常微分方程的数值方法

Fuyang Tian

Institute for Applied Physics
School of Mathematics and Physics
University of Science and Technology Beijing

April 9, 2018

Outline

Outline

Outline

1. 相关概念
2. 初值问题
   - Euler折线法
   - Runge-Kutta方法
   - 微分方程组
   - 差分方法
   - 刚性微分方程
3. 边值问题
   - 边值问题的差分方法
   - 边值问题的打靶法

Outline

Outline

上节课

线性代数方程组的数值解法

1. 高斯消元法–缩减法
2. LU分解法
3. 三对角矩阵–追赶法
4. 迭代方法–刘徽割圆术

非线性方程(优化)的数值解法

1. 二分法–一尺之棰，日取其半，万世不竭;
2. 弦截法
3. 迭代法

非线性方程组的数值解法: 牛顿迭代法和最速下降法

矛盾方程组的数值解法：最小二乘法

多体运动问题

设有n个粒子在静电场或引力场中的运动，因而有$6n$个未知数x_i(坐标), v_i速度，$(i=1,2,\cdots,n)$。根据牛顿第二运动定律或库仑定律，应该满足$6n$个一阶常微分方程组：

$$\begin{aligned}\frac{dx_i}{dt} &= v_i, \quad i=1,2,\cdots,n \\ \frac{dv_i}{dt} &= \sum_{j=1}^{n}\frac{e_ie_j}{m_i}\cdot\frac{(x_i-x_j)}{|x_i-x_j|^3}\end{aligned}$$

其中m_i是第i个粒子的质量，e_i在静电场中是第i个粒子的电荷，在引力场中$e_i=m_i\sqrt{-G}$.

当$n=2$时，有解析解，$n\geq 3$时，找不到解析解.

人造卫星的运动规律

设卫星的运动坐标为$x=x(t),y=y(t)$,根据牛顿定律得

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= -\frac{\mu}{r^3}x\\ \ddot{y} &= -\frac{\mu}{r^3}y\end{aligned}$$

式中$r=\sqrt{x^2+y^2}$,μ为地球引力常数, $\mu=398603\mathrm{km}^3/\mathrm{s}^2$,引进极坐标$(r,\theta)$,

$$x=rcos\theta,\quad y=rsin\theta$$

经过系列变换后，设卫星近地点$(\theta=0)$的时刻为初始时刻，其解析表达式

continued

$$
\begin{aligned}
r &= \frac{P}{1+e\cos\theta} \\
t &= t(\theta) = \frac{P^{3/2}}{\mu^{1/2}}[\frac{2}{1-e^2}\arctan\frac{(1-e)\tan\frac{\theta}{2}}{(1-e^2)^{1/2}}] \\
&\quad +\frac{P^{3/2}}{\mu^{1/2}}\cdot\frac{2i\pi}{(1-e^2)^{3/2}} \\
&\quad (2i-1)\pi<\theta<(2i+1)\pi, i=0,1,2,\cdots
\end{aligned}
$$

P 和e是卫星的椭圆轨道参数。确定了r, t为θ的函数，理论上也就确定了r、θ为t的函数，也就得到了卫星运动的轨道方程。如我国第一颗人造卫星的近地点高度为$h_1 = 439$ km,远地点高度为$h_2 = 2384$ km,地球半径$R = 6371$ km,得P=7661 km 和e=0.12496.

原子结构的研究

应用薛定谔方程研究原子结构时，通常将原子核看成不动的，并将其固定在坐标原点，此时薛定谔方程为

$$-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi.$$

通常来说，只有当势场具有简单的形式时，上面的方程的解可以写成解析形式，其他就很难求出解析解。在单电子理论下可假设势场具有球对称形式

$$V = V(r),$$

此时可引进球面坐标$(r,\theta,\ \varphi)$,对波函数$\psi(r,\theta,\varphi)$进行分离变量：

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

Continued

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \frac{8\pi^2\mu}{h^2}[E - \frac{\beta}{r^2} - V(r)]R = 0 \tag{1}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta + \beta\Theta = 0 \tag{2}$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2\Phi \tag{3}$$

方程3的解为

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, m = 0, \pm1, \pm2, \cdots.$$

由$\Theta(\theta)$和$\Phi_m(\varphi)$构成实球谐函数$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$. 但径向薛定谔方程(1)的求解还是非常困难，只有在氢原子的情况下，核外只有一个电子，势场$V(r)$具有最简单的形式$V(r) = -\frac{e^2}{r}$.

定义

Define

微分方程：含有自变量、未知函数及其导数的方程.

