







2 多步法和隐式法





# 5 动力学中的有序和混沌



Chenwei Jiang, Xi'an Jiaotong University, 2019

. . . . . . . . . . . . . . . . .



# 常微分方程的数值解

- ・ 自然界中很多问题的描述,在数学中往往都归结为常 微分方程的求解问题。
- 例如天文学中研究星体运动、空间技术中研究物体飞行、物理学中研究单摆的运动等,都需要求解常微分方程。







### 虽然求解微分方程有许多解析方法,但解析方法通常只能 够求解一些<mark>特殊类型的方程或微分方程的一些特殊的情</mark> 况。从实际意义上来讲我们更关心的是某些特定的自变 量在某一个定义范围内的一系列离散点上的近似值。



单摆运动可以用如下常微分方程描述 mL $\ddot{\theta} = -mg\sin\theta$ 当  $\theta_0 \le 5^\circ$ 时,  $\sin\theta \approx \theta$  **其解析解为**  $\theta(t) = \theta_0 \cos \omega t$ ,  $\omega = \sqrt{g/L}$ 

当 很大时,上述常微分方程没有解析解,必须借助数 值方法求解该方程,以描述单摆的运动。



# 一般地, n 阶常微分方程, 通过引入若干<mark>辅助函数</mark>可以写成 n 个耦合的一阶常微分方程。

以物理学中常见的一个常微分方程(用于描述一维运动粒子)为例

# 一组M个耦合的一阶常微分方程可表示为 $\frac{d\bar{y}}{dx} = \bar{f}(x, \bar{y}) \qquad \begin{array}{c} x & \mathcal{L} = \mathbf{f} \\ \bar{y} & \mathcal{L} = \mathbf{f} \\ \bar{y} & \mathcal{L} = \mathbf{f} \\ \mathbf{f} & \mathcal{L} \\ \mathbf{f} & \mathcal{L$

因此,只要详细地讨论一阶常微分方程的数值方法就可以了:  $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ 



# 常微分方程的分类

### 初值问题

给定待求函数在某 个初始点上的值

#### 边界值问题

在自变量的两个端点 上对待求函数施加约 束,如函数值约束、 导数值约束... 本征值问题 一类特殊的含有参数 的边值问题。只有在 参数取特定值时,方 程才有非零解

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x, y) \\ y\Big|_{x=a} = y_0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} y'' + \frac{\pi^2}{4}y + \frac{\pi^2}{4} = 0\\ y(0) = 0, \ y(1) = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0\\ \varphi(0) = \varphi(1) = 0 \end{cases}$$



# 初值问题的提法

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y \Big|_{x=a} = y_0 \end{cases} \implies y = y(x), \ x \in [a, b] \end{cases}$$

数值问题的提法:求节点 $x_k$ 处的近似值 $y_k$ ,步长 $h_k = x_{k+1} - x_k$ , 为了方便,常取h不变,这样N=(b-a)/h。



# 1) <mark>离散化:</mark> 将区间 [a, b] 分为 N 个等间隔的子区间,每个区间宽度为 *h*=(b-a)/N

2) 寻找一个递推关系: 把 y<sub>n</sub> 同 {y<sub>n-1</sub>, y<sub>n-2</sub>, ...} 联系起来。







# 例题1. 考虑下述常微分方程 (一阶常微分方程)和初值条件

	1   1		( )	
		Euler法		
ΞI	_ h	y (1)	y (3)	⊱h #
	0.500	143469	.011109	
与礼	0.200	046330	.006519	
解	0.100	021625	.003318	
	0.050	010453	.001665	
	0.020	004098	.000666	见Matlab程序
	0.010	002035	.000333	chapter2_exam
	0.005	001014	.000167	ple_1_Euler.m
	0.002	000405	.000067	
	0.001	000203	.000033	



# 牛顿动力学方程(二阶常微分方程)

-- 维运动粒子的方程为 
$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = f(x,t)$$
  
用欧拉法写出具体的递推关系  $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$   
 $\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \\ \frac{dp}{dt} = f(x,t) \end{cases}$   $\begin{cases} x_{n+1} = x_n + hp_n / m \\ p_{n+1} = p_n + hf(x_n, t_n) \end{cases}$ 

# 欧拉法的Matlab实现

dt





# 练习:推导三阶泰勒级数法

$$y_{n+1} = y_n + ?$$

$$y_{n+1} = y(x_n + h) = y_n + hy'_n + \frac{1}{2}h^2y''_n + \frac{1}{6}h^3y'''_n + O(h^4)$$

$$y_{n+1} = y_n + hf_n + \frac{1}{2}h^2[f_x + f_y f]_n + \frac{1}{6}h^3[f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_y(f_x + f_y f)]_n + O(h^4)$$



# 例题3. 考虑下述微分方程和初始条件 dy / dx = -xy; y(0) = 1

# 用Euler法与二阶泰勒级数法求解y(2)的值,采用不同的步长h,并与精确值比较,计算误差大小。

# 解答:方程的精确解为 $y = e^{-x^2/2}$ $y_{n+1} = y_n + hf_n + \frac{1}{2}h^2[f_x + f_y f]_n + O(h^3)$

$$= y_n - hx_n y_n + \frac{1}{2} h^2 [-y_n + x_n^2 y_n] + O(h^3)$$

#### 见Matlab程序 chapter2\_example\_3\_Euler\_Taylor.m

## 通常,建立微分方程的数值算法,有两条途径

(1) 用数值微分的两点公式  $\frac{y_{n+1} - y_n}{x_{n+1} - x_n}$  替代微分方程 左边的一阶微商;如Euler法。  $x_{n+1} - x_n$ 



