第六章：常微分方程

(1)：欧拉法

目录

问题背景

目标是求解某个函数 y，满足限制条件 $y'(x) = f\big(x, y(x)\big)$，$y(t_0) = y_0$

- 我们需要的解是一个函数 y：比如在时间 $x \in [t_0, t_1]$ 之间，物体的位移 $y(x)$
- 这类方程的应用十分广泛：行星轨道的预测、飞行器的轨迹建模、化学反应、生物...
- 上述的函数 f 是给定的（比如是由牛顿定理得到），未知的量是函数 y
- 在本章中 x 是一维的量（可以理解为时间）、$y(x)$ 是一个 d 维向量（本章中主要侧重于掌握 $d = 1$ 的情况）

例子 1：放射性元素的衰变

假设物质的浓度为 $y(x)$，其中 x 为时间，通常我们可以用如下方程来描述：

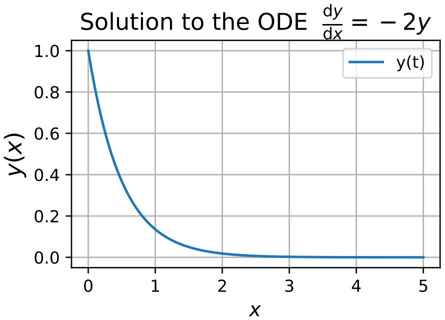
$$\frac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x} = -\lambda y(x), \qquad y(0) = y_0$$

它具有解析解：$y(x) = y_0 e^{-\lambda x}$。

其中，若物质衰变为原来浓度的一半：$\frac{1}{2} = e^{-\lambda x}$，可得时间为 $x = \frac{\ln(2)}{\lambda}$。

该时长 $\frac{\ln(2)}{\lambda}$ 为半衰期。

常微分方程通常不具有、或者很难得到解析解。



例子 2：行星轨迹

假设我们观测的问题中主要仅有两个星体（质量分别为 m_1, m_2）

$$m_1\ddot{\boldsymbol{r}}_1 = \frac{Gm_1m_2}{\|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2\|^2}\cdot\frac{\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1}{\|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1\|} \qquad m_2\ddot{\boldsymbol{r}}_2 = -\frac{Gm_1m_2}{\|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2\|^2}\cdot\frac{\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1}{\|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1\|}$$

如果我们引入速度 $\boldsymbol{v}_i = \dot{\boldsymbol{r}}_i$ （$i=1,2$），则

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{r}}_1 = \boldsymbol{v}_1 \\ \dot{\boldsymbol{r}}_2 = \boldsymbol{v}_2 \\ \dot{\boldsymbol{v}}_1 = \dfrac{Gm_2}{\|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2\|^3}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1) \\ \dot{\boldsymbol{v}}_2 = \dfrac{Gm_1}{\|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2\|^3}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) \end{cases} \implies \begin{array}{l} \dot{\boldsymbol{y}} = f(x,\boldsymbol{y}), \qquad \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_1 \\ \boldsymbol{r}_2 \\ \boldsymbol{v}_1 \\ \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} \\ f(x,\boldsymbol{y}) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 \\ \boldsymbol{v}_2 \\ \frac{Gm_2}{\|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2\|^3}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1) \\ \frac{Gm_1}{\|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2\|^3}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) \end{bmatrix} \end{array}$$

URL: https://scienceworld.wolfram.com/physics/Two-BodyProblem.html

数值解法：

由于需要求解的 y 是一个函数，且一般而言没有解析解，因而我们希望来对于离散的节点 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$ 得到对于 $y(x_j)$ 的近似值（$0 \le j \le n$）