Then

1. 未知函数只含有一个变量，称为常微分方程;
2. 未知函数只含有若干个变量，称为偏微分方程;

微分方程中未知函数的导数或偏导数的最高阶次称为微分方程的阶。

所有满足微分方程和定解条件的函数，都是微分方程的解；在n阶微分方程中，将微分方程含有n个任意常数的解称为该微分方程的通解。

为确定微分方程通解中的任意常数而需要的条件为定解条件：定解条件可以分为初始条件和边界条件两类。

由微分方程和定解条件一起构成的问题称为微分方程定解问题。

continued

一阶常微分方程的初值问题的一般形式为：

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = y'(x) = f(x,y), a \le x \le b \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

若定解条件描述了函数在至少两点(或边界)处的状态，则称为边值问题，如

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}x^2} = y''(x) = f(x,y,y'), a \le x \le b \\ y(a) = y_a, \quad y(b) = y_b \end{cases}$$

学习常微分方程的初值问题、边值问题、高阶微分方程等数值解法。
初值问题：其数值求解是要从初始点的函数值$y(x_0) = y_0$，求以后一系列点上的函数值。

Euler

求解微分方程的数值解，即计算得到在$N+1$个节点$\{t_k\}$,$k=0,1,\cdots,N$处微分方程解的近似值。
首先对初值问题：

$$\begin{cases} u'(t) & = & f(t,u) \quad a \leq x \leq b \\ u(a) & = & u_0 \end{cases}$$

的求解区间[a,b]进行划分，得到计算节点t_k,满足$a=t_0<t_1<\cdots<t_n=b$,通常将求解区间$[a,b]$均匀分成N等份，得到

$$t_k = a+kh, \quad k=0,1,2,\cdots,N, h=(b-a)/N$$

可分为三种不同的推导方法: 1. 差商近似方法，2. 积分近似方法，3. 泰勒展开方法。

泰勒展开方法

函数$u(a)$在节点$t_{k=1}$处的函数值$u(t_{k+1})$用在节点t_k处的Taylor展开近似表示为

$$
\begin{aligned}
u(t_{k+1}) &= u(t_k) + hu'(t_k) + \frac{1}{2}h^2u''(t_k) + \cdots \\
&\approx u(t_k) + hf(t_k) + \frac{1}{2}h^2f'(t_k) + \cdots
\end{aligned}
$$

取到泰勒展开的一阶项可以得到$u_{k+1} \approx u_k + hf(t_k, u_k)$.

差商近似方法

将初值问题在节点t_k处的导数$u'(t_k)$用向前差商或向后差商代替

$$u'(t_k) \approx \frac{u(t_{k+1}) - u(t_k)}{h}, \quad u'(t_{k+1}) \approx \frac{u(t_{k+1}) - u(t_k)}{h}$$

记$u_k \equiv u(t_k)$,则微分方程近似写成

$$u_{k+1} \approx u_k + hf(t_k, u_k), \quad u_{k+1} \approx u_k + hf(t_{k+1}, u_{k+1})$$

上式中，左边的式子是关于u_k的显式公式，由初始条件$u_0 = u(t_0)$出发，逐步计算得到$u_1, u_2, \cdots, u_N$，即只进行简单的迭代计算就可得到全部的解；右边的式子为隐式Euler公式，需要求解非线性方程或方程组。被称为单步法; 如果将节点t_k处的导数$u'(t_k)$用中心差商代替，

$$u'(t_k) \approx \frac{u(t_{k+1}) - u(t_{k-1})}{2h} \Rightarrow u_{k+1} \approx u_{k-1} + 2hf(t_k, u_k)$$

在计算u_{k+1}时，需要用到前两步结果u_{k-1}, u_k,称为两步法。

积分近似方法

如果将$u'(t)=f(t,u)$微分方程写成$du=f(t,u)dt$,在区间$[t_k,t_{k+1}]$上积分，有

$$u(t_{k+1})\approx u(t_k)+\int_{t_k}^{t_{k+1}}f(t,u)dt$$

用不同积分方法就可得到不同的递推公式。用梯形公式近似计算，得

$$u_{k+1}=u_k+\frac{h}{2}[f(t_k,u_k)+f(t_{k+1},u_{k+1})]$$

上式也称为改进折线法，其误差相当于$O(h^3)$，注意上式右端的$f(x_{i+1},y_{i+1})$中含有未知而待求的y_{i+1},不能直接求得y_{i+1},需要通过迭代来求解，即物理中称之的自洽求解，通常的自洽过程如下:

第k次的函数值$u_{i+1}^{(k)}$表示为

$$u_{i+1}^{(k)} = u_i + \frac{h}{2}[f(x_i, u_i) + f(x_i, u_{i+1}^{(k-1)})], k = 0, 1, 2, \cdots,$$

即在等式右端的u_{i+1}值采用前一次的$u_{i+1}^{(k-1)}$值，根据已知的$u_{i+1}^{(0)}$,可得出$u_{i+1}^{(1)}$,$\cdots$,直到$|u_{i+1}^{(k)} - u_{i+1}^{(k-1)}| < \varepsilon$,迭代结束。由于迭代法求解的计算量较大，可采用预测-校正方法，先用显式公式计算，得到预测作为隐式公式的迭代初值，然后用隐式公式迭代一次作为非线性方程的解。

$$\begin{cases} \bar{u}_{k+1} & \approx & u_k + hf(t_k, u_k) \\ u_{k+1} & = & u_k + \frac{h}{2}[f(t_k, u_k) + f(t_{k+1}, \bar{u}_{k+1})] \end{cases}$$

也可写为

$$u_{k+1} = u_k + \frac{h}{2}[f(t_k, u_k) + f(t_{k+1}, u_k + hf(t_k, u_k))].$$

Euler相关程序

自定义matlab 函数：

```
function[x p y]=euler-pc(f,x0,y0,xn,n)
h=(xn-x0)/n; x=x0:h:xn;
y(1)=y0; p(1)=y0;
for i=1:n
p(i+1)=y(i)+h*f(x(i),y(i));
y(i+1)=y(i)+h/2*(f(x(i),y(i))+f(x(i+1),p(i+1)));
end
```

Euler方法

是常微分方程初值问题数值解法中最简单的一种方法，其精度较低。求解初值问题的数值方法可以分为单步法和多步法。

1. 单步法：只利用t_k, u_k, h就可以计算u_{k+1};

$$u_{k+1} = u_k + h\phi(t_k, u_k, h)$$

只要一个初值u_0就可以启动递推计算；

2. 多步法：递推计算需要用$u_k, u_{k-1}, \cdots, u_{k-s+1}$的线性组合来计算$u_{k+1}$;

$$u_{k+1} = \sum_{i=0}^{r} \alpha_i u_{k-i} + h \sum_{j=0} r\beta_j f_{k-j}$$

需要$r+1$个初值$u_0, u_1, \cdots, u_r$,才能开始递推计算。

截断误差估计

精确解$u(x_i)$与截去高阶项后近似值u_i之间的误差，

1. Euler折线法：$O(h^2)$
2. Euler改进折线法：$O(h^3)$
3. 预测-校正法：$O(h^3)$.

例题1： 描述指数衰减问题的微分方程

$$\frac{dy}{dt} = -\lambda y$$

λ是衰减常数，取$t = 0, y(0) = 1, \lambda = 1$，求$t$在[0,8]区间的衰减函数曲线。要求，采用简单的显式Euler方法。

例2：解初值问题$y' = y - 2x/y, y(0) = 1$

Runge-Kutta方法

利用泰勒展开式构造高阶单步方法，如将$u(t_{k+1})$在t_k处作泰勒展开

$$u(t_{k+1}) = u(t_k) + hu'(t_k) + \frac{1}{2!}h^2u''(t_k) + \cdots + \frac{h^q}{q!}(t_k) + O(h^{q+1})$$

由于$u(t)$满足微分方程，因此它的各阶导数$u^j(t)$可以通过函数$f(t, u(t))$对t进行$j-1$次复合求导获得。将上式中的余项$O(h^{q+1})$舍去，就得到q阶单步方法。
数值微分是用邻近一些点上的函数值近似表示函数在一个点的各阶导数。用$f(t, u(t))$在一些特殊点上函数值的线性组合来表示泰勒展开中某点的各阶导数，N级PK方法的一般形式为

$$u_{k+1} = u_k + h\sum_{i=1}^{N} c_i k_i$$

其中

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_k, u_k) \\ k_i &= f(t_k + a_i h, u_k + h\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}k_j) \end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^{N} c_i = 1, \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} = a_i$$

将近似公式和$u(t_{k+1})$在t_k处的泰勒展开式相比较，确定系数，使近似公式具有尽可能高的收敛阶数。如果局部截断误差$R_{k+1} = O(h^{p+1})$,称为N级p阶的PK方法.

