambda_k$ 都是单根, 则对每个根 $\lambda_k$ , 差分方程 $p(E)y = 0$ 有一个解 $u^{(k)} = (\lambda_k, \lambda_k^2, \lambda_k^3, \dots)$ . 设 $y$ 是差分方程的任意解, 下面把它表示成 $y = \sum_{k=1}^m a_k u^{(k)}$ . 实际上, 取这级数的前 $m$ 项, 得到

$$y_i = \sum_{k=1}^m a_k \lambda_k^i, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

方程组的系数阵为Vandermonde矩阵, 因此可得到唯一的 $a_1, \dots, a_m$ 使得上式成立. 令

$$z = y - \sum_{k=1}^m a_k u^{(k)}$$

那么有 $p(E)z = 0$ , 由此可得 $z = 0$ .



中国科学技术大学



# 重根

- 若 $\lambda$ 是 $p$ 的一个 $k$ 重根, 那么下述序列是差分方程 $p(E)y = 0$ 的解:

$$y(\lambda) = (\lambda, \lambda^2, \lambda^3, \dots)$$

$$y'(\lambda) = (1, 2\lambda, 3\lambda^2, \dots)$$

$$y''(\lambda) = (0, 2, 6\lambda, \dots)$$

$\vdots$

$$y^{(k-1)}(\lambda) = \frac{d^{k-1}}{d\lambda^{k-1}}(\lambda, \lambda^2, \lambda^3, \dots)$$

## Theorem (零空间的基定理)

设 $p$ 是一个多项式, 并且 $p(0) \neq 0$ , 则可以得到 $p(E)$ 的零空间一组基为: 对于 $p$ 的每个 $k$ 重根 $\lambda$ , 有相应的 $k$ 个解 $y(\lambda), y'(\lambda), \dots, y^{(k-1)}(\lambda)$ , 其中 $y(\lambda) = (\lambda, \lambda^2, \lambda^3, \dots)$

求差分方程的通解

$$4y_n + 7y_{n-1} + 2y_{n-2} - y_{n-3} = 0$$

- $p(\lambda) = 4\lambda^3 + 7\lambda^2 + 2\lambda - 1 = (\lambda + 1)^2(4\lambda - 1)$ .  $p$ 有一个二重根 $-1$ 和单根 $1/4$ . 所以基解为

$$y(-1) = (-1, 1, -1, 1, \dots)$$

$$y'(-1) = (1, -2, 3, -4, \dots)$$

$$y(1/4) = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{16}, \frac{1}{64}, \dots\right)$$

从而通解为

$$\begin{aligned} y &= \alpha y(-1) + \beta y'(-1) + \gamma y(1/4)^n \\ &= \alpha(-1)^n + \beta n(-1)^{n-1} + \gamma(1/4)^n \end{aligned}$$

# 稳定的差分方程

- 如果对于 $V$ 中元素 $y = (y_1, y_2, \dots)$ 存在常数 $c$ 使得对所有的 $n$ , 有 $|y_n| \leq c$ , 即

$$\sup_n |y_n| < \infty$$

则称 $y$ 有界。

- 若形如 $p(E)y = 0$ 的差分方程的解有界, 则称此差分方程是稳定的。

## Theorem

对于一个满足 $p(0) \neq 0$ 的多项式 $p$ , 下述条件是等价的:

- ① 差分方程 $p(E)y = 0$ 是稳定的
- ②  $p$ 的所有根满足 $|z| \leq 1$ , 并且所有重根满足 $|z| < 1$

# 线性多步法的理论分析

- 线性多步法的一般形式为

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

- 设想初值问题的数值解是由不同步长计算得到的，用 $y(h, x)$ 表示在步长 $h$ 时得到的数值解。精确解记为 $y(x)$ 。线性多步法称为收敛的，是指对于区间 $[x_0, x_m]$ 中的任意 $x$ ,

$$\lim_{h \rightarrow 0} y(h, x) = y(x)$$

这里的前提条件就是初始值满足同样的定义，即

$$\lim_{h \rightarrow 0} y(h, x_0 + nh) = y_0, \quad 0 \leq n < k$$

以及函数 $f$ 满足基本的存在性定理的假设。



中国科学技术大学

- 线性多步法相应的两个多项式是

$$p(z) = a_k z^k + a_{k-1} z^{k-1} + \cdots + a_0$$

$$q(z) = b_k z^k + b_{k-1} z^{k-1} + \cdots + b_0$$

- 若 $p$ 的所有根位于圆盘 $|z| \leq 1$ 中, 而且模为1的根是单根, 则方法是稳定的
- 若 $p(1) = 0$ ,  $p'(1) = q(1)$ , 则方法是相容的

