

数值分析第七次上机练习报告

——常微分方程数值解

周懿

力 1-2021013053

一、问题的描述

考虑以下常微分方程组：

$$\begin{cases} \frac{dp}{dt} = -q, t \in [0, T] \\ \frac{dq}{dt} = p, t \in [0, T] \\ p(0) = 0, \\ q(0) = 1. \end{cases} \quad (1)$$

试分别用一般显式的 Runge-Kutta 方法（如经典的四阶 R-K 方法）和辛算法（如四阶的隐式 R-K 算法）计算（比如到 $T=100$ ），并比较结果。尤其看看其守恒量 $\frac{p^2+q^2}{2}$ 的演化情况。

二、方法描述

常微分方程(5)的一般解形式如下：

$$y = y(t_0) + \int_{t_0}^{t_1} f(t, y) dt \quad (2)$$

而我们使用 R-K 方法，本质上就是通过插值形式的数值积分公式提升解(2)中积分项的精度。

(a) 显式 R-K 方法

显式 R-K 方法的主要特点在于利用已经求出的节点对未知节点进行插值，其本质上是预测，也就是外插法，其算法如下：

Algorithm 1: Explicit Runge-Kutta method in order 4

Input: Initial condition y_0 , time step h

Output: Solution y

Initialize $t_0 = 0$, $y = y_0$;

while $t < t_{end}$ **do**

```
     $k_1 = h \cdot f(t, y);$   
     $k_2 = h \cdot f(t + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{2});$   
     $k_3 = h \cdot f(t + \frac{h}{2}, y + \frac{k_2}{2});$   
     $k_4 = h \cdot f(t + h, y + k_3);$   
     $y = y + \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6};$   
     $t = t + h;$ 
```

end

(b) 隐式 R-K 方法

显式 R-K 方法的主要特点在于对未知节点进行插值的节点包括了未知节点，其算法如下：

Algorithm 2: Implicit Runge-Kutta method in order 4

Input: Initial condition y_0 , time step h

Output: Solution y

Initialize $t_0 = 0$, $y = y_0$;

while $t < t_{end}$ **do**

```
     $z = y + \frac{h}{2} \cdot (f(t + h, z) + f(t, y));$   
    (Newton iteration method)  $y = z;$   
     $t = t + h;$ 
```

end

三、 方案设计

我们通过编写 MATLAB 程序来进行线性方程组的求解。

1. main.m: 主程序。会生成题目指定的初值条件和求解区间，它将会调用 4 次 ode_exp.m，分别使用 ode_expRK4.m、ode_impRK4.m 以及 MATLAB 提供的两个经典 ODE 求解器 ode45、ode15s 对原常微分方程进行求解，并与该方程的解析解结果进行比较，最终会分别绘出 p, q 随 t 变化和守恒量 $\frac{p^2+q^2}{2}$ 随时间 t 变化的曲线图。
2. ode_expRK4.m: 使用显式四阶 R-K 方法进行 ODE 求解的程序。该程序的参数和返回值与 MATLAB 提供的 ODE 求解器格式完全一致。
3. ode_impRK4.m: 使用隐式四阶 R-K 方法（辛算法）进行 ODE 求解的程序。该程序的参数和返回值与 MATLAB 提供的 ODE 求解器格式完全一致。
4. ode_exp.m: 为了让代码更加简洁而将实验封装成了一个函数。该函数接受求解器句柄、求解区间和初值条件，同时接受求解器名称，分别完成 ODE 求解、误差和守恒量计算和绘图的任务；为了防止 bug 加了一个返回值，实际上它的返回值为空。