对于二阶PK方法，取

$$u_{i+1} = u_i + h(ak_1 + bk_2), k_1 = f(t_i, u_i), k_2 = f(t_i + \alpha h, u_i + h\beta k_1)$$

由u_{i+1}在t_i的泰勒展开

$$u_{i+1} = u_i + hf(t_i, u_i) + \frac{h^2}{2} f'(t_i, u_i) + \cdots$$

由$f' = f_t + f_u f$,上式变为

$$u_{k+1} = u_i + hf(t_i, u_i) + h^2(\frac{1}{2} f_t + \frac{1}{2} f_u f)_i$$

$$u_{i+1} = u_i + ahf(t_i, u_i) + bhf(t_i + \alpha h, u_i + \beta hf(t_i, u_i))$$

$$f(t_i + \alpha h, u_i + \beta hf(t_i, u_i)) \approx (f + f_t \alpha h + f_u \beta hf)_i$$

得$a + b = 1, \alpha b = \beta b = 1/2$,
如果取$a = 0, b = 1, \alpha = \beta = 1$,给出一种二阶PK公式，可得到修正的Euler公式：

$$u_{i+1} = u_i + \frac{1}{2} h(k_1 + k_2), \quad k_1 = f(t_i, u_i), k_2 = f(t_i + h, u_i + hk_1)$$

如果取$a=0, b=1, \alpha=\beta=1/2$,给出中点二阶PK公式,

$$u_{i+1}=u_i+hk_2,\quad k_1=f(t_i,u_i),\quad k_2=f(t_i+h/2,u_i+hk_1)$$

直接给出最常用的四级四阶PK公式

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_i,u_i)\\ k_2 &= f(t_i+h/2,u_i+hk_1/2)\\ k_3 &= f(t_i+h/2,u_i+hk_2/2)\\ k_4 &= f(t_i+h,u_i+hk_3)\\ u_{i+1} &= u_i+h(k_1+2k_2+2k_3+k_4)/6 \end{aligned}$$

```
function y=rk4(f,a,b,ya,n)
h=(b-a)/n;x=a:h:b; y(1)=ya;
for i=1:n
k1=h*feval(f,x(i),y(i)); k2 = ···; k3; k4;
y(i + 1)=y(i)+(k1+2*k2+2*k3+k4)/6;
end
```

Adams方法

阿达姆斯方法为多步法求解常微分方程的一种，对常微分方程初值问题：

$$\begin{cases} u'(t) & = & f(t,u) \\ u(a) & = & u_0 \end{cases}$$

设其解为$u=u(x)$，对所给微分方程两端求积分，从x_i积分到x_{i+1}，得到等价的积分方程

$$u(x_{i+1}) = u(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,u(x))dx$$

采用插值多项式$F(x)$代替上式右端的被积函数$f(x,u(x))$，插值点为$x_{i-2},x_{i-1},x_i,x_{i+1}$,在求$u_{i+1}$时，$u_{i-2},u_{i-1},u_i$均为已知，则有插值多项式$F(x)$

$$
\begin{aligned}
F(x) &= \frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-2}-x_{i-1})(x_{i-2}-x_i)(x_{i-2}-x_{i+1})}\cdot f(x_{i-2},u(x_{i-2}))\\
&+\frac{(x-x_{i-2})(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_{i-2})(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})}\cdot f(x_{i-1},u(x_{i-1}))\\
&+\frac{(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-2})(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})}\cdot f(x_i,u(x_i))\\
&+\frac{(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-2})(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)}\cdot f(x_{i+1},u(x_{i+1}))
\end{aligned}
$$

对$F(x)$,作变换$x=x_i+th$，且$x_{i+1}-x_i=h$, $x_i-x_{i-1}=h$,

$$
\begin{aligned}
u(x_{i+1}) &= u(x_i)+\frac{h}{6}f(x_{i+1},u(x_{i+1}))\int_0^1 t(t+1)(t+2)dt\\
&-\frac{h}{2}f(x_i,u(x_i))\int_0^1 (t-1)(t+1)(t+2)dt\\
&+\frac{h}{2}f(x_{i-1},u(x_{i-1}))\int_0^1 (t-1)t(t+2)dt\\
&-\frac{h}{6}f(x_{i-2},u(x_{i-2}))\int_0^1 (t-1)t(t+1)dt
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
u(x_{i+1}) &= u(u_i) + \frac{h}{24}\{9f(x_{i+1}, u(x_{i+1})) + 19f(x_i, u(x_i))\} \\
&\quad + \frac{h}{24}\{-5f(x_{i-1}, u(x_{i-1})) + f(x_{i-2}, u(x_{i-2}))
\end{aligned}
$$

用u_i代替$u(x_i)$, f_i代替$f(x_i, u(x_i))$, 余类推，得

$$
u_{i+1} = u_i + \frac{h}{24}(9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}),
$$

