常微分方程初值问题的数值解法

C. W. 吉尔 著

费景高 刘德贵 高永春 译

科 学 出 版 社

内 容 简 介

本书系统地阐述了常微分方程初值问题的数值解法，如单步方法、多步方法、外插方法和多值方法等．详细讨论了它们的稳定性、收敛性、误差估计、步长和阶的选取．特别研究了当前受到普遍重视的Stiff方程问题．本书根据Stiff方程的基本困难，提出了一些克服的方法．

书中还附了三个用FORTRAN语言编写的程序．

本书可供计算工作者、有关的工程技术人员、高等院校计算数学专业的教师、学生参考，亦可供数值分析研究人员参考．

C. W. Gear

NUMERICAL INITIAL VALUE PROBLEMS IN ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS

Prentice-Hall, Inc. 1971

常微分方程初值问题的数值解法

C. W. 吉尔 著

费景高 刘德贵 高永春 译

*

科学出版社 出版

北京朝阳门内大街137号

上海新华印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1978年7月第一版 开本：787×1092 1/32

1978年7月第一次印刷 印张：9 1/2

印数：0001—46,600 字数：216,000

统一书号：13031・718

本社书号：1032・13—1

定价： 1.00 元

目　　录

1. 导 论

1.1. 要解决的问题

理论物理学家或化学家在用周围世界的模型进行研究工作上，花费了大量的时间．一个模型常常给成为一些变量的数学描述，其中有些变量是确实存在的，并且是可测的(如压力)，而另外一些变量可能仅仅是假定的（如一个新粒子的特征）．这些模型往往是常微分方程组，其中独立变量是时间，而因变量是物理变量．通过变量的代换，或者由于处在平衡状态的系统的解是与时间无关的，所以有时独立变量可以是一个物理变量．但是在本书中，我们将处处称时间为独立变量．下面要讨论的方法都不依赖时间的任何特殊性质，所以读者应准备用 x 来代替空间或者代替适合他所需要的量．

构造好模型，还要做两件事．首先，必须对它进行检验．这要求实验员在实验室做试验，将模型的运动状况与试验中观察到的结果相比较．其次根据对模型的运动进行的研究，理论工作者希望预估客观世界的变化．这些常微分方程除了很少情形能直接积分外，在要求得到一些数据的情况下，它们的积分要靠数值计算员来完成．假定刚好向我们提出了一对方程

$$\begin{cases} y' = (p - tq)y - z, \\ z' = y, \end{cases} \tag{1.1}$$

其中 y' 表示 dy/dt．在我们用计算机来计算之前，必须向物理学家提出哪些问题？而我们自己又一定要考虑哪些问题？

开始积分之前，我们必须得到为了确定一个问题的足够的信息．方程（1.1）含有二个未知常数 p 和 q，称之为参数，

而且必须知道它们的值．如果问题是要将试验结果与对 p 和 q 的各种值的数值积分结果进行比较，从根本上确定这些参数，可能要做大量的积分．也许需要研究更好的方法．这样一类问题放到倒数第二章来讨论；我们首先假定所有的参数均已给出．

考虑方程

$$\begin{cases} y' = z, \\ z' = -y, \end{cases} \tag{1.2}$$

它们有解：

$$\begin{cases} y = A\sin(t+\alpha), \\ z = A\cos(t+\alpha), \end{cases} \tag{1.3}$$

其中有两个积分常数 A 和 α．一般说来，N 个一阶方程的组有 N 个积分常数．如果我们要提供数值解，也就是对 t 的一些值计算 $y(t)$ 和 $z(t)$ 的值，那么，为了确定这些积分常数，必须给出足够的信息．如果因变量 y 和 z 的值给定在称为初值 t_0 的 t 的一个值上，一般来说，解就确定了(我们假定已作了一个变换，使 $t_0=0$． 这不会影响问题或者所要讨论的方法)．确定 y 和 z 在未来时刻 t 上的值的问题叫作初值问题．另外，因变量的一些值可以给定在若干个不同的 t 值上，这叫作边值问题．这问题的最普通的形式是两点边值问题，其中函数值给在 t 的二个值上，比如 o 和 b．如果有 N 个一阶微分方程，且有 M 个因变量在 $t=0$ 给定，则 $N-M$ 个值必须给定在 $t=b$ 上．在一些条件下，这将会得到一个解．

