Numerical Analysis

Zhiping Li

LMAM and School of Mathematical Sciences
Peking University

向前（显式） Euler 格式（方法）

考虑适定的一阶常微分方程初值问题：

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad \forall x \in (a, b), \\ y(a) = y_0. \end{cases}$$

设问题的解 $y(x) \in \mathbb{C}^2[a, b]$.

引入等距节点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_N = b$, $x_n = nh$, $n = 0, 1, \cdots, N$, $h = (b - a)/N$. 将解 $y(x_{n+1})$ 在 x_n 处做 Taylor 展开:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(\xi_n),$$

其中 $\xi_n \in (x_n, x_{n+1})$. 略去二阶小量，得向前 Euler 格式:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 0, 1, \cdots, N - 1, \\ y_0 = y(a). \end{cases}$$

向后（隐式） Euler 格式（方法）

若将解 $y(x_n)$ 在 x_{n+1} 处做 Taylor 展开:

$$y(x_n) = y(x_{n+1}) - hy'(x_{n+1}) + \frac{h^2}{2}y''(\eta_n),$$

其中 $\eta_n \in (x_n, x_{n+1})$. 略去二阶小量，则得向后 Euler 格式:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}), \quad n = 0, 1, \cdots, N-1, \\ y_0 = y(a). \end{cases}$$

注 1： 向前 Euler 格式是一种显式格式，即给定 x_n, y_n 后, y_{n+1} 可由格式的右端项直接计算得到.

注 2： 向后 Euler 格式是一种隐式格式，即给定 x_n, y_n 后, y_{n+1} 不能由格式的右端项直接计算得到, 而需要通过解方程求得.

注 3： Euler 格式的几何意义: 用端点的梯度近似真解的平均梯度.

Euler 格式的例

考虑适定的一阶常微分方程初值问题：

$$\begin{cases} y' = x - y + 1, & \forall x > 0, \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

这里 $f(x,y) = x - y + 1$, $y_0 = 1$. 精确解 $y(x) = x + e^{-x}$.

取 $h = 0.1$. 则有，向前 Euler 格式:

$$y_{n+1} = 0.1x_n + 0.9y_n + 0.1, \quad n = 0, 1, \cdots,$$

向后 Euler 格式:

$$y_{n+1} = (0.1x_{n+1} + y_n + 0.1)/1.1, \quad n = 0, 1, \cdots,$$

在 $x_n = 0.5$ 处, 向前 Euler 格式和向前 Euler 格式的误差 $y(x_n) - y_n$ 分别是 1.6×10^{-2} 和 -1.4×10^{-2}. 精度相当.

常微分方程数值格式的绝对稳定性— 分析数值稳定性的工具

定义： 若一个常微分方程数值方法在以定步长 h 求解试验方程

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C},$$

的非零初值问题时，所给出的是一线性差分方程，且得到的离散解 y_n 满足 $\lim_{n\to\infty} y_n = 0$，则称该数值方法关于 λh 为绝对稳定的；否则，称该方法关于 λh 为非绝对稳定，或计算不稳定的.

注： 设 $Re(\lambda) \geq \frac{\partial f}{\partial y} > 0$，由舍入误差引起的数值解的误差一般会随 x 增长而增长. 但注意到精确解的模也是增函数，因此，只要舍入误差增速相对较小即可. 数值方法称为是关于 λh 相对稳定的：若存在常数 $\alpha > 0$，使得相应试验方程的数值解满足

$$\lim_{n\to\infty} y_n e^{-n[Re(\lambda h)+\alpha(Re(\lambda h))^2]} = 0.$$

常微分方程数值格式的绝对稳定区域

定义： 将一个常微分方程数值方法应用于求解试验方程

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C},$$

时, 若存在复平面中的区域 $R \subset \mathbb{C}$, 使得当且仅当步长 h 满足

$$\mu = \lambda h \in R \subset \mathbb{C}$$

时, 该数值方法对步长 h 为绝对稳定的, 则称区域 R 为该方法的*绝对稳定区域*.

注 1： 绝对稳定区域的大小是数值方法优劣的比较标准之一.