需要注意的是，封装好的实验函数（ode_exp）只能对本题进行实验，不具有可复用性，而编写的两个求解器是具有可复用性的。

四、 计算结果及其分析

四种求解器的求解结果如图 3412所示。题目所给的方程存在解析解，所以图中的 Baseline 结果由解析解给出。由 p 和 q 的绘图结果我们可以看出，MATLAB 提供的两个求解器均给出了稳定并且较为精确的结果，函数值和守恒量的求解结果都和 Baseline 吻合的比较好；而我们编写的两个求解器也取得了较好的结果。但是当我们比较守恒量的变化时，我们会发现这四种求解器的表现差异。在四种求解器中，我们编写的四阶隐式 R-K 方法取得了最好的结果，守恒量误差很小；而显式方法出现了更明显的衰减。而 MATLAB 提供的两种求解器衰减比我们编写的算法衰减还要再明显，可能是求解器没有修改精度的原因导致的。但是当我们计算误差的时候，我们会发现隐式 R-K 的误差非常明显，而 ode45 的误差非常小。对于这个现象我们可以给出一种解释：辛算法求解的误差主要出现在相位 φ ，振幅的误差很小，而其他求解方法对振幅影响较大，相位的误差却相对较小。我们仔细观察图像，也可以发现辛算法求解的图像和解析解相比发生了更明显的错位。

该问题本质上是一个求解一维谐振子 Hamilton 方程的问题，其原方程如下：设一维谐振子的质量为 m，系统的恢复系数为 k，谐振子的广义动量为 p，以势能零点为原点，设其 t 时刻位移为 x，那么我们有

$$\begin{cases} \hat{x} = \frac{p}{m} \\ \hat{p} = -kx \\ \hat{p}(0) = 0 \\ \hat{x}(0) = v_{max} \end{cases} \quad (3)$$

也就是 t=0 时谐振子正处于平衡位置。对方程进行进一步的转化，可以得到：

$$\begin{cases} \hat{x} = \frac{p}{m} \\ \frac{\hat{p}}{m} = -\frac{k}{m}x \\ \hat{p}(0) = 0 \\ \hat{x}(0) = v_{max} \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} \hat{x} = \frac{p}{m} \\ \frac{\hat{p}}{m} = -\omega^2 x \\ \hat{p}(0) = 0 \\ \hat{x}(0) = v_{max} \end{cases} \quad (5)$$