微分方程组的积分是一族曲线． 例如，$y'=y$ 的积分为 $y=ce^t$，它是图 1.1 所表示的曲线族． 选取初值是为了从族中选择一条曲线．如果积分常数多于一个，要画出解族就困难了．但是我们能够用考虑方程(1.2)的解族(1.3)来说明两

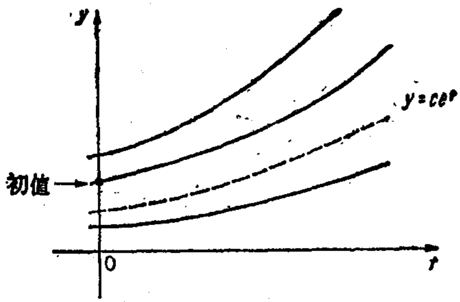

图 1.1. 一阶微分方程解族

点边值问题.如果 y 的值在 $t=0$ 给定，于是 z 在 $t=0$ 的不同的初值将给出图 1.2 所示的不同解组成的较小的族. 如果 y 在另外一个时刻 $t=b$ 给定,这个值足够用来选取所需要的族中的曲线. 在这个例子中，如果我们已选好 $y(0)=0$ 和 $b=\pi$, 则对 z 的不同的初值,会得到图 1.3 所示的曲线族.在这种情形，指定 $y(\pi)$ 的值，不能得到完全确定的问题. 当 $y(\pi)=0$ 时，有无限多个解；而当 $y(\pi)\neq 0$ 时，没有解. 因此，我们看到边值问题不总是有唯一解的. 初值问题也是这样,但幸而还能够给出关于初值问题具有唯一解的适当准则.由于处理两点边值问题的方法类型不同，我们只讨论关于初值问题的方法.

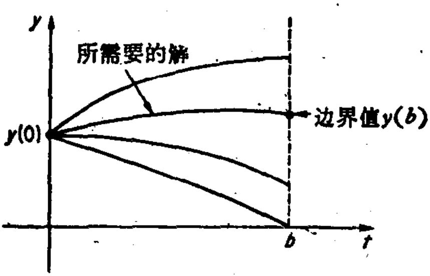

图 1.2. 两点边界值问题

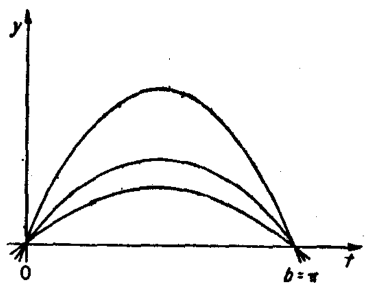

图 1.3. 没有唯一解的两点边值问题

有了确定所要求的解的充分材料之后，物理学家必须提出解的精度要求，用这个精度确定使用的方法，而且还要用它核对所提供的初值和参数的精度．虽然假定参数是准确的，但还要研究初值中的误差的影响．方程 $y' = y$ 的解族在图 1.1 中给出．由于初值误差使得选取了一个错误的解(假定因为初值误差得到的是虚线所表示的解而不是实线所表示的)，则随着时间增加，曲线之间的差也增加．在这个例子中，以因子 e^t 的速度增加．我们称这种现象为方程的不稳定性．另一方面，若有方程 $y' = -y$，我们得到由图 1.4 所示的解族．在这种情形，当 t 增加时误差减小．这种现象称为方程的稳定性．如果初值给在 $t = 0$ 上，积分积到 $t = b$，则最终的误差是初始误差的 e^{-b} 倍．对于微分方程 $y' = \lambda y$，其中 λ 是给定的，则误差增长 $e^{\lambda b}$ 倍．如果 $\lambda \leqslant 0$，初值误差没有增加，于是方程是稳定的．如果 $\lambda > 0$，则方程不稳定．

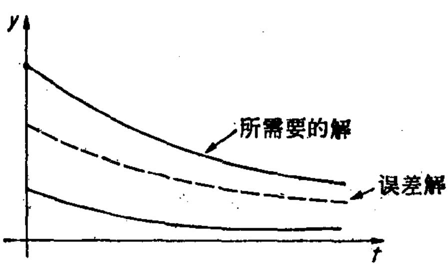

图 1.4. 稳定的解族

显然，我们能够得到的精度部分地被初值的精度所限制．类似地，精度也将被参数中的误差所限制．一部分积分工作可以用来确定由这些误差所引起的解中的误差．假使我们能够直接积分方程，对所有可能的初值得到的解族进行考察，就能够做到这一点．但是，如果不能找到显式解，而用数值解，那么这个数值解将引进附加的误差．所能获得的最大精度将

被初值误差所限制.