注 2： 设数值格式关于 $\frac{\partial f}{\partial y} h$ 总属于方法的绝对(相对)稳定区域. 则由初值误差和舍入误差引起的数值解的绝对(相对)误差是小量. (由 Gronwall 不等式和 $(\tilde{y} - y)'(x) = \frac{\partial f}{\partial y}(x, y^*)(\tilde{y} - y)(x)$)

向前 Euler 格式的绝对稳定区域

对试验方程

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C},$$

向前 Euler 格式是:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) = y_n + \lambda h y_n = (1 + \lambda h) y_n, \quad n \geq 0.$$

因此有 $y_n = (1 + \lambda h)^n y_0$. 由定义, 向前 Euler 格式的绝对稳定区域为

$$R = \{\mu \in \mathbb{C} : |1 + \mu| < 1\}.$$

这是复平面上以 $(-1, 0)$ 为中心, 半径为 1 的圆形区域的内部.

向后 Euler 格式的绝对稳定区域

对试验方程

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C},$$

向后 Euler 格式是:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) = y_n + \lambda h y_{n+1}, \quad n \geq 0.$$

因此有 $y_n = (1-\lambda h)^{-n} y_0$. 由定义, 向后 Euler 格式的绝对稳定区域为

$$R = \{\mu \in \mathbb{C} : |1-\mu| > 1\}.$$

这是复平面上以 $(1,0)$ 为中心, 半径为 1 的圆形区域的外部.

中心差分格式的绝对不稳定性

当一个格式的绝对稳定区域为空集时, 称其为绝对不稳定的.
对试验方程

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C},$$

应用中心差分格式 $y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf(x_n, y_n)$, 得其特征方程:

$$y_{n+1} - 2\lambda h y_n - y_{n-1} = 0, \quad n \geq 1.$$

或

$$\begin{pmatrix} y_{n+1} \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\lambda h & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_n \\ y_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\lambda h & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} y_1 \\ y_0 \end{pmatrix}, \quad \forall n.$$

由此得特征方程 $(\rho^2 - 2\mu\rho - 1 = 0)$ 的两个根为 $\rho_{\pm} = \lambda h \pm \sqrt{1 + \lambda^2 h^2}$.
由于对任何 $\mu = \lambda h$, 由于 $\rho_+ \rho_- = -1$, 所以 $|\rho_{\pm}| < 1$ 不可能同时成立, 因此中心差分格式是绝对不稳定的.

数值格式是对微分方程的离散逼近

考虑适定的一阶常微分方程初值问题：

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y), & \forall x \in (a, b), \\ y(a) = y_0, \end{cases}$$

的单步法 (即在求 y_{n+1} 时，不需用到 n 步之前的信息):

$$y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, x_{n+1}, y_n, y_{n+1}, h),$$

其中 φ 与 f 有关. 记微分算子 $Dy(x) \triangleq y'(x) - f(x, y(x))$, 记离散算子 $D_h y_{n+1} \triangleq \frac{y_{n+1} - y_n}{h} - \varphi(x_n, x_{n+1}, y_n, y_{n+1}, h)$, 则可以认为算法正是用离散算子 D_h 近似替代微分算子 D 之后得出的.

$(D_h - D)y(x_{n+1})$ 反映了数值格式对微分方程的逼近的精度. 若 $y(x)$ 是微分方程的精确解, 则有 $Dy(x) \equiv 0$, 因此, 引出以下定义.

数值方法的局部截断误差和局部截断误差主项

定义： 设 $y(x)$ 是微分方程的精确解，即 $Dy(x) \equiv 0$，则称

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\varphi(x_n, x_{n+1}, y(x_n), y(x_{n+1}), h)$$

为单步法的局部截断误差.

注： 按定义有 $T_{n+1} = h \cdot (D_h - D)y(x_{n+1})$.

定义： 如果一个数值方法的局部截断误差 $T_{n+1} = O(h^{p+1})$，其中 p 为自然数，则称该方法是 p 阶的，或具有 p 阶精度. 若有

$$T_{n+1} = g(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2}), \quad g(x_n, y(x_n)) \neq 0,$$

则称 $g(x_n, y(x_n))h^{p+1}$ 是该方法的局部截断误差主项.