上式称为Adams隐式公式，等式右端含有需求解的u_{i+1}值。根据“预测-校正法”，可选择Adams显式公式作为预估式，隐式公式作为校正式，构成预测-校正格式，计算首次估值后，接着进行迭代计算。Adams方法有四阶精度，与Runge-Kutta法有相同精度，但Adams方法易于计算第一步的误差，且Adams收敛比Runge-Kutta法快两倍。

常微分方程组

一阶n维常微分方程组初值问题描述为

$$\frac{dy_i}{dx} = f_i(x, y_1, y_2, \cdots, y_n), y_i(x_0) = y_{i0}, i = 1, 2, \cdots, n$$

若把其中的未知函数，方程右端和初值表示成矩阵形式

$$Y = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^T, \quad F = (f_1, f_2, \cdots, f_n)^T$$

$$Y(x_0) = Y_0 = (y_{10}, y_{20}, \cdots, y_{n0})^T$$

则方程组可表示成

$$\frac{dY}{dx} = F(x, Y), Y(x_0) = Y_0.$$

这种写法与单变量微分方程的初值问题类似，其数值解法也一样。

初值问题的差分方法

高阶微分方程可以通过降阶的方法化为一阶微分方程组。也可以通过差分的方法直接求解。如采用差分方法求解1/2阶贝赛尔方程

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2}+x\frac{dy}{dx}+(x^2-\frac{1}{4})y=0, y(0)=0, y'(0)=1$$

解：取步长$\Delta x=(x_b-x_a)/(n-1)$, $x_i=x_a+(i-1)\Delta x$, $i=1,\cdots,n$.
微分方程的差分形式为：

$$x_i^2\frac{y_{i+1}-2y_i+y_{i-1}}{(\Delta x)^2}+x_i\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2\Delta x}+(x_i^2-\frac{1}{4})y_i=0, i=2,\cdots,n-1$$

由$y(x_a)=0\Rightarrow y_1=0$, $y'(x_a)=1=(y_2-y_1)/\Delta x\Rightarrow y_2=\Delta x$,差分方程可整理为

$$\begin{aligned}(x_i^2+\frac{1}{2}\Delta x x_i)y_{i+1}) &= (2x_i^2-(\Delta x)^2x_i^2+\frac{1}{4}(\Delta x)^2)y_i\\ &\quad +(\frac{1}{2}\Delta x x_i-x_i^2)y_{i-1}, i=2,\cdots,n-1\end{aligned}$$

刚性微分方程组

由于一些物理问题的时间尺度相差很大，描写的运动方程通常是刚性微分方程组。

$$\begin{cases} x' &= 998x + 1998y \\ y' &= -999x - 1999y \\ x(0) &= 1, y(0) = 0 \end{cases}$$

其解析解是

$$\begin{cases} x(t) &= 2e^{-t} - e^{-1000t} \\ y(t) &= -e^{-t} + e^{-1000t} \end{cases}$$

解中的e^{-1000t}为快变分量，e^{-t}为慢变分量。在计算数值方法求解刚性微分方程组时，计算步长是由快变分量决定的，而计算的步数则是由慢变分量和步长共同确定的，需要用很小的步长来计算很长的区间。快变分量很快趋于0，影响范围很小；但是在数值方法中，快变分量的存在对求解带来了很大的困难。

将刚性微分方程组定义为常系数线性微分方程组

$$\frac{dY}{dt} = AY + B$$

如果系数矩阵A的特征值的实部$\mathrm{Re}(\lambda_i) < 0$, $i = 1, 2, \cdots, n$,且刚性比s定义为$s = \frac{\max|Re(\lambda_i)|}{\min|Re(\lambda_i)|} \gg 1$. 当刚性比大于10时，可以认为微分方程组是刚性的，求解刚性微分方程组的数值方法一般采用高阶单步法和线性多步法。常用的是Gear方法,

$$y_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} a_j y_{n+j} + h\beta_k f_{n+k}$$

$k = 2, 3$时的Gear公式为：

$$\begin{aligned} y_{n+2} &= \frac{1}{3}(4y_{n+1} - y_n + 2hf_{n+2}) \\ y_{n+3} &= \frac{1}{11}(18y_{n+2} - 9y_{n+1} + 2y_n + 6hf_{n+3}) \end{aligned}$$

Numerov方法

前面的方法是利用第i个点的函数值来求第$i+1$个节点的函数值。而Numerov方法采用前面2个节点上的函数求下一个节点上的函数值,

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{8\pi^2\mu}{h^2}[E-\frac{\beta}{r^2}-V(r)]R=0 \quad (4)$$

$$\frac{1}{\sin\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta})-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta+\beta\Theta=0 \quad (5)$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}=-m^2\Phi \quad (6)$$