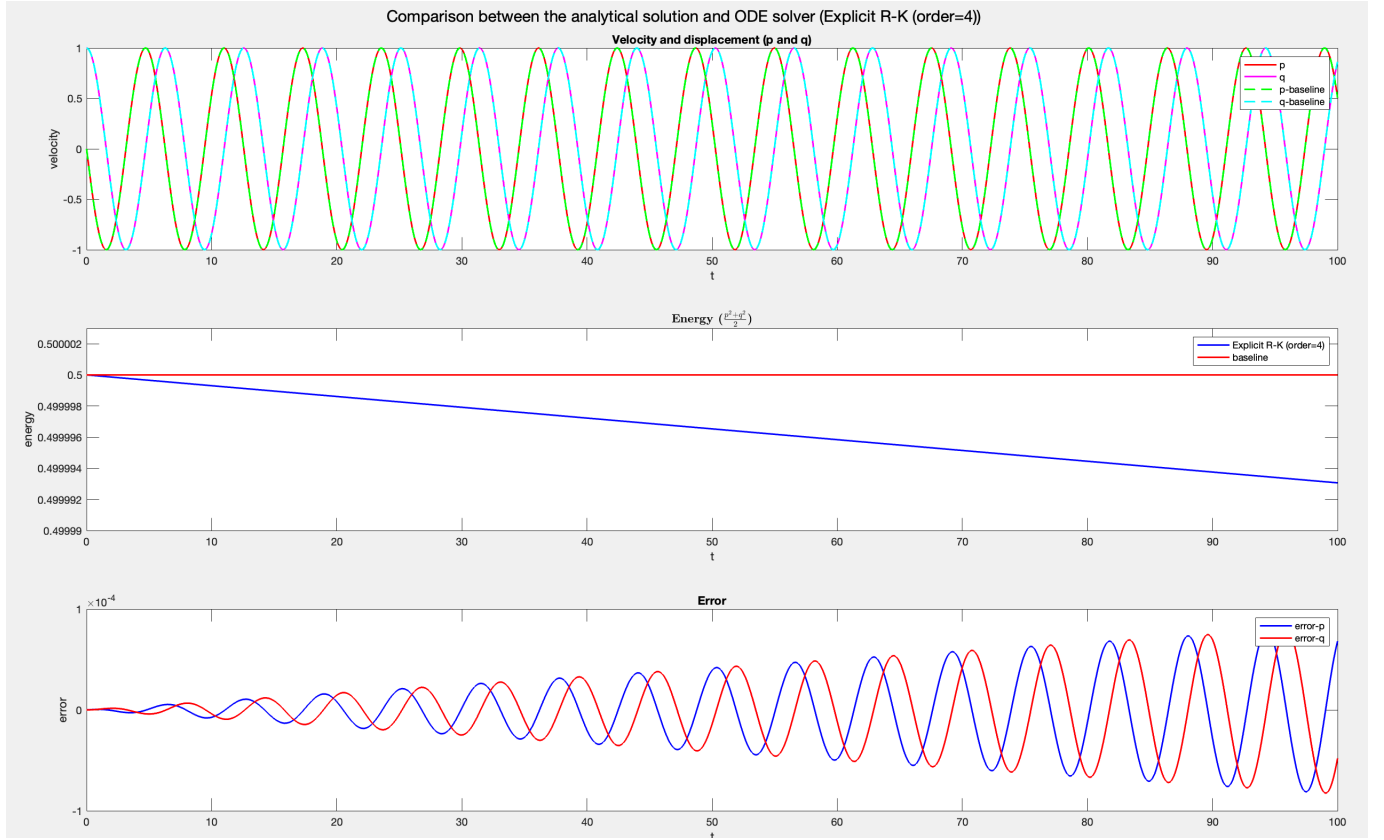


图 1: 显式 4 阶 R-K 方法计算结果

其中 $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ 。则该体系的总机械能为

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2 \\
 &= \frac{k}{2}\left(x^2 + \frac{m\dot{x}^2}{k}\right) \\
 &= \frac{k}{2}\left(x^2 + \frac{p^2}{mk}\right) \\
 &= \frac{k}{2}\left(x^2 + \left(\frac{p}{\omega m}\right)^2\right)
 \end{aligned} \tag{6}$$

如果我们令 $\omega = 1$, $\hat{p} = \frac{p}{m}$, $\hat{q} = x$, 那么我们就可以得到题目要求求解的常微分方程组了。也就是说, 题干中的 p 和 q 分别代表谐振子的速度与谐振频率之比和谐振子的位移, 求解的是频率为 1(rad/s) 时振子的运动规律。通解可以由振动理论导出, 这里不做赘述。我们给出题目所给方程的解析解, 我们的 Baseline 结果将会由式(7)给出:

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos t & \sin t \\ -\sin t & \cos t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix} \tag{7}$$

而题目中要求计算的守恒量 $\frac{p^2+q^2}{2}$, 正是谐振子机械能与恢复系数之比, 因为恢复系数是常量, 由能量守恒可知我们要求的守恒量理论上应该是守恒的。

因而这个结果背后存在一系列问题: 守恒量为什么会失真? 为什么在其他求解器出现衰减的时候, 我们编写的隐式方法反而让守恒量增加了? 从 Baseline 的结果我们可以看出当计算步数很少时, 舍入误差并没有带来很大的影响。而我们的方法不仅有舍入误差, 还有截断误差, 在不断地迭代中还会有误差