向前 Euler 方法的局部截断误差和局部截断误差主项

向前 Euler 格式是: $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$.

因此, 由方程, 并利用 Taylor 展开有

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= y(x_{n+1}) - y(x_n) - hf(x_n, y(x_n)) \\ &= y(x_{n+1}) - y(x_n) - hy'(x_n) \\ &= \frac{h^2}{2} y''(x_n) + O(h^3). \end{aligned}$$

所以, 向前 Euler 方法的局部截断误差是一阶的，其局部截断误差主项为 $\frac{h^2}{2} y''(x_n)$.

向后 Euler 方法的局部截断误差和局部截断误差主项

向后 Euler 格式是: $y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$.

因此, 由方程, 并利用 Taylor 展开有

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= y(x_{n+1}) - y(x_n) - hf(x_{n+1}, y(x_{n+1})) \\ &= y(x_{n+1}) - y(x_n) - hy'(x_{n+1}) \\ &= -\frac{h^2}{2}y''(x_{n+1}) + O(h^3) = -\frac{h^2}{2}y''(x_n) + O(h^3). \end{aligned}$$

所以, 向后 Euler 方法的局部截断误差也是一阶的，其局部截断误差主项为 $-\frac{h^2}{2}y''(x_n)$ 或 $-\frac{h^2}{2}y''(x_{n+1})$.

中心差分格式的局部截断误差和局部截断误差主项

中心差分格式是 (一个简单的两步法): $y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf(x_n, y_n)$.

因此, 由方程, 并利用 Taylor 展开有

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= y(x_{n+1}) - y(x_{n-1}) - 2hf(x_n, y(x_n)) \\ &= y(x_{n+1}) - y(x_{n-1}) - 2hy'(x_n) \\ &= \frac{h^3}{3} y'''(x_n) + O(h^5). \end{aligned}$$

所以, 中心差分格式的局部截断误差是二阶的，其局部截断误差主项为 $\frac{h^3}{3} y'''(x_n)$. 但该方法是绝对不稳定的, 因此也必然总是数值不稳定的. 由此可见, 局部截断误差高的方法未必是好方法.

单步法的误差不等式

考虑适定的一阶常微分方程初值问题：

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad \forall x \in (a, b), \\ y(a) = y_0, \end{cases}$$

的单步法: $\qquad y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, x_{n+1}, y_n, y_{n+1}, h),$

由局部截断误差的定义有:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h\varphi(x_n, x_{n+1}, y(x_n), y(x_{n+1}), h) + T_{n+1}.$$

记 $e_n = y_n - y(x_n)$ 为数值方法的（整体）误差, 则有

$$|e_{n+1}| \le |e_n| + h(L_1|e_n| + L_2|e_{n+1}|) + |T_{n+1}|, \quad n \ge 0,$$

其中 L_1, L_2 分别是 φ 关于 y_n 和 y_{n+1} 的 Lipschitz 常数.

单步法的误差不等式与格式的稳定性 — 敏度分析的工具

于是有 $(1-L_2h)|e_{n+1}| \le (1+L_1h)|e_n| + |T_{n+1}|, \quad n \ge 0.$

不妨设 $2L_2h<1$, 令 $L=2(L_1+L_2)$, 于是有 $\frac{1+L_1h}{1-L_2h} \le 1+Lh$, $\frac{1}{1-L_2h} \le 1+2L_2h < 1+Lh$. 因此得误差不等式

$$|e_{n+1}| \le (1+Lh)|e_n| + (1+Lh)|T_{n+1}|, \quad n \ge 0.$$

由此递推得

$$\begin{aligned}|e_{n+1}| &\le (1+Lh)^{n+1}|e_0| + \sum_{k=0}^{n}(1+Lh)^k|T_{n+1-k}| \\ &\le (1+Lh)^{n+1}|e_0| + \frac{(1+Lh)^{n+1}-1}{Lh}\max_{0\le k\le n}|T_{k+1}|.\end{aligned}$$

