Ch3 常微分方程数值解

ODE数值解：函数在一些节点上近似值，通常想形成解表格：

x_0	x_1	$\cdots$	x_m
y_0	y_1	$\cdots$	y_m

初值问题：$\begin{cases} y' = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$　　理论基础：解的∃1性定理.

一般求解步骤：1. 区间分割（常用等距）　2. 微分方程 → 差分方程（注：考虑解∃1性，稳定性）

3. 求解差分方程，求出格点函数（解 $y(x)$ 在 x_i 处近似值 y_i）

对于数值解实用价值的评估：收敛性（h 充分小时，是否逼近真解）；误差估计（局部截断误差，整体一）；稳定性（初始误差是否会无限放大）

① 单步法

· Euler 向前（等距分割）：$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n)$　（Euler 向后：$y_{n+1} = y_n + h f(x_{n+1}, y_{n+1})$）

隐格式，一般 y_{n+1} 需要迭代求解
$y_{n+1}^{(0)} = y_n + h f(x_n, y_n)$
$y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + h f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)})$
直至 $|y_{n+1}^{(k+1)} - y_{n+1}^{(k)}| < \varepsilon$

误差分析：局部截断误差（在第 i 步准确假设下，求 $R_i = y(x_{i+1}) - y_{i+1}$）$R_i = \frac{h^2}{2} y''(\xi_i) \doteq h T_{i+1} = O(h^2)$

整体截断误差：$e_{n+1} = |y(x_{n+1}) - y_{n+1}| \leq |y(x_n) - y_n| + \underbrace{h|f(x_n, y(x_n)) - f(x_n, y_n)|}_{\leq hL|y(x_n) - y_n|,\ L:\ \text{Lipschitz 常数}} + h|T_{n+1}| \leq (1+hL)|e_n| + h|T_{n+1}|$

$\leq \cdots \leq \frac{|T|(1+hL)^{n+1}}{L} \leq e^{(n+1)hL} \cdot \frac{|T|}{L} = O(h)$　$(\because |T| = O(h))$.

（定值：假定求左端点为 a，则 $nh = a - x_0$）

稳定性：设 $\{z_i\}$ 初值带误差，计算中不含误差．$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n) \\ z_{n+1} = z_n + h f(x_n, z_n) \end{cases}$

可知 $|e_{n+1}| \leq (1+hL)|e_n| \leq (1+hL)^{n+1}|e_0| \leq e^{(n+1)hL}|e_0|$

（∴ $|e_0|$ 不会无限放大故稳定）

注：基于数值积分也是一种给出差分方程的思路．对 $\frac{dy}{dx} = f(x,y)$ 在 $x_n \sim x_{n+1}$ 上积分

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

如果 $y'(x) \approx y'(x_n) \rightarrow$ Euler 向前．如果 $y'(x) \approx y'(x_{n+1}) \rightarrow$ Euler 向后．

考虑梯形公式：$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)\,dx \approx \frac{x_{n+1} - x_n}{2}(y'(x_n) + y'(x_{n+1})) = \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})) \Rightarrow y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}))$

注：1° 此时局截：$-\frac{h^3}{12} f''(\xi) = O(h^3)$（注：误差源于梯形积分）

整截：$O(h^2)$.

2° 隐格式需迭代求解

· Taylor 方法： 根据 Taylor 展开： $y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \cdots$

$y'(x) = f(x,y)$， $y''(x) = f_x + f_y f$， $y'''(x) = \cdots$ $\Rightarrow$ e.g. 2阶格式： $y_{n+1} = y_n + hf(x_n,y_n) + \frac{h^2}{2}(f_x(x_n,y_n) + ff_y(x_n,y_n))$

我们可以自行先求出 $y', y'', \cdots y^{(k)}$ (k阶方法) $\to$ $y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \cdots + \frac{h^k}{k!}y^{(k)}(x_n)$.

· Runge-Kutta 方法：基于 Taylor 展开，通过适当组合形成不含 f_x, f_y 的高阶公式（无需事先对 y', y'' 分析）

e.g. 对 $y_{n+1} = y_n + hf + \frac{h^2}{2}(f_x + ff_y)$. 利用 $f(x+h, y+fh) \xrightarrow{\text{二元微分}} f(x,y) + h(f_x + ff_y) + O(h^2)$.