虽然可以认为我们已经有求解方程的足够的信息，但是在开始数值积分之前，还必须考虑解的存在性.许多数值方法均会得到一些数据，但是如果问题没有解，这些数据显然是毫无意义的.特别，必须保证方程具有唯一的解.一个通常的定理如下:

定理 1.1. 假设有微分方程 $y' = f(y, t)$，其中 $f(y, t)$在区域 $0 \leqslant t \leqslant b$ 中连续，并且存在常数L，使得

$$|f(y, t) - f(y^*, t)| \leqslant L\|y - y^*\|$$

对所有 $0 \leqslant t \leqslant b$ 和所有 y, y^* 均成立（这叫作 Lipschitz 条件，L 叫作 Lipschitz 常数)，于是存在唯一的连续可微函数 $y(t)$，满足

$$y'(t) = f(y(t), t) \tag{1.4}$$

及初始条件 $y(0) = y_0$.

这个定理的证明可以在大多数关于常微分方程的书中找到，例如，见 Ince (1956)，第三章.

这里不要求 $f(y, t)$ 是可微的，但是，如果它是可微的，则 Lipschitz 条件保证有 $|\partial f/\partial y| \leqslant L$. 反过来，如果 f 对 y 是可微的，并且 $|\partial f/\partial y| \leqslant L$，则 f 满足 Lipschitz 条件.这通常是验证条件是否满足的最容易的方法.

有些情形 Lipschitz 条件不满足，但是对解的附加的约束可以使它是唯一的.例如，考虑方程

$$y' = \sqrt{1-y^2} = f(y, t).$$

当 $y = 1$ 时，$\partial f/\partial y$ 是无界的.事实上，它的解族为 $y = \sin(t+\alpha)$，如图 1.5 所示. $y = \pm 1$ 也是它的解，是一种特殊类型的解，它们构成解族的包络，即它们是处处与解族中至少一个解相切的曲线.因此，图上由 $\sin(t)$ 的一部分、$y = 1$ 的一部分和 $\sin(t+\alpha_1)$ 的一部分组成的粗线对任何 α_1 也是

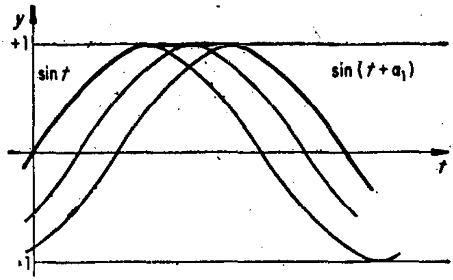

图 1.5. 具有包络线奇异性的解族

一个解，它具有连续的一阶导数．这样，对任意起始点 $-1\leqslant y_0\leqslant 1$，存在无穷多个解．但是，如果还要求具有连续的二阶导数，则存在唯一的解．在许多物理问题中，希望有若干阶的连续导数，这个事实可以保证有一个解，也可用来帮助选择方法．另外一个例子是方程

$$y'=\frac{y}{t}.$$

它既说明了这个问题，也说明初值问题可能没有解的事实，解族为 $y=ct$，如图 1.6 所示．由于它们都经过 $y=t=0$，初值不能给在奇异点 $t=0$ 上．

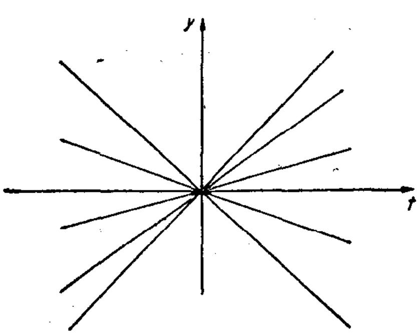

图 1.6. 具有一点奇异性解族

我们除了保证问题有解外，还必须保证它是适定的．所谓适定，是指在所述的问题中，微小的扰动只能引起解的微小的变化．这显然是一个有用的条件，因为对于解的数值近似，完全可能会引进扰动，使得正在求的是另外一个问题的解；把这些扰动控制得很小，使