(2)  $\mathcal{K}x \rightarrow x + k$ 积分恒等式y'(t) = f(t, y(t)),得

$$y(x+k) - y(x) = \int_{x}^{x+k} f(t, y(t)) dt$$
  
又 x=x<sub>n</sub>, k=h 有

$$y_{n+1} - y_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t, y(t)) dt$$

### 下面我们通过第二条途径推导其他数值算法





若以 $f_n$ ,  $f_{n-1}$ ,  $f_{n-2}$ ,  $f_{n-3}$  的拟合多项式来外插(四次Lagrange插 值), 得Adams-Bashforth四步法  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (55 f_n - 59 f_{n-1} + 37 f_{n-2} - 9 f_{n-3}) + O(h^5)$ 

单单关于y<sub>0</sub>的值无法启动上述多步法,该方法的启动需要通过 其他方法(如Euler法,泰勒级数法等)获得多个f值。

例题4. 考虑下述微分方程和初始条件 dy / dx = -xy; y(0) = 1

用Adams-Bashforth二步法求解y(2)的值,采用不用的步长 h,并与精确值比较,计算误差大小。用Euler法或泰勒级 数法产生启动递推关系所需要的y值。

> 见Matlab程序 chapter2\_example\_4\_Adams\_Bashforth.m





在区间  $[x_n, x_{n+1}]$  上过  $f_{n, f_{n+1}}$  两点对 f 做线性插值,得

$$f = \frac{x - x_n}{h} f_{n+1} - \frac{x - x_{n+1}}{h} f_n + O(h^2)$$

带入积分公式 
$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx$$

得 
$$y_{n+1} = y_n + \frac{n}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})] + O(h^3)$$
  
上式中等号两边都有 $y_{n+1}$ 项,因此称为隐式法。

下面来推导一个典型的隐式法:*Adams-Moulton二步法* 对方程  $\frac{dy}{dx} = f(x,y)$  作一步精确积分  $y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y) dx$ 

Col

Imputational Physics

 Lagrange
 
$$\varphi_2(x) = y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) + y_2 l_2(x)$$

 二次插值:
  $l_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}$ 
 $l_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$ 
 $l_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$ 

 我们用  $f_{n-1}$ ,  $f_n$ 和  $f_{n+1}$  三点上作二次多项式插值

  $f = \frac{(x - x_n)(x - x_{n-1})}{2h^2} f_{n+1} - \frac{(x - x_{n+1})(x - x_{n-1})}{h^2} f_n$ 

 +  $\frac{(x - x_{n+1})(x - x_n)}{2h^2} f_{n-1} + O(h^3)$ 

 代入积分公式,  $M x_n \rightarrow x_{n+1}$ 上对f作积分,  $a$ 
 $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12} (5 f_{n+1} + 8 f_n - f_{n-1}) + O(h^4)$ 

Chenwei Jiang, Xi'an Jiaotong University, 2019

\_

# 同样方法用三次多项式插值,可得三步法公式 $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) + O(h^5)$

—— Adams-Moulton 三步法

# Adams-Moulton二步法与三步法都既是多步法又是隐式法 多步法:最初几个格点的启动值需要通过其它的方法如欧拉 法、泰勒级数法来获得

### 隐式法:不能直接使用,它通常用在预报校正算法中

先通过显式法"预报"一个 y<sub>n+1</sub>的值,然后利用隐式法来校正得到一个更精确的值。这样的算法有个优点,它可以持续监控积分的精度。





隐式法意味着在每一个积分步都必须解一个方程,会非常 耗时。

隐式算法的"预估-校正"思想可以帮助我们推导出著 名的Runge-Kutta方法。







(1) 隐式算法的预估-校正,多步法的启动都需要我们寻求
 一种高阶的单步算法。

(2) 要得到高阶方法的一个直接想法就是用Taylor展开, 但这必须计算 y 的高阶微商,而一般情况下,求 f(x,y) 的微商相当麻烦,因此需寻求一种不求高阶微商的方 法。





欧拉法就是用  $x_n$  点的斜率近似  $[x_n, x_n + 1]$ 区间的平均斜率  $K_{ave}$ 

 $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$ 



#### 改进的欧拉法 - 梯形公式

# 用 $x_n, x_{n+1}$ 两点斜率 $K_1$ 和 $K_2$ 的平均值来近似区间[ $x_n, x_{n+1}$ ] 的平均斜率

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2)$$







通过求不同点上的函数值,作线性组合,构造近似公式,把近似公式和解的Taylor展开式相比较,使其前面若干项相吻合,从而得到相应的高阶方法。

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^N \lambda_i K_i \qquad (\ref{eq:point_started})$$