$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}hf + \frac{1}{2}h(\overbrace{\boxed{f + h(f_x + ff_y)}}^{f(x+h,\,y+fh)\,+\,O(h^2)} \cancel{+O(h^2)}) = y_n + \frac{h}{2}f + \frac{h}{2}f(x+h, y+fh) + O(h^3)$

二阶 Runge-Kutta 方法： $y(x+h) = y(x) + \frac{1}{2}(F_1 + F_2)$， $\begin{cases} F_1 = hf(x,y) \\ F_2 = hf(x+h, y+F_1) \end{cases}$

更一般的，p阶 Runge-Kutta方法形式： $y(x+h) = y(x) + c_1K_1 + \cdots + c_pK_p$， $\begin{cases} K_1 = hf(x,y) \\ K_2 = hf(x+a_2h, y+b_{21}K_1) \\ \vdots \\ K_p = hf(x+a_ph, y+b_{p1}K_1 + \cdots b_{p,p-1}K_{p-1}) \end{cases}$

（推导公式：根据阶数对左、右端展开，比较系数，将以上系数求解）

经典四阶 Runge-Kutta 方法： $y(x+h) = y(x) + \frac{1}{4}(F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4)$， $\begin{cases} F_1 = hf(x,y) \\ F_2 = hf(x+\frac{h}{2}, y+\frac{F_1}{2}) \\ F_3 = hf(x+\frac{h}{2}, y+\frac{F_2}{2}) \\ F_4 = hf(x+h, y+F_3) \end{cases}$

自适应 Runge-Kutta 方法 (RKF)： 根据估计误差自行调整步长，直至目标端点

e.g. RKF54 $\begin{cases} \text{5阶R-K：求值} \\ \text{4阶R-K：估计误差} \end{cases}$

步骤（循环，直至离右端充分近时结束）(1) 6次函数求值 F_1 —— F_6 (2) 5阶、4阶公式分别算 (3) err 用5阶(真实) − 4阶(近似)估计 (4) 更新节点位置与函数值(5阶) 根据 err 调整步长

② 多步法：从 $x \to x+h$ 时，用到 x 之前的信息（单步法则无）

（亦可：$y(x_{n+1})-y(x_{n-q})=\int_{x_{n-q}}^{x_{n+1}} y'(x)\,dx$）

· 基于数值积分的多步法：$\begin{cases} y'=f(x,y) \\ y(x_0)=y_0 \end{cases} \Longrightarrow y(x_{n+1})-y(x_n)=\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)\,dx$.

对 $\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} y'(x)\,dx$：用 $x_n \sim x_{n-q}$ 作积分点可得显格式（用 $x_{n+1} \sim x_{n+1-q}$ 则得隐格式，可类似推）

$$\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} y'(x)\,dx \approx h\sum_{j=0}^{q} a_j y'(x_{n-j}) \Longrightarrow y(x_{n+1}) = y(x_{n-p}) + h\sum_{j=0}^{q} a_j f(x_{n-j}, y(x_{n-j}))$$

积分系数 $ha_j=\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} l_j(x)\,dx$ ~~（这里需用此求系数）不再有待系数法~~，局部截断 $err=\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} \frac{y^{(n+2)}(\xi)}{(q+1)!}$…

· Adams-Bashforth 公式与 Adams-Moulton 公式：

A-B 公式：$y_{n+1}=y_n+af_n+bf_{n-1}+\cdots$. 系数来源：$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f\,dx \approx h(Af_n+Bf_{n-1}+\cdots)$ 可待定系数（通常取 p_n 为基）

e.g. 五阶 A-B 公式推导：（令 $x_n=0$, $h=1$）$\int_0^1 p_n(x)\,dx = Ap_n(0)+\cdots+Ep_n(-4)$，将 $\begin{cases} p_0=1 \\ p_1=x \\ \vdots \\ p_4=x(x+1)(x+2)(x+3) \end{cases}$ 代入.

也有别的推导手法如：1° 在原式 $x_{n+1}=x_n+Af_n+\cdots+Ef_{n-p}$ 中取 $x=p_n$，则 $f=p_n'$. 2° 取 $p \in \Pi_n$ 插值 $x_n \sim x_0$，代入 $\int_{x_0}^{1} p\,dx \approx p(0) \sim p(-4)$ 线性函数，自然给出A-E

· 一般线性多步方法：$a_k y_n+\cdots+a_0 y_{n-k}=h(b_k f_n+\cdots+b_0 f_{n-k})$.（k步法）$\begin{cases} b_k=0 \text{ -- 显式} \\ b_k\neq 0 \text{ -- 隐式} \end{cases}$

关于阶：引入线性泛函 $Ly=\sum_{i=0}^{k}(a_i y(ih)-hb_i y'(ih))$.

