

文章编号: 1000\_0887(2005) 04\_0497\_08

# 基于系数逼近的差分格式

牟宗泽, 龙永兴, 曲文孝

(核工业西南物理研究院, 成都 610041)

(我刊原编委吴启光推荐)

**摘要:** 对于变系数微分方程, 在每个离散子区间上用函数去逼近系数比用一常数去代替系数, 所得到的一系列近似微分方程有更高的精度。通常的差分格式建立在解函数在子区间上的 Taylor 展开式的近似的基础上, 这样要求函数相对于网格是缓变的。而基于系数 Taylor 展开的近似式和局部基的引入, 使得方法能在子区间上精确表达比二次函数丰富得多的解函数。由此构造的差分格式能在子区间上反映解具有迅速变化(如边界层, 高振荡)的复杂的物理现象。数值实验(边值问题、特征值问题)显示了新方法比传统方法有更满意的效果。

**关键词:** 边值问题; 特征值; 系数逼近; 局部精确格式

**中图分类号:** TB115      **文献标识码:** A

## 引 言

通常, 变系数微分方程差分格式的建立过程大体分为两步: 第一步在离散子区间内对方程系数实施冻结(取中点处的值或作某种加权), 形成分段近似微分方程。其次, 对近似方程的各阶导数分别用相应差分代替, 形成以离散点上函数值为未知量的代数方程组。差分代替微分的过程是建立在解函数能用 Taylor 展开近似式表达的基础上。相对于网格长度而言, 它要求函数是缓变的。这就限制了传统方法的应用范围, 当它应用到解局部具有迅速变化的问题时, 会产生非物理振荡或生成过大的数值耗散使解发生畸变。解局部具有迅速变化(如, 边界层, 高振荡)的现象有着丰富的物理背景。寻求有效求解这些问题的新方法显得很有必要。对于边界层、高振荡问题的求解, WKB 法<sup>[1,2]</sup>是仅考虑大参数的解形为  $e^{S(x)}$  的近似解析方法。

基于微分方程系数函数逼近来构造差分的精度依赖于系数逼近的精度。第一步建立的分段近似方程通常都比传统方法精确。第二步引入局部基给出的差分格式是局部精确的, 即解满足子区域上的近似微分方程。值得强调的是方法不仅能反映解局部的迅速变化, 而且能表达解的形式比 WKB 丰富得多。下面给出几种系数逼近的模式, 并用于求解边值问题和特征值问题。数值实验显示新方法有很强的适应性, 特别能求解其它方法无法满意计算的问题。

收稿日期: 2003\_07\_16; 修订日期: 2004\_10\_15

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(19975016, 10135020)

作者简介: 牟宗泽(1940), 男, 四川人, 研究员(联系人. Tel: + 86\_28\_82932611; Fax: + 86\_28\_82932202; E\_mail: mouzz@swip.ac.cn)

# 1 系数逼近的几种典型模式

考虑变系数微分方程

$$y'(x) + p(x)y(x) + g(x)y(x) = 0 \quad (1)$$

不失一般性, 方程(1)可化为标准型

$$y'(x) = Q(x)y(x), \quad (2)$$

其边值问题记为

$$y'(x) = Q(x)y(x), \quad y(b_l) = \alpha, \quad y(b_r) = \beta \quad (3)$$

它的特征值问题表为

$$y'(x) = Q(x)y(x), \quad y(b_l) = 0, \quad y(b_r) = 0 \quad (4)$$

若微分方程  $Ly = f$  在求解区域上满足

$$y \in C^1 \left\{ Ly = f, \quad |y(b_l)| + |y(b_r)| \right\},$$

则近似方程解的精度与方程系数函数逼近的精度同阶. 在离散子区间  $D_n: [x_{n-1}, x_{n+1}]$  上, 用  $Q_n(x)$  逼近  $Q(x)$ , 若

$$Q_n(x) - Q(x) = O(h^k), \quad (5)$$

则有

$$y(x) - y_n(x) = O(h^k) \quad (6)$$

在子区间  $D_n$  上, 近似微分方程有两个线性无关的解  $y_1(x)$  和  $y_2(x)$ , 这样在子区间  $D_n$  上的函数可用这两个解作为局部基<sup>[3]</sup>表示为:

$$y(x) = \frac{1}{\Delta} (y_1(x) - y_1(x_n)) + \frac{2}{\Delta} (y_2(x) - y_2(x_n)) + y_n, \quad (7)$$