## Theorem (线性多步法的稳定性和相容性定理)

线性多步法收敛的充要条件就是这个多步法是稳定的和相容的。

这个定理的必要性证明比较简单。充分性相当复杂, 不给出。

# 收敛 $\implies$ 稳定

若方法不稳定, 则或者 $p$ 有一个根 $\lambda$ 满足 $|\lambda| > 1$ 或者 $p$ 有一个根 $\lambda$ 满足 $|\lambda| = 1$ , 并且 $p'(\lambda) = 0$ .

考虑初值问题(其解为 $y(x) \equiv 0$ ):

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

那么线性多步法是由等式

$$a_k y_n + a_{k-1} y_{n-1} + \cdots + a_0 y_{n-k} = 0$$

确定。这是一个线性差分方程, 它的一个解是 $y_n = h\lambda^n$ , 其中 $\lambda$ 就是 $p$ 的一个根。若 $|\lambda| > 1$ , 则对所有 $0 \leq n < k$ , 我们有

$$|y(h, nh)| = h|\lambda^n| < h|\lambda|^k \rightarrow 0, \quad h \rightarrow 0$$

满足了前面的限制条件 $\lim_{h \rightarrow 0} y(h, x_0 + nh) = y_0$ 。

但是它违背收敛条件  $\lim_{h \rightarrow 0} y(h, x) = y(x)$ , 因为若  $x = nh$ , 则  $h = x/n$ , 并且

$$|y(h, x)| = |y(h, nh)| = x|\lambda|^n/n \rightarrow \infty$$

另外一方面, 若  $|\lambda| = 1$  且  $p'(\lambda) = 0$ , 则上述差分方程的一个解是  $y_n = hn\lambda^n$ . 这时同样满足限制条件:

$$|y(h, nh)| = hn|\lambda|^n = hn < hk \rightarrow 0, \quad h \rightarrow 0, 0 \leq n < k$$

但违背收敛条件, 因为

$$|y(h, x)| = (x/n)n|\lambda|^n = x \neq 0$$



中国科学技术大学

- 考虑问题

$$\begin{cases} y' = 0, \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

其精确解为 $y \equiv 1$ . 线性多步法仍然是

$$a_k y_n + a_{k-1} y_{n-1} + \cdots + a_0 y_{n-k} = 0$$

取 $y_0 = y_1 = \cdots = y_{k-1} = 1$ 得到一个解, 然后利用线性多步法得到后面的 $y_k$ 值. 因为方法收敛, 所以 $\lim_{n \rightarrow \infty} y_n = 1$ . 把它代入到多步法的定义中, 得到 $a_k + a_{k-1} + \cdots + a_0 = 0$ , 即 $p(1) = 0$ .



- 再考虑初值问题

$$\begin{cases} y' = 1, \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

其精确解为  $y = x$ . 多步法表示为

$$a_k y_n + a_{k-1} y_{n-1} + \cdots + a_0 y_{n-k} = h[b_k + b_{k-1} + \cdots + b_0]$$

由于方法收敛, 从而是稳定的, 因而  $p(1) = 0$ ,  $p'(1) \neq 0$ . 下面验证  $y_n = (n+k)h\gamma$ ,  $\gamma = q(1)/p'(1)$  给出上面非齐次差分方程的解, 实际上,

$$\begin{aligned} & h\gamma[a_k(n+k) + a_{k-1}(n+k-1) + \cdots + a_0 n] \\ &= nh\gamma(a_k + a_{k-1} + \cdots + a_0) + h\gamma[ka_k + (k-1)a_{k-1} + \cdots + a_1] \\ &= nh\gamma p(1) + h\gamma p'(1) \\ &= h\gamma p'(1) = hq(1) = h(b_k + b_{k-1} + \cdots + b_0) \end{aligned}$$