其中  $\begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n) = f_n \\ K_i = f(x_n + hc_i, y_n + hc_i \sum_{i=1}^{i-1} a_{ij} K_j) & i = 2, 3, \cdots, N \end{cases}$ 参数 $\lambda_i, c_i, a_{ii}$ 选取的原则是要求(<sup>()</sup>)的右端在( $x_n, y_n$ )处作 Taylor展开后,按h的幂次重新整理  $\tilde{y}_{n+1} = y_n + d_1 h + \frac{1}{2!} d_2 h^2 + \frac{1}{3!} d_3 h^3 + \cdots$  **表示用** $y(x_n)$ 计算 **得到的近**似值 与微分方程的解y(x)在 $x_n$ 点处的Taylor展开式  $y(x_n + h) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \cdots$ 有尽可能多的项重合。



以计算两个函数值的情况为例  $y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{N} \lambda_i K_i$  $\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\lambda_1 K_1 + h\lambda_2 K_2 \\ K_1 = f(x_n, y_n) \end{cases}$  $K_{2} = f(x_{n} + hc_{2}, y_{n} + hc_{2}a_{21}K_{1})$ 现在来确定 $\lambda_1, \lambda_2, c_2, a_{21}$  $K_1 = f_n = y'(x_n)$ 二元函数的泰勒展开:

$$f(x_0 + h, y_0 + k) = f(x_0, y_0) + (h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y})f(x_0, y_0) + \frac{1}{2!}(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y})^2 f(x_0, y_0)$$
$$+ \dots + \frac{1}{n!}(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y})^n f(x_0, y_0) + \frac{1}{(n+1)!}(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y})^{n+1} f(x_0 + \theta h, y_0 + \theta_k)$$

$$K_{2} = f_{n} + hc_{2}(f_{x} + a_{21}ff_{y}) + O(h^{2})$$



 $\widetilde{y}_{n+1} = y_n + h\lambda_1 K_1 + h\lambda_2 K_2$  $= y_n + h\lambda_1 f_n + h\lambda_2 (f_n + hc_2 (f_x + a_{21}f_y)) + O(h^3)$  $= y_n + h(\lambda_1 + \lambda_2)f_n + h^2\lambda_2c_2(f_x + a_{21}f_y) + O(h^3)$  $y''(x_n) = f'|_{(x_n, y_n)} = f_x + f_y f'$  $y(x_{n+1})$ 在 $x_n$ 处作Taylor展开  $y_{n+1} = y(x_n + h) = y_n + hf_n + \frac{h^2}{2!}(f_x + f_y f) + O(h^3)$ 比较得  $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$ ,  $a_{21} = 1$ ,  $\lambda_2 c_2 = 1/2$ 显然,满足上述关系的 $\lambda_1, \lambda_2, c_2, a_{21}$ 有无穷多组。 选取  $\lambda_1 = \lambda_2 = 1/2, \quad a_{21} = 1, \quad c_2 = 1$ 



$$\begin{array}{c} \downarrow \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}K_1 + \frac{h}{2}K_2 + O(h^3) \\ K_1 = f(x_n, y_n) & \text{Euler法的梯形公式} \\ K_2 = f(x_n, y_n) & \square \Re \text{Runge-Kutta法} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \textbf{453} \textbf{4} \textbf{5} \textbf{5} \textbf{6} \textbf{7} \textbf{7} \\ \textbf{5} \textbf{7} \textbf{7} \textbf{7} \textbf{7} \\ \textbf{6} \textbf{7} \textbf{7} \\ \textbf{7} \textbf{7} \textbf{7} \\ \textbf{7$$



# 二阶Runge-Kutta法与二阶泰勒级数法比较

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}K_1 + \frac{h}{2}K_2 + O(h^3) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1) \end{cases}$$
$$y_{n+1} = y_n + hf_n + \frac{1}{2}h^2[f_x + f_y f]_n + O(h^3)$$

# 可以看出,相比二阶泰勒级数法而言,二阶Runge-Kutta法适用性更广,使用也更为方便。



# 三阶Runge-Kutta法

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\lambda_1 K_1 + h\lambda_2 K_2 + h\lambda_3 K_3 \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + hc_2, y_n + hc_2 a_{21} K_1) \\ K_3 = f(x_n + hc_3, y_n + hc_3 a_{31} K_1 + hc_3 a_{32} K_2) \end{cases}$$
**元函数的泰勒展开:**

$$f(x_0 + h, y_0 + k) = f(x_0, y_0) + (h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y})f(x_0, y_0) + \frac{1}{2!}(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y})^2 f(x_0, y_0)$$
$$+ \dots + \frac{1}{n!}(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y})^n f(x_0, y_0) + \frac{1}{(n+1)!}(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y})^{n+1}f(x_0 + \theta h, y_0 + \theta_k)$$
$$K = f + hc_0(f + a_0(f)) + \frac{1}{n!}h^2c^2(f - a_0^2)f^2(f)$$

$$K_{2} = f_{n} + hc_{2}(f_{x} + a_{21}ff_{y}) + \frac{1}{2}h^{2}c_{2}^{2}(f_{xx} + a_{21}^{2}f_{n}^{2}f_{y}) + 2a_{21}f_{n}f_{xy}) + O(h^{3})$$