式中的  $\Delta$ ,  $y_1$ ,  $y_2$  可用行列式分别表为

$$\Delta = \begin{vmatrix} y_1(x_{n-1}) - y_1(x_n) & y_2(x_{n-1}) - y_2(x_n) \\ y_1(x_{n+1}) - y_1(x_n) & y_2(x_{n+1}) - y_2(x_n) \end{vmatrix}, \quad (8)$$

$$y_1 = \begin{vmatrix} y_{n-1} - y_n & y_2(x_{n-1}) - y_2(x_n) \\ y_{n+1} - y_n & y_2(x_{n+1}) - y_2(x_n) \end{vmatrix}, \quad (9)$$

$$y_2 = \begin{vmatrix} y_1(x_{n-1}) - y_1(x_n) & y_{n-1} - y_n \\ y_1(x_{n+1}) - y_1(x_n) & y_{n+1} - y_n \end{vmatrix} \quad (10)$$

将(7)式代入微分方程

$$Lny_n = 0 \quad (11)$$

得到

$$y_n - \frac{1}{\Delta} (y_1(x_n) - y_1(x_{n-1})) - \frac{2}{\Delta} (y_2(x_n) - y_2(x_{n-1})) = 0 \quad (12)$$

把方程(12)按未知量写成三对角形式

$$A_n y_{n-1} + B_n y_n + C_n y_{n+1} = 0, \quad (13)$$

其中

$$A_n = \frac{1}{\Delta} (y_1(x_n) - y_1(x_{n+1})) - \frac{2}{\Delta} (y_2(x_n) - y_2(x_{n+1})), \quad (14)$$

$$B_n = \frac{1}{\Delta} (y_1(x_{n+1}) - y_1(x_{n-1})) - \frac{2}{\Delta} (y_2(x_{n+1}) - y_2(x_{n-1})), \quad (15)$$

$$C_n = \frac{1}{\Delta} (y_1(x_{n-1}) - y_1(x_n)) - \frac{2}{\Delta} (y_2(x_{n-1}) - y_2(x_n)) \quad (16)$$

下面就系数逼近精度(5)式中 ( $k = 1, 2, 3$ ) 的几种模式分别讨论:

( )  $k = 1$  的模式

在  $D_n$  上系数取为常数, 变系数微分方程变为常系数微分方程<sup>[3~5]</sup> 近似方程分段有如下成对的局部基:

$$e^{x}, e^{2x}; \cos(mx), \sin(mx); e^x \cos(mx), e^x \sin(mx); \text{ etc} \quad (17)$$

将方程相应的局部基代入(14)~(16)式形成  $A_n, B_n, C_n$ , 然后生成三对角方程(13) 该模式在子区域上能精确表达以初等函数描述的解的迅速变化(如, 简单的指数形增长的边界层, 或高振荡)