对于方程4,引进变换

$$y(r)=rR(r),$$

方程4变换为(Numerov方法针对此类型的二阶常微分方程)

$$\frac{d^2y}{dr^2}=\frac{l(l+1)}{r^2}y+(V(r)-E)y$$

设在[a,b]区间上考虑二阶方程

$$\frac{d^2y}{dx^2} = F(x)y + G(x)$$

的数值解，$F(x)$和$G(x)$是已知函数，以h为步长划分区间[a,b],$x_i = a + ih$ $(i = 0, 1, 2, \cdots)$,记$y_i = y(x_i)$，由泰勒展开式

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y(x_i + h) = y_i + hy_i' + \frac{h^2}{2!}y_i'' + \frac{h^3}{3!}y_i^{(3)} + \frac{h^4}{4!}y_i^{(4)} + O(h^5) \\ y_{i-1} &= y(x_i - h) = y_i - hy_i' + \frac{h^2}{2!}y_i'' - \frac{h^3}{3!}y_i^{(3)} + \frac{h^4}{4!}y_i^{(4)} - O(h^5) \end{aligned}$$

上两式相加

$$y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} = h^2(y_i'' + \frac{h^2}{12}y_i^{(4)}) + O(h^6)$$

令$\delta^2 y_i = y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}$,它是$y$的二阶中心差商，上式可为

$$\delta^2 y_i = h^2(y_i'' + \frac{1}{12}h^2 y_i^{(4)}) + O(h^6)$$

类似，关于二阶导数y''的二阶中心差商$\delta^2 y''$有类似的关系式

$$\delta^2 y_i'' = h^2(y_i^{(4)} + \frac{1}{12}h^2 y_i^{(6)}) + O(h^6)$$

可得

$$\delta^2 y_i = h^2(y_i'' + \frac{1}{12}\delta^2 y_i'') + O(h^6) \qquad (7)$$

因为$y(x)$是方程的解，可得

$$\delta^2 y_i'' = \delta^2(F(x_i)y_i + G(x_i))$$

记$F_i = F(x_i), G_i = G(x_i)$，将上式代入Eqn 7,并略去截断误差$O(h^6)$,得

$$\delta^2 y_i = h^2\{F_i y_i + G_i + \frac{1}{12}\delta^2(F_i y_i + G_i)\}$$

将二阶中心差商式代入得

$$\begin{aligned}(1-\frac{h^2}{12}F_{i+1})y_{i+1} &- 2(1-\frac{h^2}{12}F_i)y_i+(1-\frac{h^2}{12}F_{i-1})y_{i-1}\\ &= h^2(F_iy_i+G_i+\frac{1}{12}\delta^2G_i)\end{aligned}$$

若引进变换

$$Y=(1-\frac{h^2}{12}F)y$$

得

$$Y_{i+1}-2Y_i+Y_{i-1}=h^2[\frac{F_i}{(1-\frac{h^2}{12}F_i)}Y_i+G_i+\frac{1}{12}\delta^2G_i]$$

此为Numerov格式，为二步法，有时也称为三点循环公式，即知道前两个节点的函数值，可利用上二式求出下一个节点上的函数值。

差分方法

两点边值问题的微分方程的一般形式是

$$y''(x) = f(x, y, y')$$

$$\begin{cases} \alpha_0 y(a) & + & \beta_0 y'(a) & = & r_0 \\ \alpha_1 y(b) & + & \beta_1 y'(b) & = & r_1 \end{cases}$$

$\beta_0 = \beta_1 = 0$是第一类边界条件，$\alpha_0 = \alpha_1 = 0$是第二类边界条件。其它情况是第三类混合边界条件。

对于有限差分方法，首先在区间$[a,b]$离散化微分方程，将区间$[a, b]$分成$n-1$个相等的小区间,取

$$h = (b-a)/(n-1), x_i = a + (i-1)h, i = 1, \cdots, n$$

称x_i为节点，用中心差商公式代替微分方程在节点x_i的一阶和二阶微商

$$y''(x_i) = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}, \quad y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$$

$$\frac{y_{i+1}-2y_i+y_{i-1}}{h^2}=f(x_i,y_i,\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2h}),i=2,\cdots,n-1.$$

再加上两个边界条件方程，得到n个变量n维代数方程组，进而利用求解线性或非线性方程组的解法进行求解。如

$$\left\{\begin{array}{ccccccc} u(x)y'' & + & v(x)y' & + & w(x)y & = & f(x) \\ y(a) & = & \alpha & & y(b) & = & \beta \end{array}\right.$$

进而得

$$\left\{\begin{array}{cccccccc} a_iy_{i-1} & + & b_iy_i & + & c_iy_i & = & d_i & i=2,3,\cdots,n-1 \\ y_1 & = & \alpha & & y_n & = & \beta & \end{array}\right.$$

其中$a_i=u(x_i)-\frac{h}{2}v(x_i)$,
$b_i=h^2w(x_i)-2u(x_i)$,$c_i=u(x_i)+\frac{h}{2}v(x_i)$, $d_i=h^2f(x_i)$.