得解能达到所需要的精确度是可以期望的. Lipschitz 条件是普通初值问题为适定的充分条件. 通过研究扰动问题

$$\begin{cases} z' = f(z, t) + \delta(t), \\ z(0) = y_0 + \varepsilon_0, \end{cases} \tag{1.5}$$

可以证实这一点, 其中 $\delta(t)$ 和 ε_0 都是小的扰动. 令 ε 是由 $\max[|\varepsilon_0|, \max\limits_{0\leqslant t\leqslant b}|\delta(t)|]$ 定义的模[1] $\|\varepsilon_0, \delta\|$. 如果 $\varepsilon(t)$ 为扰动后的解 z 和真实解 y 之间的差, 用 (1.5) 减去 (1.4), 我们得到

$$\varepsilon'(t) = f(z,t) - f(y,t) + \delta(t), |\varepsilon(0)| = |\varepsilon_0| \leqslant \varepsilon.$$

于是

$$|\varepsilon'(t)| \leqslant |f(z,t) - f(y,t)| + |\delta(t)| \leqslant L|\varepsilon(t)| + \varepsilon.$$

经积分得

$$|\varepsilon(t)| \leqslant \frac{\varepsilon}{L}[(L+1)e^{Lt} - 1].$$

因此,扰动问题的解中最大改变量以

$$\max_{0\leqslant t\leqslant b} |\varepsilon(t)| \leqslant \|\varepsilon_0, \delta\| \cdot \frac{1}{L}[(L+1)e^{Lb} - 1] = k\varepsilon \tag{1.6}$$

为界,这里 k 与 ε 无关.

现在我们正式定义适定性.

定义 1.1. 常微分方程 (1.4) 对初始条件 y_0 是适定的, 如果存在严格正的常数 k 和 $\hat{\varepsilon}$, 使得对于任意 $\varepsilon \leqslant \hat{\varepsilon}$, 只要 $|\varepsilon_0| < \varepsilon$ 并且对所有 $0 \leqslant t \leqslant b$ 有 $|\delta(t)| < \varepsilon$, 则扰动问题 (1.5) 满足

$$|z(t) - y(t)| \leqslant k\varepsilon.$$

于是我们可以得到如下定理:

定理 1.2. 如果 $f(y, t)$ 满足 Lipschitz 条件, 则 (1.4) 对任何初始条件都是适定的.

---

1) 模是一个正实数, 它是一些量的大小的度量。后面对向量和矩阵我们将引进不同的模. 这儿的重要性质为由 $\|\varepsilon_0, \delta\|=0$ 推出 $\varepsilon_0=0$ 和 $\delta(t)=0$.

在许多问题中，我们不能对所有的 y，而只能在 y 空间的一个区域中得到 Lipschitz 条件(例如，如果 $f(y,t)=y^2$，$\partial f/\partial y$ 存在，并且在任何有限区域中有界)．当 y 属于这个区域时，定理 1.1 可以用来保证有唯一解．只要 z 和 y 都属于这个区域，定理 1.2 的证明就成立，所以，用 ε 来限制最大的扰动是必要的．例如，对于方程 $y'=\frac{1}{y^2}$，$y(0)>0$，只要扰动不使 y 小于 0，它的扰动都是有界的．因此，它对所有正的初始值 y_0 是适定的，但是，当 y_0 接近于零时，ε 要很小，而 k 要很大．

1.2. 数值近似解

得到微分方程的数值近似解有两个基本的途径．一个途径是把近似解表示成有限个独立函数之和，例如，截断的幂级数或者正交函数[1]展开式中的前面几项．这些方法通常比较适于手算，虽然将 Чебышев 多项式应用到常微分方程上来已经做了许多工作．

第二个途径是差分方法，这是我们在这本书中要研究的一种方法．解被它在一列离散点上的值来近似，这些离散点叫作节点．在我们讨论的大多数地方，将假定这些点是等距的，并且记作 $t_i=ih$，其中 h 是相邻两节点之间的距离．终点通常记为 $t_N=b$，因此有 $N=\frac{b}{h}$．然而将会看到，节距或步长会影响引进的误差，并且在区间的一部分上可能是一个好的步长，而在别处就不好了．因此，我们可以用可变的步长，在这种情形下，有