- 本章主要考虑情况 $x_k = x_0 + kh$，其中 h 为时间步长

  比如，我们考虑时间区间 $[a, b]$，则可以取 $x_0 = a$, 步长 $h = \frac{b-a}{n}$，节点 $x_k = x_0 + kh$。

- 对于 ODE 的假设：对于任意的 $x \in [a, b]$，任意的 $y, y' \in \mathbb{R}$，假设 f 满足条件

$$|f(x, y) - f(x, y')| \le L|y - y'| \tag{1}$$

  其中，L 是某个参数。

  注：该条件可以保证 ODE 有唯一解，且能够简化后续误差分析。

目录

二元函数的 Taylor 展开

考虑多元函数 $f = f(x, y)$，则

$$
\begin{aligned}
f(x,y) = f(x_0,y_0) + &\partial_x f(x_0,y_0)(x-x_0) + \partial_y f(x_0,y_0)(y-y_0) + \\
&+ \frac{1}{2}\partial_{xx} f(x_0,y_0)(x-x_0)^2 + \\
&+ \partial_{xy} f(x_0,y_0)(x-x_0)(y-y_0) \\
&+ \frac{1}{2}\partial_{yy} f(x_0,y_0)(y-y_0)^2 \\
&+ \cdots
\end{aligned}
$$

我们标记 $h=\tilde{x}-x_0, \ell=\tilde{y}-y_0$，则

$$\begin{aligned}
f(\tilde{x},\tilde{y}) =& f(x_0+th, y_0+t\ell)\big|_{t=1} \\
=& f(x_0,y_0) + \left(h\partial_x + \ell\partial_y\right) f\Big|_{(x_0,y_0)} \\
&\quad + \frac{1}{2}\left(h\partial_x + \ell\partial_y\right)^2 f\Big|_{(x_0,y_0)} \\
&\quad + \cdots \\
=& f(x_0,y_0) + \partial_x f(x_0,y_0)h + \partial_y f(x_0,y_0)\ell + \\
&\quad \frac{1}{2}\left(\partial_{xx} f(x_0,y_0)h^2 + 2\partial_{xy} f(x_0,y_0)h\ell + \partial_{yy} f(x_0,y_0)\ell^2\right) \\
&\quad + \cdots
\end{aligned}$$

所以该展开其实可以用二项式的展开公式来记忆

练习： $f(x,y) = e^x \sin(y)$，请对于 (x,y) 在点 $(x_0,y_0) = (0,0)$ 附近计算 Taylor 展开（仅到 x, y 的平方项即可）

答案：$y + xy$

目录

假设我们已知 $y(x_0)$，则

$$y(x_1) - y(x_0) = y'(x_0)(x_1 - x_0) + \frac{y''(x_0)}{2}(x_1 - x_0)^2 + \cdots$$

若 $x_1 - x_0$ 非常小，则我们可以忽略绿色部分的项，进而得到近似

$$y(x_1) \approx y(x_0) + f\big(x_0, y(x_0)\big)\ (x_1 - x_0)$$

我们将近似值标记为 y_1，则

$$y(x_1) \approx y_1 \overset{\text{选择为}}{=} y(x_0) + f\big(x_0, y(x_0)\big)\ (x_1 - x_0)$$

欧拉格式

当我们需要计算 $y(x_2)$ 时，我们类似通过 Taylor 展开得到

$$y(x_2) \approx y(x_1) + f\big(x_1, y(x_1)\big)(x_2 - x_1)$$

然而我们不知道真实值 $y(x_1)$。因此替代 $y(x_1)$ 为之前得到的近似值 y_1

$$y(x_2) \approx y_2 \overset{\text{选择为}}{=} y_1 + f(x_1, y_1)(x_2 - x_1)$$

对于一般的情况

$$y(x_{k+1}) \approx \boxed{y_{k+1} = y_k + f(x_k, y_k)(x_{k+1} - x_k)}$$

此处的递推关系被称为欧拉格式。

例题： 考虑 ODE $y'(x) = f\big(x, y(x)\big) = \lambda y(x)$，$y(0) = y_0$；我们考虑时间区间 $[0, T]$，以及等距节点 $x_k = k\frac{T}{n}$，请使用欧拉格式写出 y_n 的表达式，并且证明当我们取足够多的点 $n \to \infty$，y_n 会收敛至真解 $y(T) = y_0 \exp(\lambda T)$。