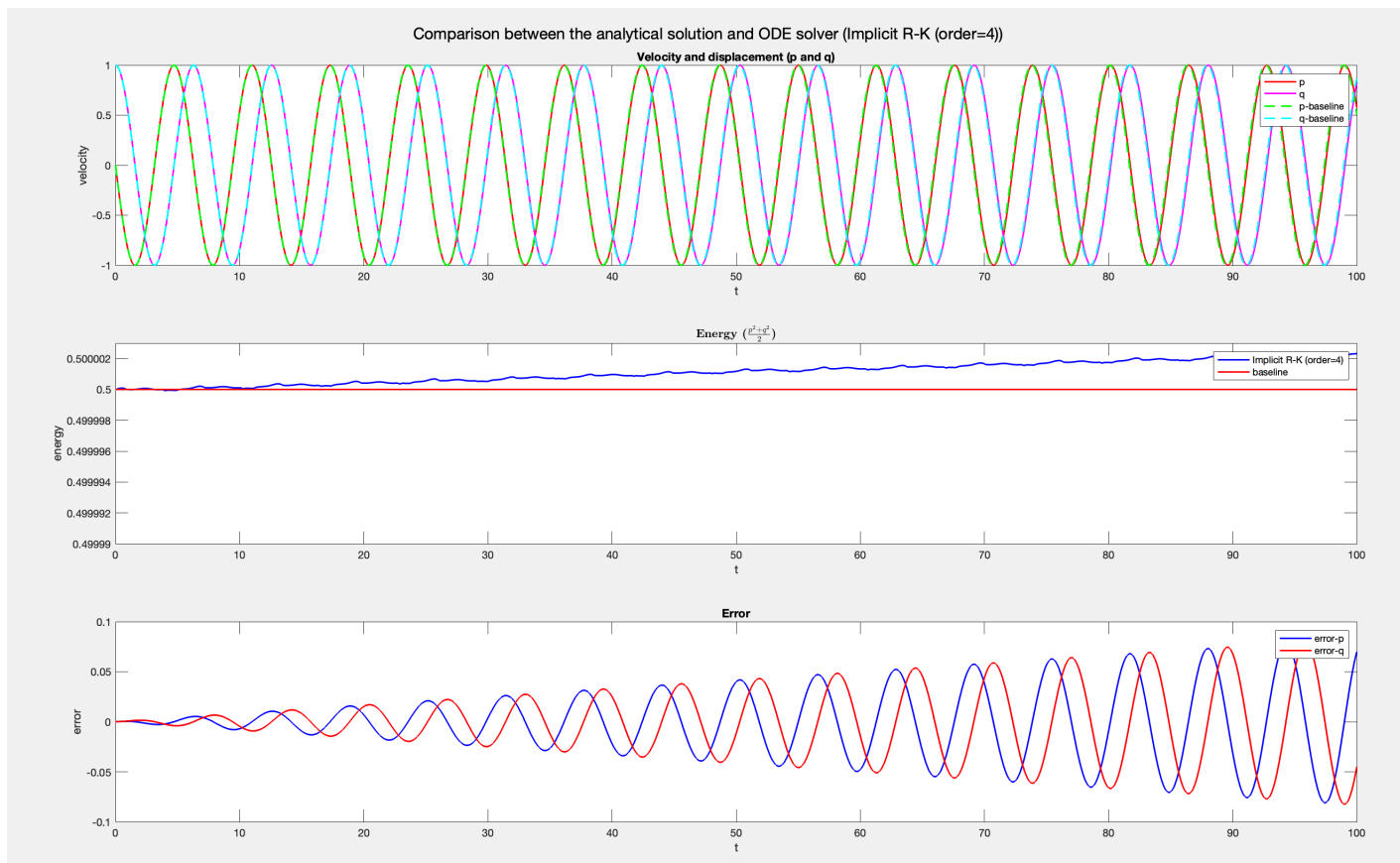


图 2: 隐式 4 阶 R-K 方法计算结果

传递，尽管我们证明了隐式方法具有 A-稳定格式，但误差仍然无法彻底消除。从守恒量变化的大致趋势来看，结合物理意义，因为运动规律的求解保持了较好的周期性，首先联想到的是阻尼和驱动力，通过对误差图像的观察，确实误差出现了周期性震荡的现象。对此我们也可以给出一个解释，从截断误差的表达式来看，截断误差基于 Taylor 展开得到，也就是说截断误差依赖于原函数求高阶导之后的导数值。而在本题中，我们的解函数本身是具有周期性的，显然它的各阶导数值都具有相同的周期性，相应的，我们获得的截断误差也应该具有同样的周期性。但是误差的振幅在逐渐增大，这与舍入误差的传递有关，结合守恒量的变化，我们可以做出这样的推测，误差在其中相当于起到了阻尼或者驱动力的作用，但是推断的正确性需要更复杂的计算才能确认。

总而言之，我们可以得到的是，在区间较小时，如果我们追求函数值本身的精度和运算速度，显式算法（ode45 也是显式，只是增加了校正部分）是个很好的选择；但是当我们需要数值稳定性的时候，隐式才是更为稳妥的选择。在实际计算中要分别对应需求和求解器的特征。