中国科学技术大学

- 因为

$$\lim_{h \rightarrow 0} (n+k)h\gamma = 0, \quad n = 0, 1, \dots, k-1$$

所以这个数值解中的开始值与初值 $y(0) = 0$ 相容。此时的收敛条件要求当 $nh = x$ 时

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n = x$$

因此我们有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (n+k)h\gamma = x$$

而  $\lim_{n \rightarrow \infty} kh = 0$ , 所以得到 $\gamma = 1$ 即 $p'(1) = q(1)$

## 5.2.1 例：Milne方法

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

- 这是一个四阶的隐式方法，它由下述两个多项式来描述：

$$p(z) = z^2 - 1$$

$$q(z) = \frac{1}{3}z^2 + \frac{4}{3}z + \frac{1}{3}$$

- $p$ 的根为 $+1$ 和 $-1$ ，都是单根，而且 $p'(z) = 2z$ ，所以 $p'(1) = 2 = q(1)$ ，从而相容性和稳定性条件满足，即Milne方法是收敛的。



中国科学技术大学

- 目标是分析多步法中产生的局部截断误差，即假定在所有前面的值 $y_{n-1}, y_{n-2}, \dots$ 是准确的假设下，利用给定的多步法得到 $y_n$ 所产生的误差： $y(x_n) - y_n$ . 这个误差是由差分方程近似微分方程而导致的。其中不包含舍入误差

## Theorem (线性多步法的局部截断误差定理)

若多步法是 $m$ 阶的， $y \in C^{m+2}$ ，而且 $\partial f / \partial y$ 连续，则

$$y(x_n) - y_n = \frac{d_{m+1}}{a_k} h^{m+1} y^{(m+1)}(x_{n-k}) + \mathcal{O}(h^{m+2})$$

其中系数 $d_k$ 定义见第4节。

证明：只要证明 $n = k$ 时的等式就可以了。利用第4节中定义的线性泛函 $L$ ，我们有

$$Ly = \sum_{i=0}^k (a_i y(x_i) - hb_i y'(x_i)) = \sum_{i=0}^k (a_i y(x_i) - hb_i f(x_i, y(x_i)))$$

另一方面，数值解满足等式：

$$0 = \sum_{i=0}^k (a_i y_i - hb_i f(x_i, y_i))$$

因为我们已假定 $y_i = y(x_i)$ ,  $i < k$ ，所以从上面两式相减得到

$$Ly = a_k(y(x_k) - y_k) - hb_k(f(x_k, y(x_k)) - f(x_k, y_k))$$



中国科学技术大学

对前一结果的最后一项应用中值定理, 得到

$$\begin{aligned} Ly &= a_k(y(x_k) - y_k) - hb_k \frac{\partial f}{\partial y}(x_k, \xi)(y(x_k) - y_k) \\ &= (a_k - hb_k F)(y(x_k) - y_k) \end{aligned}$$

其中 $\xi$ 位于 $y(x_k)$ 和 $y_k$ 之间,  $F = \partial f(x_k, \xi)/\partial y$ . 若使用的方法是 $m$ 阶的, 则

$$Ly = d_{m+1}h^{m+1}y^{(m+1)}(x_0) + \mathcal{O}(h^{m+2})$$

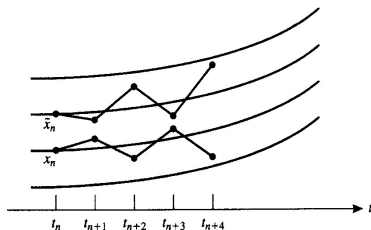
把上述两式组合起来, 即证明了定理。这里略去了分母中的 $hb_k F$ . □



中国科学技术大学

# 整体截断误差

- 目标是建立起微分方程数值求解中的整体截断误差界。
- 在求解过程中任何给定的 $x_n$ 步上，设计算出来的解为 $y_n$ ，它不同于真解 $y(x_n)$ ，差 $y(x_n) - y_n$ 就是整体截断误差。
- 整体截断误差不只是前面点上出现的所有局部截断误差之和。因为在求解过程中每一步必须使用前面步上计算的近似纵坐标作为初值，而纵坐标是有误差的，所以数值过程实际上试图跟踪的是错误的解曲线
- 因此我们需要了解改变初值对解曲线上后面纵坐标的影响。



- 考虑初值问题:

$$\begin{cases} y' = f(x, y), \\ y(0) = s \end{cases}$$

这里  $f_y = \partial f / \partial y$  连续, 并且在  $0 \leq x \leq T, y \in \mathbb{R}$  定义的区域  
内满足  $f_y(x, y) \leq \lambda$ .