矩阵表示

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}$$

其中$b_1 = 1, c_1 = 0, d_1 = \alpha, a_n = 0, b_n = 1, d_n = \beta$，三对角矩阵方程组，可采用追赶求解。

```
function [a,b,c,d] = bvp1-tri(u,v,w,f,x1,xn,y1,yn,n)
h = (xn-x1)/(n-1); x = x1:h:xn;
a = u(x)-0.5*h*v(x); b = h*h*w(x)-2*u(x);
c = u(x)+0.5*h*v(x); d = h*h*f(x);
a(1)=0;b(1)=1;c(1)=0;d(1)=y1;
a(n)=0;b(n)=1;c(n)=0;d(n)=yn;
y = tri(a,b,c,d)
plot(x,y);
end
```

Examples

1. 设二阶微分方程边值问题为

$$-y'' + \frac{2}{x^2}y = \frac{1}{x}, \quad y(2) = 0, y(3) = 0$$

求解区间[2,3],取步长$h = 0.1$

2. 求解二阶微分方程组边值问题

$$\begin{aligned} y''(x) + 9y(x) &= x \\ y(0) = 0, y'(2) &= 0 \end{aligned}$$

打靶法

将微分方程的边值问题化为初值问题，考虑第一边界条件, $y(a)=\alpha$, $y(b)=\beta$,需要先猜测给定边界$x=a$点的一阶导数$y'(a)=m_1$,问题变为

$$y''(x)=f(x,y,y'),\ y(a)=\alpha,\ y'(a)=m_1$$

用初值问题求解上式得到一个解$y_1(x)$,如果$|y_1(b)-\beta|<\varepsilon$,则认为$y_1(x)$即为所求，否则，取$m_2=m_1\beta/y_1(b)$，再解初值问题

$$y''(x)=f(x,y,y'),\quad y(a)=\alpha,\quad y'(a)=m_2.$$

又可求得$y_2(x)$,然后判断$|y_2(b)-\beta|<\varepsilon$满足与否，直到得到满足要求的解为止。如果仍不满足精度，取$m_3=m_2\beta/y_2(b)$;从m_3开始，可以采用割线法.

$$\frac{m_3 - m_2}{\beta - y_2(b)} = \frac{m_2 - m_1}{y_2(b) - y_1(b)}$$

得

$$m_3 = m_2 + \frac{[\beta - y_2(b)](m_2 - m_1)}{y_2(b) - y_1(b)}$$

一般情况

$$m_{n+1} = m_n + \frac{m_n - m_{n-1}}{y_n(b) - y_{n-1}(b)}[\beta - y_n(b)], \quad n \geq 2$$

- 量子力学中描述一维无限深势阱的微分方程为

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -k^2\phi, \quad \phi(0) = \phi(1) = 0$$

用打靶法求解本征值λ和本征函数ϕ。

常微分方程的本征值问题

如果二阶常微分方程的右端量与函数y成正比且在区间$[a,b]$上的边界条件为零，则为微分方程的本征值问题，数学描述为

$$\frac{d^2y}{dx^2}+p(x)\frac{dy}{dx}+q(x)y=\lambda y$$
$$y(a)=0,\quad y(b)=0$$

求方程的非零解，即求方程的本征值λ和本征函数，应用差分法离散化后，得

$$(\frac{1}{h^2}-\frac{1}{2h}p_i)y_{i-1}-(\frac{2}{h^2}-q_i)y_i+(\frac{1}{h^2}+\frac{1}{2h}p_i)y_{i+1}=\lambda y_i$$
$$y+0=0,\quad y_n=0$$
$$1\le i\le n-1$$

在本征值问题下，方程化为齐次代数方程组，为使方程有解，需使方程组的系数矩阵行列式为零。

系数矩阵

$$\begin{pmatrix} -(\frac{2}{h^2}-q_1)-\lambda & \frac{1}{h^2}+\frac{1}{2h}p_i & & \\ \frac{1}{h^2}-\frac{1}{2h}p_2 & -(\frac{2}{h^2}-q_2)-\lambda & \frac{1}{h^2}+\frac{1}{2h}p_2 & \\ & & \ddots & \\ & \frac{1}{h^2}-\frac{1}{2h}p_{n-1} & -(\frac{2}{h^2}-q_{n-1})-\lambda & \end{pmatrix} = 0$$

常微分方程的本征函数问题与矩阵的本征值问题是相同的.