 $K_{3} = f_{n} + hc_{3}(f_{x} + a_{31}f_{y} + a_{32}K_{2}f_{y}) + \frac{1}{2}h^{2}c_{3}^{2}[f_{xx} + a_{31}f_{y} + a_{32}K_{2}f_{y}] + \frac{1}{2}h^{2}c_{3}F_{y} + \frac{1}{2}h^{2}c_{3}F_{y}] + \frac{1}{2}h^{2}c_{3}F_{y} + \frac{1}{2}h^{2}c_{3}F_{y} + \frac{1}{2}h^{2}c_{3}F_{y}] + \frac{1}{2}h^{2}c_{3}F_{y}$  $(a_{31}f + a_{32}K_2)^2 f_{yy} + 2(a_{31}f + a_{32}K_2)f_{xy}] + O(h^3)$ 将上式中的K<sub>2</sub>替换掉,注意略去导致最终展开式中的O(h<sup>4</sup>)项  $\overline{y_{n+1}} = \overline{y_n} + h\lambda_1 \overline{K_1} + h\lambda_2 \overline{K_2} + h\lambda_3 \overline{K_3}$  $= y_n + h\lambda_1 f_n + h\lambda_2 [f_n + hc_2(f_x + a_{21}f_y) + \frac{1}{2}h^2 c_2^2 (f_{xx} + a_{21}^2 f_n^2 f_{yy})$  $+2a_{21}f_nf_{xy})]+h\lambda_3\{f_n+hc_3(f_x+a_{31}f_y+a_{32}K_2f_y)+\frac{1}{2}h^2c_3^2[f_{xx}+a_{32}K_2f_y)+\frac{1}{2}h^2c_3^2[f_{xx}+a_{32}K_2f_y)+\frac{1}{2}h^2c_3^2[f_{xx}+a_{32}K_2f_y)+\frac{1}{2}h^2c_3^2[f_{xx}+a_{32}K_2f_y)+\frac{1}{2}h^2c_3^2[f_{xx}+a_{32}K_2f_y)+\frac{1}{2}h^2c_3^2[f_{xx}+a_{32}K_2f_y)+\frac{1}{2}h^2c_3^2[f_{xx}+a_{32}K_2f_y)+\frac{1}{2}h^2c_3^2[f_{xx}+a_{32}K_2f_y)+\frac{1}{2}h^2c_3^2[f_{xx}+a_{32}K_2f_y)+\frac{1}{2}h^2c_3^2[f_{xx}+a_{32}K_2f_y]+\frac{1}{2}h^2c_3^2[f_{xx}+a_{$  $(a_{31}f + a_{32}K_2)^2 f_{yy} + 2(a_{31}f + a_{32}K_2)f_{xy}] + O(h^4)$  $y(x_{n+1})$ 在 $x_n$ 处作Taylor展开  $y_{n+1} = y_n + hf_n + \frac{1}{2}h^2[f_x + f_y f]_n +$  $+\frac{1}{6}h^{3}[f_{xx}+2f_{xy}f+f_{yy}f^{2}+f_{y}(f_{x}+f_{y}f)]_{n}+O(h^{4})$ 

5

$$\begin{array}{c} & \label{eq:linear_li$$



# 经典四阶R-K方法(略去繁琐的推导) $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) + O(h^5)$ $\begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) \end{cases}$ $K_{3} = f(x_{n} + \frac{h}{2}, y_{n} + \frac{h}{2}K_{2})$ $K_{4} = f(x_{n} + h, y_{n} + hK_{3})$

# 通常认为四阶R-K法在效率和精度间达到了最好的平衡!



### 注:

龙格-库塔法的主要运算在于计算 K<sub>i</sub> 的值,即计算 f 的 值。Butcher 于1965年给出了计算量与可达到的最高精 度阶数的关系:

每步须算K <sub>i</sub> 的个数	2	3	4	5	6	7	$n \ge 8$
可达到的最高精度	$O(h^2)$	$O(h^3)$	$O(h^4)$	$O(h^4)$	$O(h^5)$	$O(h^6)$	$O(h^{n-2})$

④ 由于龙格-库塔法的导出基于泰勒展开,故精度主要受解函数的光滑性影响。对于光滑性不太好的解,最好采用低阶算法而将步长h取小。


## 例 45: 写出用4阶经典R-K法求初值问题 $\begin{cases} y' = 8 - 3y \\ y_0 = y(0) = 2 \end{cases}$ 的计算公式。并取步长 h=0.2, 计算y (0.4)的近似值

先获得递推关系式 f(x, y) = 8 - 3y $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$  $K_1 = f(x_n, y_n) = 8 - 3 y_n$  $K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) = 8 - 3(y_n + \frac{h}{2}K_1) = 5.6 - 2.1y_n$  $K_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2) = 8 - 3(y_n + \frac{h}{2}K_2) = 6.32 - 2.37y_n$  $K_4 = f(x_n + h, y_n + hK_3) = 8 - 3(y_n + hK_3) = 4.208 - 1.578 y_n$  $y_{n+1} = 1.2016 + 0.5494 y_n$ 