( )  $k = 2$  的模式

在  $D_n$  上系数用一次函数逼近

$$Q_n(x) = E_n x + F_n, \quad (18)$$

其中

$$E_n = Q(x_n), \quad (19)$$

$$F_n = Q(x_n) - Q(x_n)x_n \quad (20)$$

作变换

$$u = E_n^{1/3}x + E_n^{-2/3}F_n, \quad (21)$$

令  $y(x) = Y(u(x))$ , 则原方程变为

$$Y(u) = uY(u) \quad (22)$$

在  $D_n$  上方程(22)有局部基 Airy 函数

$${}_1(x) = A_i(u(x)), \quad {}_2(x) = B_i(u(x)) \quad (23)$$

由此可得到形如(13)的三对角差分方程

整个区域上的解用分段 Airy 函数来连结 在子区域上方法既能描述快速增长(衰减)的解也能表达高振荡的解, 并能表达用二者组合得到的解

( )  $k = 3$  的模式

在  $D_n$  上系数用二次函数逼近  $Q(x)$ ,

$$Q_n(x) = E_n x^2 + F_n x + G_n \quad (E_n > 0), \quad (24)$$

其中

$$E_n = Q(x_n)/2, \quad (25)$$

$$F_n = Q(x_n) - Q(x_n)x_n, \quad (26)$$

$$G_n = Q(x_n) - Q(x_n)x_n + \frac{Q(x_n)}{2}x_n^2 \quad (27)$$

作变换

$$u = 4^{1/4} \left[ E_n^{1/4}x + \frac{F_n}{2}E_n^{-3/4} \right], \quad (28)$$

令  $y(x) = Y(u(x))$ , 在  $D_n$  上相应的近似微分方程变为

$$Y(u) = \left[ \frac{1}{4}u^2 + A \right] Y(u), \quad (29)$$

其中

$$A = \frac{G_n}{2}E_n^{-1/2} - \frac{F_n^2}{8}E_n^{-3/2} \quad (30)$$

在  $D_n$  上的两个局部基为抛物柱函数<sup>[6]</sup>

$${}_1(x) = e^{-u^2/4} M \left[ \frac{1}{2}A + \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}u^2 \right], \quad (31)$$

$${}_2(x) = u e^{-u^2/4} M \left[ \frac{1}{2}A + \frac{3}{4}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}u^2 \right], \quad (32)$$

这里  $M(a, b, z)$  为 Kummer 合流超几何函数 其参数取不同的值, 变量  $z$  作适当变换则 Kummer 函数变为贝塞尔、库仑波、误差、厄米特等函数或其它初等函数

在公式(24)中限制了  $E_n > 0$ , 若  $E_n < 0$  则公式(24)改写为

$$Q_n(x) = E_n x^2 + F_n x + G_n \quad (E_n < 0) \quad (33)$$

作类似讨论

由(31)、(32)式可构造出相应的三对角差分方程

( ) 其它模式

在子区域  $D_n$  上系数逼近还可采用(34)~(36)的任一模式

$$x^2 y + f_1(x) y + f_0(x) y = 0, \quad (34)$$

$$x y + f_1(x) y + f_0(x) y = 0, \quad (35)$$

$$y + f_1(x) y + f_0(x) y = 0 \quad (36)$$

在子区域  $D_n$  上用线性函数或二次函数或其它特殊形式来逼近系数  $f_0(x)$ 、 $f_1(x)$  后, 不难求得两个局部基, 从而构造出三对角差分方程

## 2 特征值问题

系数逼近法求解特征值问题也是非常有效的, 比传统方法用更少的离散点却能得到更精确的特征值 一般我们需要求解满足代数方程组系数行列式为零的解

$$\begin{vmatrix} B_1 & C_1 & & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & A_{N-1} & B_{N-1} \end{vmatrix} = 0 \quad (37)$$

另外, 有时利用递推方法求解更方便 先从  $n = 1$  的方程出发(注意到  $y_0 = 0$ ) 得到

$$y_1 = -\frac{C_1}{B_1} y_2 \quad (38)$$

将  $y_1$  代入  $n = 2$  的方程, 得到新方程

$$B_2^{\text{new}} y_2 + C_2 y_3 = 0, \quad (39)$$

依此类推,  $n = k - 1$  的方程可改写为

$$B_{k-1}^{\text{new}} y_{k-1} + C_{k-1} y_k = 0 \quad (40)$$

当  $n = N - 1$  时, 相应的方程则为

$$B_{N-1}^{\text{new}} y_{N-1} + C_{N-1} y_N = 0, \quad (41)$$

由于右端边界  $y_N = 0$ , 若要  $y_{N-1}$  为非零解则必有

$$B_{N-1}^{\text{new}} = 0 \quad (42)$$

从(42)式中可求得相应的特征值 特别地, 若每个子区间上局部基相同(即方程系数相同), 再由  ${}_1(x)$ 、 ${}_2(x)$  线性无关, 可导出

$${}_1(x_N) \quad {}_2(x_0) - {}_1(x_0) \quad {}_2(x_N) = 0 \tag{43}$$

递推也可从  $n = N - 1$  的方程开始直到  $n = 1$  的方程结束, 同样得到方程(43)