此处的误差 $|y(T) - y_n|$ 被称为**整体截断误差**；直接研究整体截断误差比较复杂，我们可以把问题简化为研究局部截断误差。

局部截断误差

我们假定 $y_k = y(x_k)$ 是精确的，我们考虑

$$\left| \underbrace{y_{k+1}}_{\text{数值格式的预测}} - \underbrace{y(x_{k+1})}_{\text{真实值}} \right|$$

真解的 Taylor 展开 $$y(x_{k+1}) = y(x_k) + y'(x_k)(x_{k+1} - x_k) + \frac{y''(\xi)}{2}(x_{k+1} - x_k)^2$$

欧拉格式 $$y_{k+1} := y_k + f(x_k, y_k)(x_{k+1} - x_k)$$

因此，误差为

$$y(x_{k+1}) - y_{k+1} = \frac{y''(\xi)}{2}(x_{k+1} - x_k)^2 \approx \frac{y''(x_n)}{2}(x_{k+1} - x_k)^2$$

由此可见，欧拉格式的局部截断误差为 $\mathcal{O}(h^2)$

局部截断误差 $\Longrightarrow$ 整体截断误差

定理

考虑时间区间 $[a,b]$，并且为简化，我们使用均匀的时间步长 $h=\frac{b-a}{n}$。

如果有一种方法的局部截断误差为 $\mathcal{O}(h^{p+1})$，（在一定条件下）其整体截断误差 $|y_n-y(b)|=\mathcal{O}(h^p)$，因而我们称该方法具有 p **阶精度**。

- **欧拉格式** 具有 $\mathcal{O}(h^2)$ 的局部截断误差，其整体截断误差则为 $\mathcal{O}(h)$（即一阶算法）
- **（视角：和积分问题的关联）** 考虑特殊的 ODE $y'(x)=f(x)$，即本质为积分问题。若局部截断误差为 $\mathcal{O}(h^{p+1})$，其实就是在每个小区间的积分误差为 $\mathcal{O}(h^{p+1})$；由于积分的总误差是累积的，因此最终的误差为 $\mathcal{O}(h^p)$
- 具体的证明见课堂，或参考课本 5.4 章

目录

假设我们已知 $y(x_0)$，则

$$y(x_0) - y(x_1) = y'(x_1)(x_0 - x_1) + \frac{y''(x_1)}{2}(x_0 - x_1)^2 + \cdots$$

若 $x_1 - x_0$ 非常小，则我们可以忽略绿色部分的项，进而得到近似

$$y(x_1) \approx y(x_0) + f\big(x_1, y(x_1)\big)\ (x_1 - x_0)$$

即 $y(x_1)$ 近似是方程 $z = y(x_0) + f(x_1, z)(x_1 - x_0)$ 的零点（其中 z 是此处方程的变量)。

我们将该零点标记为 y_1，则

$$y(x_1) \approx y_1 \qquad y_1 = y(x_0) + f\big(x_0, y_1\big)\ (x_1 - x_0)$$

后退欧拉格式

类似的，

$$y(x_2) \approx y(x_1) + f\big(x_2, y(x_2)\big)\ (x_2 - x_1)$$

但是 $y(x_1)$ 的真实值我们不知道，因此，我们进一步使用

$$y(x_2) \approx y_1 + f\big(x_2, y(x_2)\big)\ (x_2 - x_1)$$

因此，我们得到

$$y(x_2) \approx y_2 \qquad y_2 = y_1 + f\big(x_2, y_2\big)(x_2 - x_1)$$

对于一般的情况

$$y(x_{k+1}) \approx y_{k+1}, \qquad y_{k+1} = y_k + f(x_{k+1}, y_{k+1})(x_{k+1} - x_k)$$