#### $y_{n+1} = 1.2016 + 0.5494 y_n$

 $y_1 = 1.2016 + 0.5494 y_0 = 1.2016 + 0.5494 \times 2 = 2.3004$ 

 $y_2 = 1.2016 + 0.5494y_1 = 1.2016 + 0.5494 \times 2.3004 = 2.4654$ 

逐点求解(即程序计算采用的方法) f(x, y) = 8 - 3y $K_{11} = f(x_0, y_0) = 8 - 3y_0 = 2$  $K_{21} = f(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2}K_{11}) = 8 - 3(y_0 + \frac{h}{2}K_{11}) = 8 - 3(2 + \frac{0.2}{2} \times 2) = 1.4$  $K_{31} = f(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2}K_{21}) = 8 - 3(y_0 + \frac{h}{2}K_{21}) = 8 - 3(2 + \frac{0.2}{2} \times 1.4) = 1.58$  $K_{41} = f(x_0 + h, y_0 + hK_{31}) = 8 - 3(y_0 + hK_{31}) = 8 - 3(2 + 0.2 \times 1.58) = 1.052$  $y_1 = y_0 + \frac{h}{6}(K_{11} + 2K_{21} + 2K_{31} + K_{41})$  $= 2 + \frac{0.2}{6} \times (2 + 2 \times 1.4 + 2 \times 1.58 + 1.052) = 2.3004$ 

$$f(x, y) = 8 - 3y$$

$$K_{12} = f(x_1, y_1) = 8 - 3y_1 = 8 - 3 \times 2.3004 = 1.0988$$

$$K_{22} = f(x_2 + \frac{h}{2}, y_2 + \frac{h}{2}K_{12}) = 8 - 3 \times (y_1 + \frac{h}{2}K_{12})$$

$$= 8 - 3 \times (2.3004 + \frac{0.2}{2} \times 1.0988) = 0.76916$$

$$K_{32} = f(x_1 + \frac{h}{2}, y_1 + \frac{h}{2}K_{22}) = 8 - 3(y_1 + \frac{h}{2}K_{22})$$

$$= 8 - 3 \times (2.3004 + \frac{0.2}{2} \times 0.76916) = 0.868052$$

$$K_{42} = f(x_1 + h, y_1 + hK_{32}) = 8 - 3(y_1 + hK_{32})$$

$$= 8 - 3 \times (2.3004 + 0.2 \times 0.868052) = 0.5779688$$

$$y_2 = y_1 + \frac{h}{6}(K_{12} + 2K_{22} + 2K_{32} + K_{42}) = 2.4654$$





y(0.2) = 2.300792243y(0.4) = 2.465870525

H=0.200000 Y1=2.300400,Y2=2.465440

H=0.100000 Y1=2.172775,Y2=2.300773, Y3=2.395599,Y4=2.465850

H=0.050000 Y1=2.092861,Y2=2.172787, Y3=2.241580,Y4=2.300791, Y5=2.351755,Y6=2.395619, Y7=2.433374,Y8=2.465869

H=0.010000 Y1=2.019703,Y2=2.038824, Y3=2.057379,Y4=2.075386 Y5=2.092861,Y6=2.109820, Y7=2.126277,Y8=2.142248

见Matlab程序 chapter2\_example\_5\_RK.m



Chenwei Jiang, Xi'an Jiaotong University, 2019

4

## 常微分方程初值问题数值解法小结

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) + O(h^5) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) \\ K_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2) \\ K_4 = f(x_n + h, y_n + hK_3) \end{cases}$$

—— 四阶经典Runge-Kutta法



## 例6用Euler法、二阶泰勒级数法,Euler法的梯形公式以及 经典四阶Runge-Kutta法分别求解下述常微分方程



的数值解,取*h*=0.1,并与精确值比较。方程的解析解为:  $y = \sqrt{1 + 2x}$ 

> 见Matlab程序 chapter2\_example\_6\_Euler\_Taylor\_Tri\_RK.m



#### 高阶常微分方程总可以通过引入辅助变量,转化成一阶 常微分方程组,以两个方程组成的方程组为例

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y, z) \\ \frac{dz}{dx} = g(x, y, z) \\ y(a) = y_0 \\ z(a) = z_0 \end{cases}, \quad a \le x \le b$$

Euler公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n, z_n) \\ z_{n+1} = z_n + hg(x_n, y_n, z_n) \end{cases}$$



四阶经典Runge-Kutta公式  

$$\begin{pmatrix} y_{n+1} \\ z_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_n \\ z_n \end{pmatrix} + \frac{h}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

$$K_1 = \begin{pmatrix} f(x_n, y_n, z_n) \\ g(x_n, y_n, z_n) \end{pmatrix} \qquad K_1^{(1)} \overline{k} \overline{k} K_1 \text{ in } \overline{k} \rightarrow \widehat{k}_1 \overline{k}$$

$$K_2 = \begin{pmatrix} f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1^{(1)}, z_n + \frac{h}{2}K_1^{(2)}) \\ g(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1^{(1)}, z_n + \frac{h}{2}K_1^{(2)}) \\ g(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1^{(1)}, z_n + \frac{h}{2}K_1^{(2)}) \end{pmatrix}$$

$$K_3 = \begin{pmatrix} f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2^{(0)}, z_n + \frac{h}{2}K_2^{(2)}) \\ g(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2^{(1)}, z_n + \frac{h}{2}K_2^{(2)}) \\ g(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2^{(1)}, z_n + \frac{h}{2}K_2^{(2)}) \end{pmatrix}$$



**Computational Physics** 

#### • 例题7(高阶常微分方程的Runge-Kutta法求解)

#### 习题 2.5 下面两个耦合的一阶方程

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = p \; ; \; \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = -4\pi^2 y \tag{2.26}$$

确定了周期为1的简谐运动.通过把上面给出的各个单变量公式之一推广到这个二变量情形,以你选定的任何特定的初始条件积分方程组(2.26),并且考察系统在t取整数值时回到其初始状态的精度.