五、 结论

本实验通过比较经典四阶显式 Runge-Kutta 方法和四阶隐式 Runge-Kutta（辛算法）在求解常微分方程组上的表现，发现辛算法具有较好的守恒性质。尽管两种方法在计算精度上都能得到满意的解，但在守恒量演化方面，辛算法的稳定性明显更佳，这可能与它的绝对稳定性密切相关。这表明，在具有守恒性要求的问题中，我们应该更倾向于辛算法。但是由于辛算法需要求解隐式方程，计算量和速度明显处于劣势，因而我们要在选择时考虑精度和算力等多方面原因。我们在求解过程中发现了一些有趣的现

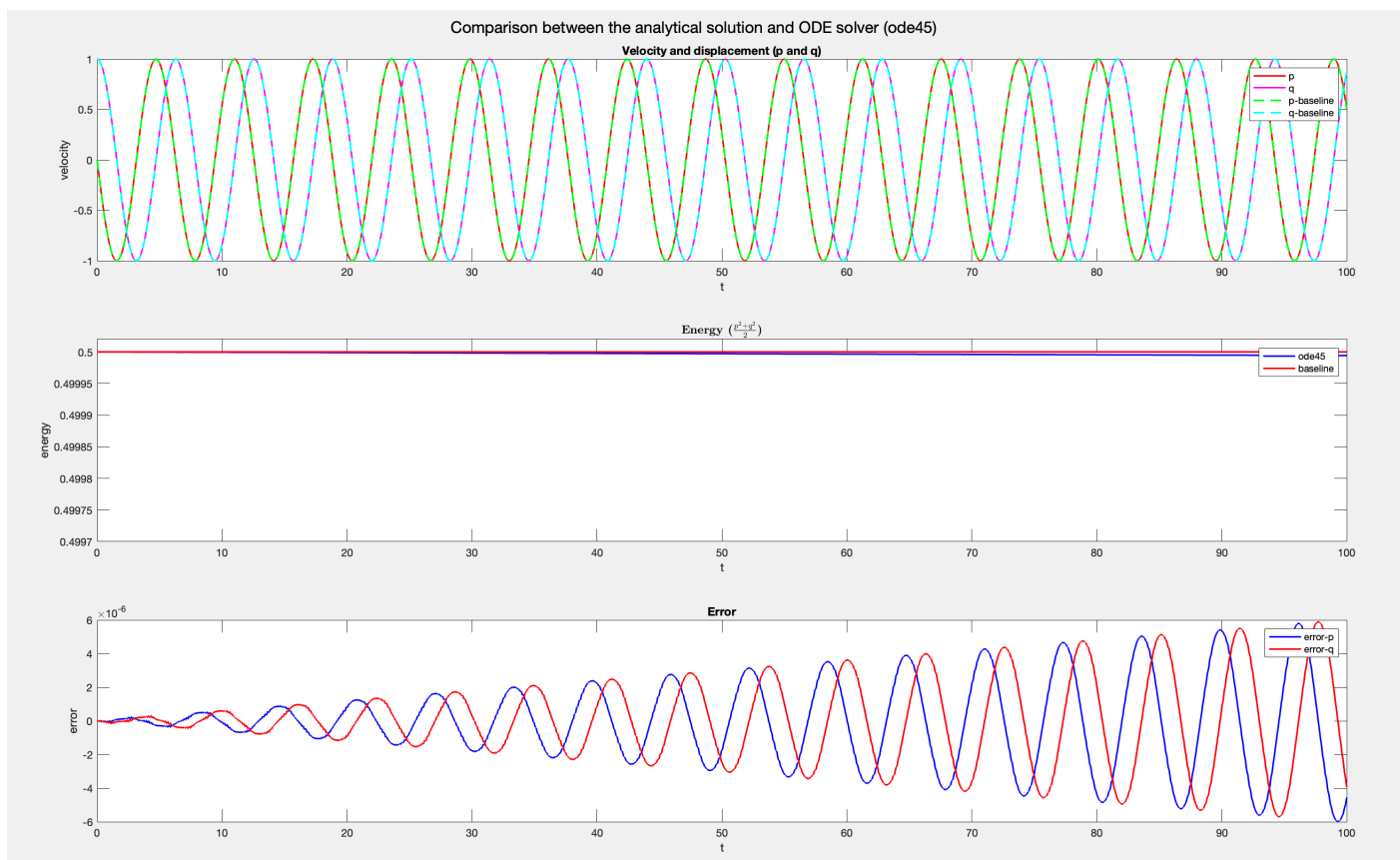


图 3: ode45 计算结果

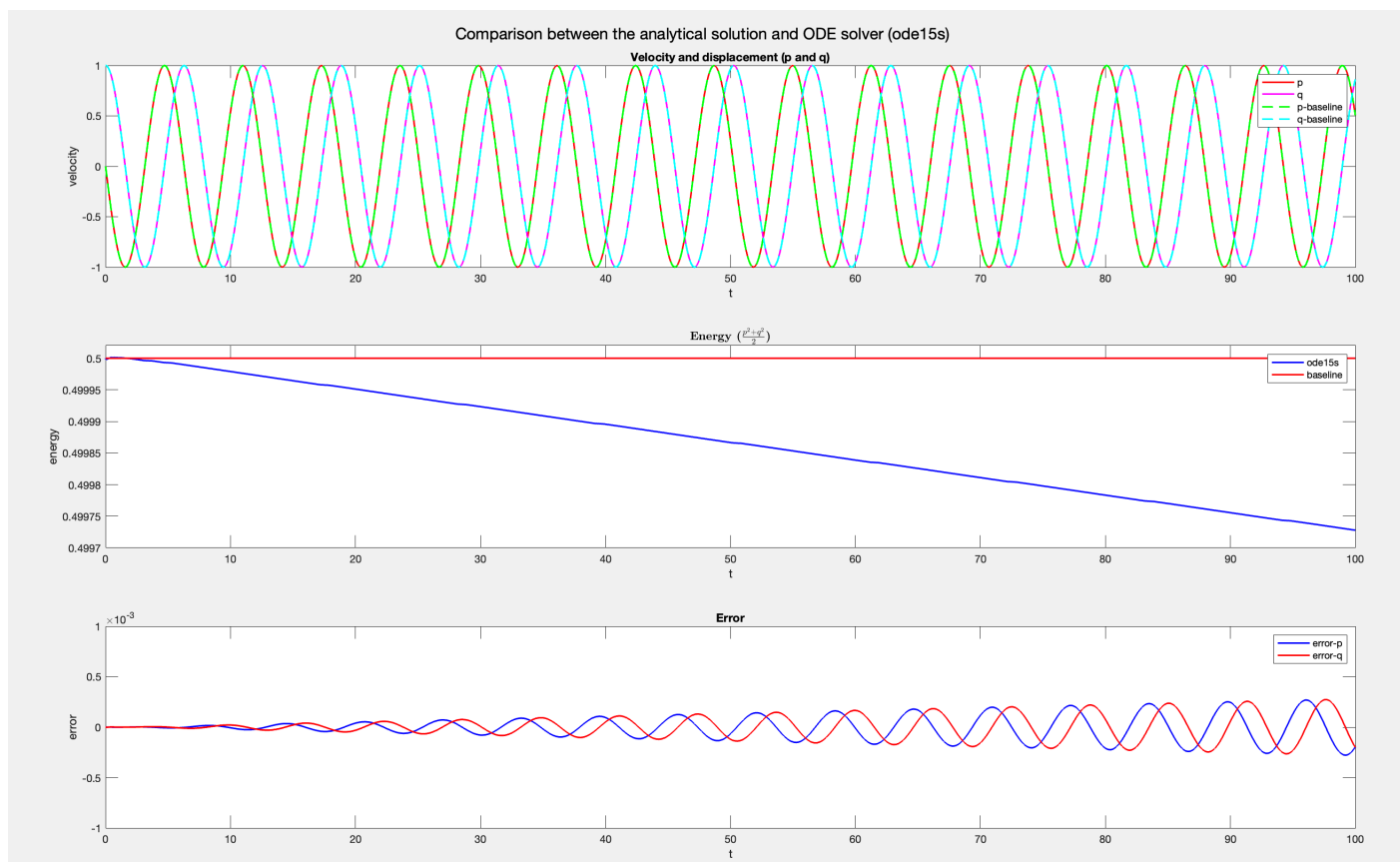


图 4: ode15s 计算结果

象，也发现了方程本身背后的物理含义，结合理论力学的运动理论给出了一些解释，但是背后存在的误差影响的规律以及误差扰动背后是否存在物理意义仍然有待进一步探究。