此处的递推关系被称为后退欧拉格式。

显式和隐式

欧拉格式

$$y_{k+1} = y_k + f(x_k, y_k)(x_{k+1} - x_k)$$

递推的过程不需要解方程，只要直接计算数值，这类格式被称为显式

后退欧拉格式

$$y_{k+1} = y_k + f(x_{k+1}, y_{k+1})(x_{k+1} - x_k)$$

递推的过程需要解方程的零点，这类格式被称为隐式

一般而言，为了解该方程的零点，我们选初值为 y_k，并且可以通过迭代法/牛顿法来求解方程的零点。

练习： 假设 f 满足 Lipschitz 条件，即前面的公式(1)，问步长 h 需要怎么取使得通过 (直接的)迭代法求解后退欧拉格式

$$y_{k+1} = y_k + f(x_{k+1}, y_{k+1})h$$

时是收敛的？我们假设 $x_{k+1} = x_k + h$。

答案：$h < 1/L$

截断误差

我们假定 y_k 是精确的，我们希望类似量化局部截断误差 $|y_{k+1} - y(x_{k+1})|$ 对于后退的欧拉格式，

$$
\begin{aligned}
y(x_{k+1}) &= y(x_k) + y'(x_k)h + \frac{y''(x_k)}{2}h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\
y_{k+1} &:= y_k + f(x_{k+1}, y_{k+1})h \\
&= y_k + f(x_k, y_k)h + \partial_x f(x_k, y_k)h^2 + \partial_y f(x_k, y_k)h(y_{k+1} - y_k) + \mathcal{O}(h^3) \\
&= y_k + f(x_k, y_k)h + \partial_x f(x_k, y_k)h^2 + \partial_y f(x_k, y_k)f(x_{k+1}, y_{k+1})h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\
&= y_k + f(x_k, y_k)h + \partial_x f(x_k, y_k)h^2 + \partial_y f(x_k, y_k)f(x_k, y_k)h^2 + \mathcal{O}(h^3)
\end{aligned}
$$

因此，误差为

$$
y(x_{k+1}) - y_{k+1} = -\frac{y''(x_k)h^2}{2} + \mathcal{O}(h^3)
$$

后退欧拉格式的局部截断误差 $= \mathcal{O}(h^2) \to$ **整体截断误差**为 $\mathcal{O}(h)$
即该格式为**一阶收敛**

例题： 考虑 ODE $y'(x) = f(x, y(x)) = \lambda y(x)$，$y(0) = y_0$；我们考虑时间区间 $[0, T]$，以及等距节点 $x_k = k\frac{T}{n}$，请使用后退欧拉格式写出 y_n 的表达式，并且证明当我们取足够多的点 $n \to \infty$，y_n 会收敛至真解 $y(T) = y_0 \exp(\lambda T)$。

目录

我们通过前面知道

$$y(x_{k+1}) - y_{k+1}^{\mathrm{F}} = \frac{y''(x_k)h^2}{2} + \mathcal{O}(h^3) \qquad \text{前向欧拉格式的局部截断误差}$$

$$y(x_{k+1}) - y_{k+1}^{\mathrm{B}} = -\frac{y''(x_k)h^2}{2} + \mathcal{O}(h^3) \qquad \text{后退欧拉格式的局部截断误差}$$

其中，

$$y_{k+1}^{\mathrm{F}} = y_k + f(x_k, y_k)h \qquad y_{k+1}^{\mathrm{B}} = y_k + f(x_{k+1}, y_{k+1}^{\mathrm{B}})h$$

类似 Richardson 加速法的思路，我们似乎可以构造一个新算法：

$$\begin{aligned} y(x_{k+1}) =& \frac{1}{2}\left(y_{k+1}^{\mathrm{F}} + y_{k+1}^{\mathrm{B}}\right) + \mathcal{O}(h^3) \overset{\text{带入表达式}}{=} y_k + \frac{h}{2}\left(f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1}^{\mathrm{B}})\right) + \mathcal{O}(h^3) \\ =& y_k + \frac{h}{2}\Big(f(x_k, y_k) + f\big(x_{k+1}, y(x_{k+1})\big)\Big) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

因此，我们构造如下的梯形格式：

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\Big(f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})\Big)$$