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) + O(h^5) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) \\ K_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2) \\ K_4 = f(x_n + h, y_n + hK_3) \end{cases}$$

chapter2\_example\_7\_erbianliang\_RK\_test\_1.m chapter2\_example\_7\_erbianliang\_RK\_test.m chapter2\_example\_7\_erbianliang\_RK\_test\_2.m chapter2\_example\_7\_erbianliang\_RK.m





**Computational Physics** 

## 例题7-2. 用Euler法和经典四阶R-K算法求解下述常 微分方程

$$\begin{cases} y^{"} - y^{"} = x & \textbf{其解析解为}: \\ y(1) = 8 & \\ y^{'}(1) = 7 & y = -\frac{x^{3}}{6} - \frac{x^{2}}{2} + 2.5x + 6e^{x-1} + \frac{1}{6} \\ y^{"}(1) = 4 & \\ y^{"}(1) = 4 & \\ y_{1} = y_{2} & y_{1} = y, \ y_{2} = y^{'}, \ y_{3} = y^{"} & \\ y_{1}^{'} = y_{2} & y_{1}(1) = 8 & \\ y_{2}^{'} = y_{3} & y_{2}(1) = 7 & \\ y_{3}^{'} = y_{3} + x & y_{3}(1) = 4 & \\ \end{cases}$$

chapter2\_example\_7\_2\_sanbianliang\_RK.m chapter2\_example\_7\_2\_sanbianliang\_RK\_test.m

#### <mark>例题7-</mark>纪知两个耦合的马达满足如下方程组:



初始条件为:t=0时,y1=1;dy1/dt=2;y2=0; dy2/dt=5; 利用经典四阶Runge-Kutta法求解上述方程组,画 出位移y1,y2和速率dy1/dt,dy2/dt随时间的演化 关系图。

chapter2\_example\_7\_3\_four\_x\_RK.m



## §4 收敛性与稳定性

### ▶ 1.收敛性

定义 若某算法对于任意固定的  $x = x_i = x_0 + i h$ , 当  $h \rightarrow 0$ (同时  $i \rightarrow \infty$ ) 时有  $y_i \rightarrow y(x_i)$ , 则称该算法是收敛的。 例: 就初值问题  $\begin{cases} y' = \lambda y \\ y(0) = y_0 \end{cases}$ 考察欧拉公式的收敛性。



# 例8:考察初值问题 $\begin{cases} y'(x) = -30y(x) \\ y(0) = 1 \end{cases}$ 在区间[0, 0.5]上的解。

分别用欧拉公式和改进的欧拉公式计算数值解(h=0.1)。

节点 x <sub>i</sub>	欧拉公式	改进欧拉法	精确解 $y = e^{-30x}$
0.0	1.0000	1.0000	1.0000
0.1	-2.0000	2.5000	4.9787×10 <sup>-2</sup>
0.2	4.0000	6.2500	2.4788×10 <sup>-3</sup>
0.3	-8.0000	1.5626×10 <sup>1</sup>	$1.2341 \times 10^{-4}$
0.4	1.6000×10 <sup>1</sup>	<b>3.9063×10</b> <sup>1</sup>	6.1442×10 <sup>-6</sup>
0.5	-3.2000×10 <sup>1</sup>	9.7656×10 <sup>1</sup>	3.0590×10 <sup>-7</sup>
What is wrong ??!			
见Matlab程序 chapter2_example_8_stable_Euler_tri.m chapter2_example_8_stable_Euler_tri_RK.m			

稳定性的另一个例子 Euler公式从向前差分公式获得,如果从其他差分形式出发 以对称差分(中心差分)近似  $f' \approx \frac{f_{+1} - f_{-1}}{2h}$ 来逼近 y' = f(x, y)中的导数,可得到由三项构成的一个递推关 系(二阶方法)

 $y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf(x_n, y_n) + O(h^3)$  多步法



取步长 *h*=0.2 or 0.1,  $y_0 = 1$ ,  $y_n = ?$   $y_1 = \begin{cases} e^{-h} \\ 1 - h + \frac{1}{2}h^2 + O(h^3) \end{cases}$ 分别用Euler法和上述多步法求解







#### 见Matlab程序 chapter2\_example\_9\_stable.m



## 定义 若某算法在计算过程中任一步产生的误差在以后 的计算中都逐步衰减,则称该算法是绝对稳定的。

#### 一般分析时为简单起见,只考虑试验方程



对于给定步长h>0,在计算 $y_n$ 时引入了误差 $\rho_n$ ,若这个误差在计算后面的 $y_{n+i}$  (i=1,2,...)中所引起的误差按绝对值均不增加,就说该数值方法对于这个步长h和 $\lambda$ 常数是绝对稳定的。为保证方法的绝对稳定,步长h和 $\lambda$ 就有其相应的允许范围,称其为该方法的绝对稳定区域。