1) 一组函数 $\{\phi_n\}$ 称为对区间 $[a,b]$ 和权函数 $\omega(t)$ 正交，如果对 $m\neq n$ 有 $\int_a^b \omega(t)\phi_n(t)\phi_m(t)dt=0$．许多正交函数具有对数值近似目的有用的性质，见 A. Ralston (1965)，p.93 的讨论．

$$t_{i+1}=t_i+h_i,\qquad t_0=0.$$

差分方法也叫作逐步方法，它提供了用 y 在 t_{i-1} 上或者前面的点上的值来计算第 i 步上关于 $y(t_i)$ 的近似值的规则. 我们称这个近似值为 y_i 在理想的情形,解能够用它在每个节点上的真实值来表示是理想的,所以,用节点之间的插值方法能够逼近到很高的精度. 但是，有两个问题妨碍这种理想的情形：首先,微分方程的精确解一般是不知道的,并且不能够计算,所以,求得的是另外一个能够计算的问题的解（这两个解之间的差称为截断误差);其次,在其数值过程中,数字不能表示得完全精确（这些装置引进的变化称为舍入误差). 因此,差分方法的解由有限个具有有限位正确的数字来表示,它含有两个误差源，舍入误差和截断误差. 差分方法也叫作离散变量方法,一般来说,比起级数展开方法，更适合于一般非线性问题的自动计算，并且是一般计算机子程序库中最常用的方法.

当我们想数值逼近一个解，自然关心能够使数值解对真实解达到多高的精度. 当我们选取一个方法时，它可能依赖于一个或许多个参数，例如，步长 h（当步长为可变时是 $\max(h_i)$）或者级数展开式中的项数. 我们想知道如何选取这些参数来达到需要的精度. 可能存在一个误差，比它小的误差是不能达到的.在这一点上,我们粗略地定义收敛性概念如下:对于任何满足 Lipschitz 条件的问题,通过选取足够小的 h,可以达到任意的精确度. 当讨论特殊类型的方法时，这个定义将叙述得更加精确. 由于当 h 减小时，点数增加，因此,计算量也增加. 可以预料舍入误差的影响也要增加，因为舍入误差增多了. 于是,在定义收敛性时,必须要求方法中所要的计算都是精确完成的. 实际上,这表示当 h 减小时,在计算中要增加运算的位数.

前面我们确信问题为适定的，所以误差的影响是有界的．我们还需要知道，初值的微小变化在用这个方法得到的数值近似解中只产生有界的变化．我们称这个概念为稳定性．对于离散变量方法，我们不严格地定义成下面的意义：如果对于每个微分方程均存在 $h_0>0$，使得初值中小于一个固定量的变化在所有 $0<h\leqslant h_0$ 的数值解中产生有界的变化，于是方法是稳定的．当讨论特殊类型的方法时，这个定义显得更加精确．我们看到，象适定性是对问题来说的一样，稳定性是关于方法的．注意，稳定性不要求收敛性，然而反过来，是真确的．因此，"方法" $y_n=y_{n-1}$, $n=1,2,\cdots,N$ 是稳定的，但是，除平凡问题 $y'=0$ 外，对任何问题都不收敛．

稳定性和收敛性概念都涉及 $h\to 0$ 时的极限过程．实际上，必须用有限步来计算并且只关心对于非零 h 产生的误差的大小．特别，我们要知道每一步所引进的误差（截断与舍入）在结果上产生或大或小的影响．因此，我们如下定义绝对稳定性："对于给定的步长和给定的微分方程，如果由一个节点值 y_n 上大小为 δ 的扰动所引起的其后值 $y_m(m>n)$ 上的变化都不大于 δ，则方法是绝对稳定的．"可惜，这个定义太依赖于问题本身，所以，我们利用"试验方程"的思想．我们将对微分方程 $y'=\lambda y$ 定义绝对稳定，其中 λ 为复常数[1)]，并且称绝对稳定区域为 h（非负实数）和 λ 的值的集合，对于这些值，单个

1) 对于线性方程组 $\boldsymbol{y}'=A\boldsymbol{y}$，如果 A 可对角线化，则可以归结成一组试验方程．如果 $SAS^{-1}=\Lambda$ 是将 A 变换成具有对角线元素 λ_i 的对角线矩阵 Λ 的相似变换，则可以写 $\boldsymbol{z}=S\boldsymbol{y}$，并且得到

$$S^{-1}\boldsymbol{z}'=AS^{-1}\boldsymbol{z}$$

或

$$\boldsymbol{z}'=SAS^{-1}\boldsymbol{z}=\Lambda\boldsymbol{z}.$$

这是一组独立的方程，形式均为 $z_i'=\lambda_i z_i$．对于一般的非线性方程，可以将 λ_i 看成 Jacobi 矩阵 $\partial\boldsymbol{y}'/\partial\boldsymbol{y}$ 的特征值．这些值确定了系统的一阶近似的局部性质．这些特征值 λ_i 可以是复的．

y_n 上量的扰动将在以后的值上产生一步一步不增加的变化.