设 $Ly \xrightarrow{0处展开} \sum_{j=0}^{\infty} y^{(j)}(0) h^j d_j$，且 $y(ih)=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{y^{(j)}(0)}{j!}(ih)^j$，$y'(ih)=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{y^{(j+1)}(0)}{j!}(ih)^j \Longrightarrow \begin{cases} d_0=\sum_{i=0}^{k} a_i \\ d_1=\sum_{i=0}^{k}(a_i-b_i) \\ \vdots \\ d_j=\sum_{i=0}^{k}\frac{i^{j-1}}{j!}(ia_i-jb_i) \end{cases}$

Th：线性多步法下面3条性质等价：(1) $d_0=\cdots=d_m=0$ (2) $\forall p\in\Pi_m$, $Lp=0$ (3) $\forall y\in C^{m+1}$, $Ly=O(h^{m+1})$

定义阶：s.t. $d_0=d_1=\cdots=d_m=0 \neq d_{m+1}$（即 s.t. d_i 始终为0的最大的数）.

附：稳定的 k 步法阶不能 $>k+2$（Dahlquist）

· 差分方程的零空间

(齐次)线性差分方程：$Ly=0$. 引入移位算子 E：$(Ey)_n=y_{n+1}$，$(E^k y)_n=y_{n+k}$.

则 $L=p(E)$ 方程化为 $p(E)y=0$，p 称为 L 的特征多项式.（易知：若 λ 为 p 一个根，则 $(\lambda,\lambda^2,\cdots)$ 为 $p(E)y=0$ 的一个解）

零空间基定理：（设 $p(0)\neq 0$，这个总可以做到）对 p 每个 k 重根 λ，$\exists\, k$ 个解 $y(\lambda), y'(\lambda)\cdots y^{(k-1)}(\lambda)$，$y(\lambda)=(\lambda,\lambda^2,\cdots)$.

$p(E)$ 零空间（or：$Ly=0$ 解空间）的一组基为：$\{y^{(m)}(\lambda_i)\}_{i=1\sim s,\ m=0\sim n_i}$（设 $\lambda_1\sim\lambda_s$ 为 p 的根，重数：$n_1\cdots n_s$）.

--

称 $p(E)y=0$ 稳定，是指它的解有界.

Th：（$p(0)\neq 0$）$p(E)y=0$ 稳定 $\Longleftrightarrow$ p 所有根在单位圆中，且圆周上没有重根.

--

· 线性多步法的收敛性：两个多项式 $\begin{cases} p(z)=a_k z^k+\cdots+a_0 \\ q(z)=b_k z^k+\cdots+b_0 \end{cases}$

称方法稳定：p 根 in $|z|\leq 1$，$|z|=1$ 根单；称方法相容：$p(1)=0$ 且 $p'(1)=q(1)$.

定义：称线性多步法收敛，是指 $\forall x\in[x_0,x_m]$，$\lim\limits_{h\to 0} y(h,x)=y(x)$（前提：初值 $x_0\sim x_{k}$ 已满足且 f 满足 Lip 条件）

*pf:

Th：线性多步法收敛 $\Longleftrightarrow$ 方法稳定，相容

· 线性多步法的误差分析

Th（局部截断误差）设多步法 m 阶，$y\in C^{m+2}$ 且 $\frac{\partial f}{\partial y}$ 连续，则 $y(x_n)-y_n=\frac{d_{m+1}}{a_k}h^{m+1}y^{(m+1)}(x_{n-k})+O(h^{m+2})$

关于整体截断误差，由于每步计算以上一步结果作初值，因此需要了解初值变化对于解曲线的影响。

为此，对初值问题 $\begin{cases} y'=f(x,y) \\ y(0)=s \end{cases}$ 引入变分方程：记 $y=y(x,s)$，$u \triangleq \frac{\partial y}{\partial s}$ $\Rightarrow$ $\begin{cases} u'(x)=f_y u \\ u(0)=1 \end{cases}$

Lemma 1：若 $f_y \le \lambda$，则 $|u(x)| \le e^{\lambda x}$，$x \ge 0$。 Lemma 2：初值用 s 换 $s+\delta$ 时，解曲线至多差 $|\delta| e^{\lambda x}$。

定理（整体截断误差界）若在 $x_1 \sim x_n$ 上局部截断 $|err| \le \delta$，则 x_n 上整体截断 $|err| \le \delta \frac{e^{Mh}-}{e^{Mh}-1}$

推论：若局截 $O(h^{m+1})$，则整截为 $O(h^m)$。

多步法的绝对稳定性

定义：差分方程称为绝对稳定的（A-stable），if 它作用于 $\frac{dy}{dx}=\lambda y$ ($Re\lambda<0$) 时，

$\forall$ 初值，总 $\exists$ 左半复平面上一个区域 R s.t. λh in R 时，差分方程解 $\to 0$。

A-stable 区域求解：令 $\phi(z)=(a_k-h\lambda b_k)z^k+\cdots+(a_0-h\lambda b_0)$，

求出 s.t. $\phi(z)$ 的根落在单位圆内的 $h\lambda$ 范围，即为稳定区域。

注：A 稳定的线性多步法必为隐式方法，且阶 ≤ 2。(Dahlquist)