单步法的整体误差估计与整体误差的阶

现设 $h=(b-a)/N,\ 1\le n\le N$, 于是

$$(1+Lh)^n \le \left(1+\frac{L(b-a)}{N}\right)^{\frac{N}{L(b-a)}L(b-a)} \le e^{L(b-a)}.$$

由此及前式即得单步法的整体误差估计：

$$\|e\|_\infty \le e^{L(b-a)}|e_0|+\frac{e^{L(b-a)}-1}{Lh}\max_{1\le k\le n}|T_k|,\quad \forall\, 0\le n\le N=\frac{b-a}{h}.$$

特别地, 当初始误差 $e_0=0,\ \max\limits_{1\le k\le n}|T_k|=O(h^{p+1})$, 即格式为 p 阶时, 有

$$\|e\|_\infty \le \frac{e^{L(b-a)}-1}{Lh}\max_{1\le k\le n}|T_k| = O(h^p).$$

可见, 此时整体误差的阶即为由局部截断误差定义的方法的阶.

单步法的相容性和稳定性 (Lecture 16 中还会进一步展开讨论)

定义： 对单步法, 如果存在 $p > 0$, 使得其局部截断误差

$$T(x) = y(x+h) - y(x) - h\varphi(x, x+h, y(x), y(x+h), h) = O(h^{p+1}),$$

其中 $y(x)$ 是相应微分方程的精确解, 则称格式是 *(p 阶)* 相容的.

$$\text{定义残量算子: } (\mathcal{R}_h \tilde{\mathbf{y}})_n \triangleq \frac{1}{h}\left[\tilde{y}_{n+1} - \tilde{y}_n - h\varphi(x_n, x_{n+1}, \tilde{y}_n, \tilde{y}_{n+1}, h)\right].$$

定义： 如果存在常数 $K > 0$ 和 $h_0 > 0$, 使得对任意网格尺度满足 $h \le h_0$ 的网格节点上取值的向量 $\mathbf{v}$, $\mathbf{w}$ 都有

$$\|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|_\infty \le K(\|\mathbf{v}_0 - \mathbf{w}_0\|_\infty + \|\mathcal{R}_h\mathbf{v} - \mathcal{R}_h\mathbf{w}\|_\infty),$$

则称相应格式是稳定的.

注: 误差不等式也说明了格式关于初值和右端项的稳定性.

单步法的误差不等式与格式的稳定性 — 舍入误差的影响

记第 n 步由舍入误差带来的计算误差为 δ_n, 则有误差不等式

$$|\tilde{e}_{n+1}| \le (1+Lh)|\tilde{e}_n| + (1+Lh)(|T_{n+1}| + |\delta_{n+1}|), \quad n \ge 0.$$

由此递推得

$$\begin{aligned}|\tilde{e}_{n+1}| &\le (1+Lh)^{n+1}|\tilde{e}_0| + \sum_{k=0}^{n}(1+Lh)^k(|T_{n+1-k}| + |\delta_{n+1-k}|) \\ &\le (1+Lh)^{n+1}|\tilde{e}_0| + \frac{(1+Lh)^{n+1}-1}{Lh}\max_{0\le k\le n}(|T_{k+1}| + |\delta_{k+1}|).\end{aligned}$$

注: 这说明稳定的格式通常也是数值稳定的, 计算中需平衡每一步的截断误差和由舍入误差带来的计算误差以优化数值精度.

Runge-Kutta 方法的基本思想

由以上单步法整体误差分析的结果知, Euler 方法仅具有整体一阶逼近精度, 而要提高数值解的整体逼近精度, 只需减小步长，或采用稳定的具有更高局部截断误差阶的方法.

Runge-Kutta 方法是通过利用函数 $f(x, y)$ 在 (x, y) 邻域中的某些点选择适当的系数做组合, 来构造单步法的一种系统性的方法. 其几何意义是：用若干点梯度的加权平均近似真解的平均梯度.

系数的选择原则是使所得到的方法有尽可能高的精度阶并有较大的绝对稳定区域 (以及尽可能多的满足后面陆续引入的其它稳定性条件), 前一目标通常可以通过使方法的 Taylor 展开式与精确解的 Taylor 展开式有尽可能多的重合项来获得. Runge-Kutta 方法又分为显式和隐式两大类, 显式方法构造相对简单, 而隐式方法却可以得到更高的精度阶、更大的绝对稳定区域 (以及更好地满足其它稳定性条件).