## 以Euler方法为例 $y_{n+1} = y_n + \lambda h y_n$

误差方程  $\rho_{n+1} = \rho_n (1 + \lambda h)$   $\rho_{n+1} / \rho_n = 1 + \lambda h$ 

绝对稳定区域  $|1 + \lambda h| \leq 1$ 

对于例8中的存在的误差增大现象, $\lambda = -30$ 绝对稳定区域为  $|1-30h| \le 1$  →  $0 \le h \le 1/15$ h=0.1显然不在其绝对稳定区域内,可尝试h=0.05 在例9中,当我们使用中心差分推得的递推公式时,

$$y_{n+1} = y_{n-1} - 2hy_n$$







**Computational Physics** 

以经典R-K法为例,应用于实验方程
$$\frac{dy}{dx} = \lambda y \hat{n}$$
  

$$\begin{cases}
k_1 = \lambda y_n \\
k_2 = (\lambda + \frac{1}{2}h\lambda^2)y_n \\
k_3 = (\lambda + \frac{1}{2}h\lambda^2 + \frac{1}{4}h^2\lambda^3)y_n
\end{cases}
\begin{cases}
y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) + O(h^5) \\
K_1 = f(x_n, y_n) \\
K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) \\
K_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2) \\
K_4 = f(x_n + h, y_n + hK_3)
\end{cases}
k_4 = (\lambda + h\lambda^2 + \frac{1}{2}h^2\lambda^3 + \frac{1}{4}h^3\lambda^4)y_n$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) = [1 + (h\lambda) + \frac{(h\lambda)^2}{2!} + \frac{(h\lambda)^3}{3!} + \frac{(h\lambda)^4}{4!}]y_n$$
相应的误差为:  $\rho_{n+1} = [1 + (h\lambda) + \frac{(h\lambda)^2}{2!} + \frac{(h\lambda)^3}{3!} + \frac{(h\lambda)^4}{4!}]\rho_n$ 



由稳定性要求 | ρ<sub>n+1</sub> |≤| ρ<sub>n</sub> |,于是得绝对稳定区域为:  $|1 + (h\lambda) + \frac{(h\lambda)^{2}}{2!} + \frac{(h\lambda)^{3}}{3!} + \frac{(h\lambda)^{4}}{4!} \leq 1$ 当λ为负实数时,可得绝对稳定区域:-2.78 < λh < 0, 因此,当2的绝对值较大时,步长h限制很大,即h必须 很小才能保证算法稳定性.

## 以例8为例求经典四阶R-K算法的绝对稳定区域

见Matlab程序 chapter2\_example\_8\_RK.m chapter2\_example\_8\_stable\_Euler\_tri\_RK.m



## Matlab中的常微分方程求解指令

- ode45解非刚性微分方程,中等精度,使用Runge-Kutta法的四、 五阶算法。
- ode23解非刚性微分方程,低精度,使用Runge-Kutta法的二、 三阶算法。
- ode113解非刚性微分方程, Adams-Bashforth-Moulton PECE法。
- ode23t解中等的刚性微分方程,使用自由内插法的梯形法则。
- ode15s解刚性微分方程,使用可变阶次的数值微分(NDFs) 算法。
- ode23s解刚性微分方程,低阶方法,使用修正的Rosenbrock 公式。
- ode23tb解刚性微分方程,低阶方法,使用TR-BDF2方法.

注:常微分方程分为"刚性的"和"非刚性的"。刚性的是指其 Jacobian矩阵的特征值相差十分悬殊。二者对步长选择的要求不同。



ode45的使用步骤: (1)编写计算导数的M函数文件,该函数的输出量是"一 阶导数向量Y'',输入量是自变量和函数量Y;函数体描述 一阶方程组右边的表达式。 (2) 给定解方程的条件与要求 (3)调用指令求解并处理结果 ode45命令使用的语句格式如下: (其余指令用法类似) [T,Y]=ode45(odefun,tspan,y0,options), 其中

odefun为要求解的常微分方程的函数句柄; tspan为单调递增或递减的积分区间,如[1,8]; y0为初始条件矢量,其中矢量元素的排列顺序要求与函数 中的元素顺序一致;



options为用odeset建立的优化选项,可以略去采用默认选项 T是输出的时间列矢量,矩阵Y的每个列矢量是解的一个分 量。

例6.用Matlab自带指令求解下述常微分方程

$$\begin{cases} y' = y - \frac{2x}{y} & 0 \le x \le 1\\ y(0) = 1 \end{cases}$$

的数值解,并与精确值比较。方程的解析解为:

$$y = \sqrt{1 + 2x}$$

见Matlab程序 chapter2\_example\_6\_Matlab.m



#### · 例题7用Matlab自带指令求解下述常微分方程

习题 2.5 下面两个耦合的一阶方程

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = p \; ; \\ \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = -4\pi^2 y \tag{2.26}$$

确定了周期为1的简谐运动.通过把上面给出的各个单变量公式之一推广到这个二变量情形,以你选定的任何特定的初始条件积分方程组(2.26),并且考察系统在t取整数值时回到其初始状态的精度.