误差分析

由前一页可知，

ODE 真解 $y(x_{k+1}) = y_k + \frac{h}{2}\Big(f\big(x_k, y_k\big) + f\big(x_{k+1}, y(x_{k+1})\big)\Big) + E_k \qquad E_k = \mathcal{O}\big(h^3\big)$

梯形公式 $y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\Big(f\big(x_k, y_k\big) + f\big(x_{k+1}, y_{k+1}\big)\Big)$

因此，误差

$$\begin{aligned}\big|y(x_{k+1}) - y_{k+1}\big| &\leq \frac{h}{2}\Big|f\big(x_{k+1}, y(x_{k+1})\big) - f\big(x_{k+1}, y_{k+1}\big)\Big| + E_k \\ &\leq \frac{Lh}{2}\big|y(x_{k+1}) - y_{k+1}\big| + E_k\end{aligned}$$

我们考虑 h 足够小使得 $Lh/2 < 1$，则

$$\big|y(x_{k+1}) - y_{k+1}\big| \leq \frac{E_k}{1 - Lh/2} = \mathcal{O}\big(h^3\big)$$

因此，梯形格式具有二阶收敛

练习

练习： 对于梯形格式

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\Big(f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})\Big)$$

如果我们使用直接的迭代法来计算 y_{k+1}，则迭代法收敛的条件是什么?

答案： $h < \frac{2}{L}$

格式	类比于积分	局部截断误差	精度
（前向）欧拉	使用左端点	$=\frac{y''(x_k)}{2}h^2+\mathcal{O}\left(h^3\right)$	1
后退欧拉	使用右端点	$=-\frac{y''(x_k)}{2}h^2+\mathcal{O}\left(h^3\right)$	1
梯形格式	使用左右端点（类似积分的梯形公式）	$\mathcal{O}\left(h^3\right)$	2

目录

练习： 梯形格式 $y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\Big(f(x_k, y_k) + f\big(x_{k+1}, y_{k+1}\big)\Big)$ 是隐式还是显式?

改进的思路：由于上述的解 $y_{k+1} - y(x_{k+1}) = \mathcal{O}(h^3)$，而欧拉格式 $y^F_{k+1} := y_k + hf(x_k, y_k)$ 满足 $y^F_{k+1} - y(x_{k+1}) = \mathcal{O}(h^2)$，因此若我们替代红色部分 y_{k+1} 为 y^F_{k+1} 后，局部截断截断误差不改变

改进的欧拉格式：

$$
\begin{aligned}
\bar{y}_{k+1} &= y_k + hf(x_k, y_k) \\
y_{k+1} &= y_k + \frac{h}{2}\Big(f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, \bar{y}_{k+1})\Big)
\end{aligned}
$$

此处的改进的欧拉格式变成了显式格式。

目录

定义 (稳定)

若一种方法对于节点处 y_m 上的小误差 δ，在之后的节点 y_j $(j > m)$ 上误差不超过 δ，则称该方法是稳定的。

这个概念很重要，但具体的量化很复杂，所以一般而言，我们会在基准例子 $y'(x) = \lambda y(x)$ （$\lambda < 0$）上做测试

对于欧拉格式，$y_{k+1} = (1+\lambda h)y_k$，所以 $e_{k+1} = (1+\lambda h)e_k$

稳定性的条件是 $h \le \frac{2}{-\lambda}$，我们称此为 条件稳定

对于后退欧拉格式，$y_{k+1} = \frac{1}{1-h\lambda}y_k$，所以 $e_{k+1} = \frac{1}{1-h\lambda}e_k$

由于对任何 $h > 0$, $\lambda < 0$, 我们都有 $0 < \frac{1}{1-h\lambda} < 1$，

因此，我们称此为 恒稳定或无条件稳定

练习： 请对于梯形格式和改进的欧拉格式分别写出稳定的条件

目录

总结

- 掌握 4 种格式，并且能用它们计算 ODE 的解
- 能分析它们的局部截断误差，以及收敛阶；知道第16页的定理
- 掌握显式和隐式格式的区别
- 能计算稳定性区域（或者说稳定性条件）