### 3 数值实验

比较中心差分法(简记 cd)、系数分段常数 ( $k = 1$ )、分段一次函数( $k = 2$ )、分段二次函数( $k = 3$ ) 的计算结果

#### 3.1 边值问题

##### 例 1

$$y(x) = (a^2x^2 + a)y(x), y(0) = 0, y(1) = 1 \tag{44}$$

问题有解

$$y(x) = c_1e^{ax^2/2} + c_2e^{ax^2/2}\text{erf}(\sqrt{ax}) \tag{45}$$

对  $a = 10, N = 11$ , 图 1 中比较了各种方法计算的误差 ( $E_r = |(\text{数值} - \text{精确}) / \text{精确}|$ )

随着参数  $a$  的增大, 中心差分的效果越差

注意到分段二次函数的计算是完全精确的<sup>[4]</sup>,

$$\begin{aligned} {}_1 &= e^{-x^2/2} M\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, ax^2\right] = e^{ax^2/2}, \\ {}_2 &= 4ax e^{ax^2/2} M\left[\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -ax^2\right] = e^{ax^2/2}\text{erf}(\sqrt{ax}) \end{aligned}$$

##### 例 2 Schrödinger 方程

$$y(x) + (a^2 - b^2z^2)y(x) = 0, y(-2) = \quad, y(2) = \tag{46}$$

方程(46) 有两个线性无关的解<sup>[6]</sup>,

$$y_{1,2} = \frac{z^{-1/2}e^{-bz^2/2}}{(1 - 1/2)}(bz^2)^{(1/2) \quad (1/4)} {}_1F_1\left[\frac{1}{2} - \frac{a^2}{4b^2} \quad \frac{1}{4}; 1 \quad \frac{1}{2}; bz^2\right], \tag{47}$$

${}_1F_1(a_1; b_1; x)$  为 Kummer 函数

取  $a = 4.9, b = 5, N = 21$  表 1 给出了例 2 的数值误差比较

表 1 例 2 的数值解误差比较

$x$	cd	$k = 1$	$k = 2$	$k = 3$
- 1. 782	5. 31E- 02	1. 88E- 01	2. 95E- 03	4. 88E- 15
- 1. 188	2. 04E- 01	4. 16E- 02	1. 29E- 01	4. 17E- 15
- 0. 594	3. 20E- 01	8. 30E- 02	2. 16E- 01	5. 59E- 15
0. 000	3. 60E- 01	8. 21E- 02	2. 13E- 01	5. 41E- 15
0. 594	3. 20E- 01	8. 30E- 02	2. 16E- 01	5. 59E- 15
1. 188	2. 04E- 01	4. 16E- 02	1. 29E- 01	5. 05E- 15
1. 782	5. 31E- 02	1. 88E- 01	2. 95E- 03	4. 76E- 15

##### 例 3

$$y(x) + {}_2x^{-4}y(x) = 0, y(1) = \quad, y(2) = \tag{48}$$

方程(48) 有解

$$y(x) = c_1x \cos\left(\frac{\quad}{x}\right) + c_2x \sin\left(\frac{\quad}{x}\right) \tag{49}$$