1.3. 例子——Euler 方法

考察最简单的方法——Euler 方法是有益的，因为它容易分析，并且常常作为构造存在性证明的基础. 在 Euler 方法中，因变量在一点的值是从前一点由线性外插来计算的. 我们考虑单个方程

$$y' = f(y, t)$$

并且假定$y(0) = y_0$已给定. 于是可以计算 $y_0' = f(y_0, 0)$. 由这个值用 Taylor 级数的前两项可以计算 $y(h)$ 的近似值

$$y(h) \cong y_0 + hy'(0).$$

令 $t_1 = h$，并记 $y(t_1)$ 的近似值为 y_1，于是有

$$y_1 = y_0 + hf(y_0, t_0).$$

一般，由当时的值用公式

$$y_{n+1} = y_n + hf(y_n, t_n) \tag{1.7}$$

确定下一点的值，其中

$$t_n = nh.$$

从图 (1.7) 看出，通常每一步都是从解族的一条跑到另一条上去，所以，我们料想到解的精确度与方程的稳定性是紧密相关的. 如果方程是非常稳定的，则前面几步中的误差只有很小的影响. 另一方面，如果它们是不稳定的，则前面的误差有较大的影响.

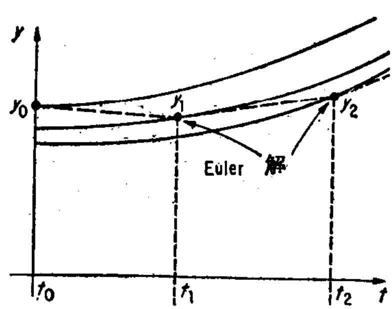

图 1.7. Euler 方法图示

假使对于给定的步长 h，Euler 方法的误差太大，怎么办?

能够使它减小吗？换句话说，当 $h\to 0$ 时这个方法收敛吗？答案在下面的定理中给出．

定理 1.3. 如果对于 $0\leqslant t\leqslant b$ 和所有的 y，$f(y,t)$ 对 y 满足 Lipschitz 条件并且对 t 是连续的，$h=\frac{t}{n}$，序列 $y_i(i=1,\cdots,n)$ 由 (1.7) 确定并且 $y_0\to y(0)$，则当 $n\to\infty$ 时对 t 一致地有 $y_n\to y(t)$，其中 $y(t)$ 为方程 (1.4) 的初值为 $y(0)$ 的解．

我们称 y_0 为起始值，以示与初值 $y(0)$ 的区别．事实上，我们只能希望在数值计算中的起始值当 h 减小和使用更高的精度时逼近初值．在这个定理中，假定 (1.7) 是在无舍入误差时求解的．

虽然我们要求对于一切 y 都有 Lipschitz 条件，但是，实际上只需要它在一个包含解 $y(t)$ 在其内部的闭域 R 中成立．步长可以选得足够小，使得数值解也保持在 R 内，条件就适合了．在很多定理中，为了从用到的各种连续性推出 f 及其导数有界，数值解和 $y(t)$ 都属于一个闭域的事实是需要的．定理 1.3 的证明将在下面讨论．它归结成推导误差

$$e_n=y_n-y(t_n)$$

的界，并证明这个界可以变得任意小．对函数 f 和解 y 作些附加的假设，可以得到更好的误差界．如果界只依赖于方程本身，而不依赖于关于解 $y(t)$ 的知识，称它为先验界．另外，若它需要关于解的性质的知识，这种误差界称为后天界．误差界通常比数值积分中产生的实际误差大得多，所以，我们有时将误差估计做成渐近形式，即找一个函数 $e(t)$，使当 $h\to 0$ 时有

$$\frac{e_n}{e(t_n)}=1+O(h)^{1)}.$$

---

1) 用 $O(h)$．表示 h 的任何函数，使得存在不依赖于 h 的常数 h_0 和 k，对所有 $|h|\leqslant h_0$ 有 $|O(h)|\leqslant kh$.