见Matlab程序 chapter2\_example\_7\_erbianliang\_Matlab.m



#### 例题7-2. 用Matlab自带指令求解下述常微分方程





四、动力学中的有序和混沌

### 例 1. 强迫钟摆

一根长度为丨的钟摆被限制在一垂直的平 面内,在强迫外力 f<sub>d</sub> 和阻力 f<sub>r</sub> 的作用下 振荡运动。钟摆的运动可以通过 Newton 方程来描述

$$ma = f_g + f_d + f_r$$

其中  $f_g = -mg \sin\theta$  是重力在运动方向 的分力 ,  $a = l d^2 \theta/dt^2$  是沿切线方向的 加速度 ,  $\theta$  是杆和垂线的夹角。



假设强迫外 力为 
$$f = f_d^0 cos \omega_0 t$$

阻力为 
$$f_r = -kv = -kl \frac{d\theta}{dt}$$

那么 Newton 运动方程就可以写成如下形式

$$\frac{d^{2}\theta}{dt^{2}} + q\frac{d\theta}{dt} + \sin\theta = b\cos\omega_{0}t$$
其中  $q = \frac{k}{m}, b = \frac{f_{d}^{0}}{ml}$ 
微分方程降
阶

并且取 (l/g)<sup>1/2</sup> 为时间单位。

设 
$$x_1 = \theta, x_2 = \frac{d\theta}{dt}$$

#### 该运动方程就可以化为一阶方程组

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = x_2\\ \frac{dx_2}{dt} = -qx_2 - \sin x_1 + b\cos \omega_0 t \end{cases}$$

#### 利用四阶RK算法求解上述方程组

见Matlab程序 DrivenPendulum.m



#### 见Matlab程序 驱动单摆的角度与角速度随时间的变化关系 DrivenPendulum case2.m 4 角度 2 角速度 杆和垂线的夹角、角 0 速度随时间演化过程 -2 -4 5 15 25 30 35 45 Π 10 20 40 50 角度-角速度相图 2 1 0 角速度与夹角的轨迹 -1 -2 L -2.5 -2 -1.5 -0.5 0.5 1.5 2 2.5 -1 n 1

q=0,b=0, t=50,初始角度为160°。即无驱动,无阻尼,大角 度释放的情况。

#### 显然钟摆运动不再是简谐运动,但仍是周期运动。

#### 初始角度与周期的关系如何?



#### 见Matlab程序 dirven\_pendulum\_duration.m dirven\_pendulum\_duration2.m

#### 当初始摆角为180°时,单摆的运动如何?



单摆做旋转运动,由初速度决定运动状态

见Matlab程序 DrivenPendulum\_case3.m



q=0.2,b=0, ω<sub>0</sub> =2/3, t=50。即无驱动,有阻尼的情况。

在这种情况下,钟摆运动将逐步变慢直到停止。



q=0.5,b=0.9, ω<sub>0</sub> =2/3, t=100。即小驱动,有阻尼的情况。

#### 在这种情况下,钟摆运动将逐步稳定于一个有序的周期运动



q=0.5, b=1.15, ω<sub>0</sub>=2/3, t=1000,即大驱动,有阻尼的情况。

在这种情况下钟摆运动是一个无序运动,呈现出分形的特征 无阻尼,大驱动情况的结果如何?




$$\Rightarrow m = 1, k = -4\pi^2$$

采用降阶处理,运  
动方程化为:  
$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = p / m = p \\ \frac{dp}{dt} = -kx = -4\pi^2 x \end{cases}$$

### 上述方程对应于一个周期为1的简谐振动。

## 利用四阶Runge-Kutta算法可以数值求解运动方程

#### 见Matlab程序

chapter2\_harmonic\_oscillator\_RK.m

# 例3. 简谐振子的受迫振动



其精确解为:  $x = A\cos(\omega_0 t + \phi) + A'\cos\omega_p t$ 

其中: 
$$A' = \frac{f}{\omega_0^2 - \omega_p^2}$$

# 无阻尼时



#### 见Matlab程序

chapter2\_driven\_harmonic\_oscillator\_RK.m







chapter2\_driven\_harmonic\_oscillator\_RK\_damp.m

# 第二次作业 阻尼斜抛运动的数值求解

研究受空气阻力作用的斜抛运 动。设抛体质量为m,初速度 为v<sub>0</sub>,受空气阻力的大小R与速 度v的n次方成正比,即R=bv<sup>n</sup>, 其中b是阻尼系数。



将抛体视为质点,根据牛顿运动定律,抛体的运动微分方程 可以写为

$$m\frac{d^2r}{dt^2} = -m\overline{g} - bv^n\frac{v}{v} = -m\overline{g} - bv^{n-1}\overline{v}$$

#### 以抛出点为原点建立直角坐标系,Ox沿水平方向,Oy沿垂 直向上。则上述运动方程可以化为

Chenwei Jiang, Xi'an Jiaotong University, 2019



**Computational Physics** 





Chenwei Jiang, Xi'an Jiaotong University, 2019



$$y_1 = 0; y_2 = \frac{dx}{dt} = 30; y_3 = 0; y_4 = \frac{dy}{dt} = 50$$

求以下情况中抛体的运动轨迹

(1)b=0,即没有阻尼的情形;
(2)有阻尼,n=1的情形;
(3)有阻尼,n=2的情形;

Chenwei Jiang, Xi'an Jiaotong University, 2019