取  $\quad = 50, N = 51$  进行计算, 结果见图 2 系数逼近法的结果接近真解, 而中心差分的结果无论

解的数值大小或解函数变化的相位与真解相差甚远

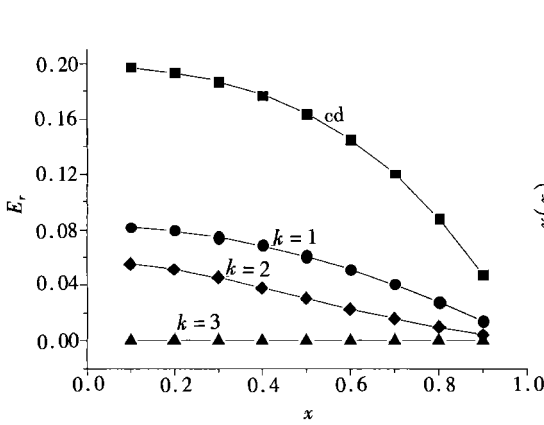


图1 例1的误差比较

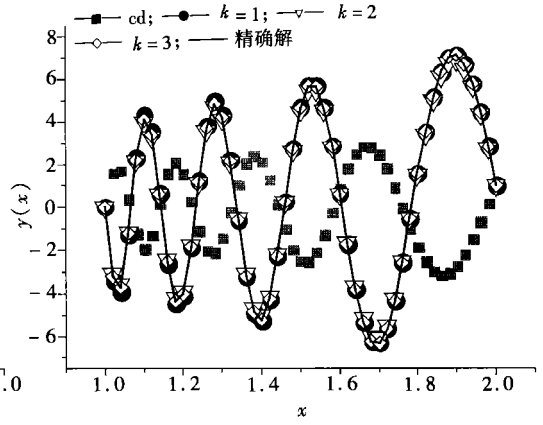


图2 例3的数值结果比较

下面就计算特征值问题作数值比较

### 3.2 特征值问题

#### 例4

$$y''(x) = -\lambda y(x), \quad y(0) = 0, \quad y(1) = 0 \tag{50}$$

其特征值的精确解是

$$\lambda_n = (n\pi)^2 \tag{51}$$

表2 用中心差分法计算例4的结果

内点数 $N$	步长 $h$	1	2	3	4
1	1/2	2.828 4			
2	1/3	3.000 0	5.196 2		
3	1/4	3.061 5	5.656 9	7.391 0	
4	1/5	3.090 2	5.877 0	8.090 2	9.511 0

用系数逼近法, 在子区间上有

$$y_1(x) = \cos(\sqrt{\lambda} x), \quad y_2(x) = \sin(\sqrt{\lambda} x) \tag{52}$$

将(52)代入(42), 导出

$$y_2(x_N) = 0 \tag{53}$$

也可通过行列式计算 无论内点取多少个, 同样都得到精确解

$$\lambda_n = (n\pi)^2$$

#### 例5

$$y''(x) + \lambda y(x) = 0, \quad y(0) = y(1) = 0 \tag{54}$$

精确解为

$$J_{1/3}\left(\frac{2}{3}\sqrt{\lambda}\right) = 0, \tag{55}$$

其中  $\lambda_1 = 18.956 3, \lambda_2 = 81.886 5, \lambda_3 = 189.220 9$

求前3个特征值, 取  $h = 1/5$ , 总离散点取6个进行计算  $k = 1$  的模式为求一四阶行列式等于零的解 即解

$$\begin{bmatrix} 4\cos\left(\frac{1}{5}\sqrt{\frac{2}{5}}\right) \cos\left(\frac{1}{5}\sqrt{\frac{2}{5}}\right) - 1 & & & \\ & 4\cos\left(\frac{1}{5}\sqrt{\frac{3}{5}}\right) \cos\left(\frac{1}{5}\sqrt{\frac{3}{5}}\right) - 1 & & \\ & & 4\cos\left(\frac{1}{5}\sqrt{\frac{4}{5}}\right) \cos\left(\frac{1}{5}\sqrt{\frac{4}{5}}\right) - 1 & \\ & & & 4\cos\left(\frac{1}{5}\sqrt{\frac{5}{5}}\right) \cos\left(\frac{1}{5}\sqrt{\frac{5}{5}}\right) - 1 \end{bmatrix} = 0$$

$$4\cos\left(\frac{1}{5}\sqrt{\frac{4}{5}}\right)\cos\left(\frac{1}{5}\sqrt{\frac{4}{5}}\right) = 0 \tag{56}$$