二阶显式 Runge-Kutta 方法的构造

1. 取 (x, y) 和 $(x + a_2 h, y + b_{21} h f(x, y))$;
2. 做线性组合:
   $\varphi(x, y, f, h) = c_1 f(x, y) + c_2 f(x + a_2 h, y + b_{21} h f(x, y))$;
3. 定义算法: $y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, f, h)$;
4. 将 $y + h\varphi(x, y, f, h)$ 在 (x, y) 处做 Taylor 展开, 有

$$
\begin{aligned}
y + h\varphi(x, y, f, h) = {} & y + c_1 h f(x, y) + \\
& c_2 h[f(x, y) + a_2 h f_x(x, y) + b_{21} h f(x, y) f_y(x, y)] + O(h^3);
\end{aligned}
$$

5. 将精确解 $y(x + h)$ 在 x 处做 Taylor 展开, 有

$$
\begin{aligned}
y(x + h) &= y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2} y''(x) + O(h^3) \\
&= y + hf(x, y) + \frac{h^2}{2}[f_x(x, y) + f_y(x, y) f(x, y)] + O(h^3);
\end{aligned}
$$

二阶显式 Runge-Kutta 方法的构造

6. 选系数使两者 Taylor 展开式的前三项系数相同得:

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1, \\ c_2 a_2 = 1/2, \\ c_2 b_{21} = 1/2; \end{cases}$$

7. 满足以上要求的系数有无穷多组解, 这为稳定性条件提供了必要的自由度 (构造 Runge-Kutta 方法的通用做法);

8. 一般可以得到多种满足要求的 Runge-Kutta 方法.

二级二阶显式 Runge-Kutta 方法的例

若选 $c_1 = c_2 = 1/2,\ a_2 = 1,\ b_{21} = 1$, 则得改进的 Euler 公式:

$$\begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n), \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1), \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2). \end{cases}$$

若选 $c_1 = 1/4,\ c_2 = 3/4,\ a_2 = 2/3,\ b_{21} = 2/3$, 则得 Heun 公式:

$$\begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n), \\ K_2 = f(x_n + \frac{2}{3}h, y_n + \frac{2}{3}hK_1), \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{4}(K_1 + 3K_2). \end{cases}$$

由以上分析知, 改进的 Euler 公式和 Heun 公式都是二级二阶显式 Runge-Kutta 方法.

改进的 Euler 公式的绝对稳定性

对试验方程

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

应用改进的 Euler 公式得

$$\begin{cases} K_1 = \lambda y_n, \\ K_2 = \lambda(y_n + h\lambda y_n), \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(\lambda y_n + \lambda(y_n + h\lambda y_n)), \end{cases}$$

即 $y_{n+1} = \left[1 + \lambda h + \frac{1}{2}(\lambda h)^2\right] y_n$. 因此, 二阶显式 Runge-Kutta 方法改进的 Euler 公式的绝对稳定区域为

$$\left\{\mu \in \mathbb{C} : |1 + \mu + \frac{1}{2}\mu^2| < 1\right\}.$$

Heun 公式的绝对稳定性

对试验方程

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

应用 Heun 公式得

$$\begin{cases} K_1 = \lambda y_n, \\ K_2 = \lambda(y_n + \frac{2}{3}h\lambda y_n), \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{4}(\lambda y_n + 3\lambda(y_n + \frac{2}{3}h\lambda y_n)), \end{cases}$$

即 $y_{n+1} = \left[1 + \lambda h + \frac{1}{2}(\lambda h)^2\right] y_n$. 因此, Heun 公式的绝对稳定区域也是

$$\left\{\mu \in \mathbb{C} : |1 + \mu + \frac{1}{2}\mu^2| < 1\right\}.$$

注： 事实上, 所有二级二阶显式 Runge-Kutta 方法必然都有相同的绝对稳定区域. (请给出证明).

习题六：1，2，3.

Thank You!