固体电子结构计算

1.对于完整的晶体结构，由于原子排列的周期性，能带理论的计算已经发现的比较完善，如利用原子轨道的Bloch波为基的紧束缚方法(LCAO方法),如果原子轨道为高斯型函数时，又称为LCGO方法。

2.由于计算量太大，又出现了从头计算和经验的紧束缚方法(采用已知的实验值来拟合一些参数，在复杂问题处理中，非常有效)。

3.在固体电子结构计算中，还可采用以平面波为基的方法，利用傅立叶展开的方法，并在些基础上发展起来的有正交化平面波(OPW)方法和赝势法，及自洽赝势方法。

4.在对势场作Muffin-tin近似下导出的增强平面波(APW)方法和利用格林函数的KKR(Korrinaga, Kohn, Rostoker)方法，由于久期方法是非线性，在采用线性化久期矩阵方法后，发展了线性化增强平面波(LAPW)方法以及全势场线性化增强平面波(FLAPW)方法。

Matlab解微分方程

几个专门求解常微分方程的函数,如ode23,ode45,ode23s等，其调用形式为(以函数ode45为例) [T,Y]=ode45('F',tspan, y0, options, p1, p2, $\cdots$)

1. F表示微分方程函数
2. 函数默认的变量为t,
3. tspan表示求解区间或范围
4. y0表示微分方程的初始向量
5. options为积分参数设置
6. p1,p2, $\cdots$为传递参数，可以直接输入函数中。

调用结束后，输出变量t和函数在给定点处的值。

IMSL程序库解微分方程

求解微分方程组的解析解，

1. 调用符号计算工具箱(Symbolic Toolbox)中的函数dsolve,其调用方式为$R = \mathrm{dsolve}('\mathrm{eql}, \mathrm{eq2}, \cdots', 'condl, cond2', \cdots, 'v')$
2. 偏微分方程工具箱(Partial Differential Equations Toolbox),采用了限元方法求解微方程;

IMSL程序库中，有一个求解微分方程的Differential Equations子程序库，将微分方程问题分成不同的类型，包括常微分方程的初值问题、常微分方程的边值问题、偏微分方程和微分代数方程等.

程序	说明
IVPRK	五阶或六解PK方法解常微分方程组初值问题
IVPRG	Adams-Moulton或Gear方法解常微分方程组初值问题
BVPFD	带校正的变阶次变步长有限差分方法解两点边值问题
BVPMS	多点打靶法解两点边值问题
DASPG	Petzold-Gear后几向差分格式解微分代数系统
MOLCH	线上法解偏微分方程系统并用Hermite多项式表示结果

Examples

1. 求解弱肉强食模型：设种群甲(弱者)靠丰富的自然资源生长，种群乙(强者)靠捕食甲为生。设甲和乙在时刻t的数量分别为$x(t)$和$y(t)$，当甲独立生存时，相对增长率为r (dx/dt=rx),而乙的存在使甲的增长率降低，设降低的程度与乙的数量成正比，比例常数为a; 乙离开甲无法生存，乙独立生存时，它的相对死亡率为c (dy/dt=-cy),甲为乙提供食物使死亡率降低并促使其增长，而乙的增长与本身数量及甲的数量成正比，比例常数为b.
2. 洛伦兹吸引子：洛伦兹吸引子是MIT数学家和气象学家在1963年提出，为地球大气的流体模型。该模型中涉及的微分方程。

作业

1. 使用'折线法'及'预测-校正法'求解理想单摆的运动方程，并画出相应的轨迹及能量随时间的变化，为方便处理，方程简化为
$$\frac{d^2y}{dt^2} = -Ay$$
2. 微分方程
$$u''(x) + q(x)y(x) = x, 0 < x < 1, u(0) = u(1) = 0;$$
$q(x) = 2$, when $x < 0.5$; $q(x) = 1$, when $x > 0.5$
取$h = 1/4, x_i = jh, j = 0, 1, 2, 3, 4$，用差分方法求$u_1, u_2, u_3$.
3. 利用打靶法求解二阶微分方程
$$u'' = -\pi^2(u + 1)/4, u(0) = 0, u(1) = 1.$$