- 解是  $x$  的函数, 但也与初值  $s$  有关, 所以记为  $y(x; s)$ . 定义  $u(x) = \partial y(x; s) / \partial s$ .
- 对初值问题中  $u$  关于  $s$  的微分可得到一个微分方程(称为变分方程)为

$$\begin{cases} u'(x) = f_y(x, y)u, \\ u(0) = 1 \end{cases}$$



在初值问题

$$\begin{cases} y' = y^2, \\ y(0) = s \end{cases}$$

中显式地求出  $u$ .

- 这里  $f(x, y) = y^2$ ,  $f_y = 2y$ , 因此变分方程为

$$\begin{cases} u' = 2yu, \\ u(0) = 1 \end{cases}$$

- 初值问题的解是  $y(x) = \frac{s}{1 - sx}$ , 因此变分方程变为

$$\begin{cases} u'(x) = 2s(1 - sx)^{-1}u(x), \\ u(0) = 1 \end{cases}$$

其解为

$$u(x) = \frac{1}{(1 - sx)^2}$$

## Theorem

若  $f_y \leq \lambda$ , 则变分方程的解满足不等式

$$|u(x)| \leq e^{\lambda x}, \quad x \geq 0$$

证明：从变分方程得到

$$u'/u = f_y = \lambda - \alpha(x)$$

其中  $\alpha(x) \geq 0$ . 对上式进行积分, 得到

$$\log |u| = \lambda x - \int_0^x \alpha(\tau) d\tau = \lambda x - A(x)$$

由于  $A(x) \geq 0$ , 所以  $\log |u| \leq \lambda x$ , 即  $|u| \leq e^{\lambda x}$

# 初值问题解曲线定理

## Theorem

若初值问题用初值 $s$ 和 $s + \delta$ 求解，则解曲线在 $x$ 上差别至多为 $|\delta|e^{\lambda x}$

证明：根据 $u$ 的定义，对变分方程采用中值定理，再根据变分方程定理，得到

$$\begin{aligned} & |y(x; s) - y(x; s + \delta)| \\ &= \left| \frac{\partial}{\partial s} y(x, s + \theta\delta) \right| |\delta| \\ &= |u(x)| \cdot |\delta| \leq |\delta| e^{\lambda x} \end{aligned}$$

# 整体截断误差界定理

## Theorem

若在 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 上的局部截断误差在数量上不超过 $\delta$ , 则在 $x_n$ 上的整体截断误差不超过

$$\delta \frac{e^{n\lambda h} - 1}{e^{\lambda h} - 1}$$

证明：设在 $x_1, x_2, \dots$ 上数值解的局部截断误差为 $\delta_1, \delta_2, \dots$ 。在计算 $y_2$ 时初始条件有一个 $\delta_1$ 的误差，由初值问题解曲线定理，在解曲线上这个误差在 $x_2$ 的影响至多是 $|\delta_1|e^{\lambda h}$ 。把这个值加到 $x_2$ 的截断误差上，因此 $x_2$ 的整体截断误差至多为 $|\delta_1|e^{\lambda h} + |\delta_2|$ 。这个误差在 $x_3$ 上的影响不大于 $(|\delta_1|e^{\lambda h} + |\delta_2|)e^{\lambda h}$ ，把这个值加到 $x_3$ 的截断误差上。以这个方式继续下去，得到在 $x_n$ 上的整体截断误差不大于

$$\sum_{k=1}^n |\delta_k| e^{(n-k)\lambda h} \leq \delta \sum_{k=0}^{n-1} e^{k\lambda h} = \delta \frac{e^{n\lambda h} - 1}{e^{\lambda h} - 1}$$

# 整体截断误差逼近定理

## Theorem

若数值解中局部截断误差是 $\mathcal{O}(h^{m+1})$ , 则整体截断误差是 $\mathcal{O}(h^m)$ .

证明: 在整体截断误差界定理中, 设 $\delta$ 是 $\mathcal{O}(h^{m+1})$ 。因为 $e^z - 1$ 是 $\mathcal{O}(z)$ ,  $nh = x$ , 所以整体截断误差的阶减少一。  $\square$