结果比较见表 3:

表 3 例 5 的计算结果

方法	1	2	3
cd	18.251 5	69.232 2	134.849 0
$k = 1$	18.962 0	82.147 9	195.865 0
$k = 2$	18.956 3	82.886 5	189.220 9

若用  $k = 2$  模式计算, 结果总是精确的, 与解(55) 式相同

例 6

$$y(x) + E(x + )^4 y(x) = 0, y(0) = y( ) = 0 \tag{57}$$

比较特征值的主要部分(前 3 个特征值) 的计算结果(取  $h = /5$ )

表 4 例 6 的特征值计算结果

方法	1	2	3
精确解	0.001 744	0.007 348	0.016 75
cd	0.001 676	0.006 215	0.013 14
$k = 1$ 模式	0.001 748	0.007 483	0.018 81
$k = 2$ 模式	0.001 770	0.007 453	0.016 98
$k = 3$ 模式	0.001 774	0.007 349	0.016 76
WKB	0.001 885	0.007 542	0.016 97

## 4 结 论

对变系数微分方程边值问题和特征值问题的数值求解, 我们有如下结论:

( ) 系数逼近法面对的分段近似微分方程的解, 比传统差分法面对的分段近似微分方程的解更精确

( ) 在子区间上系数逼近法构造的差分方程的解于对应的近似微分方程是精确的, 即局部精确 若在每个子区间上逼近系数与微分方程系数相同, 则差分方程得到精确解

( ) 传统差分的基础是解函数能作 Taylor 展开的近似表示, 它要求解相对于网格尺度是缓变的 若这个限制不满足, 数值解会呈现非物理振动或引起解的畸变

( ) 系数逼近法的基础是系数函数能作 Taylor 展开的近似表示, 对解函数未作限制, 其差分公式能在子区间上反映解的快速变化(如边界层, 高振荡问题)

( ) 在子区间上传统差分, 如中心差分能精确描述的是二次函数 系数逼近法能精确描述的可以是初等函数、各种复杂的特殊函数

( ) 系数逼近法对参数无限制, WKB 法对参数有限制, 如例 6, 对小的特征值系数逼近法求得的结果就比 WKB 法好

[参 考 文 献]

[1] Bendes C M, Orszag S A. 高等应用数学方法[M]. 李家春, 庄峰青, 王柏懿 译. 北京: 科学出版社, 1992, 552-591.

- [2] Nayfeh A H. Introduction to Perturbation Techniques [M]. New York: John Wiley & Sons, 1981, 360-366.
- [3] 牟宗泽, 龙永兴, 彭点云, 等. 常微分方程边值问题的局部精确数值方法[J]. 计算物理, 2000, 17(5): 565-572.
- [4] Sakai Katsuhiko. A new finite variable difference method with application to locally exact numerical scheme[J]. J Comput Phys, 1996, 124(2): 301-308.
- [5] Hwang Yao\_hsin. Higher order exponential difference schemes for the computations of the steady convection diffusion equation[J]. J Comput Phys, 1996, 129(1): 134-141.
- [6] Abramowitz Milton, Stegun Irene A. Handbook of Mathematical Functions [M]. New York: Dover Publications, 1988, 504-509.

## Difference Schemes Basing on Coefficient Approximation

MOU Zong\_ze, LONG Yong\_xing, QU Wen\_xiao

(Southwestern Institute for Physics, Chengdu 610041, P. R. China)

**Abstract:** In respect of variable coefficient differential equations, the equations of coefficient function approximation were more accurate than the coefficient to be frozen as a constant in every discrete subinterval. Usually, the difference schemes constructed based on Taylor expansion approximation of the solution don't suit the solution with sharp function. Introducing into local bases to be combined with coefficient function approximation, the difference can well depict more complex physical phenomena, for example, boundary layer as well as high oscillatory, with sharp behavior. The numerical test shows the method is more effective than the traditional one.

**Key words:** boundary value problem; eigenvalue; coefficient approximation; local exact scheme