

SPT 21世纪高等院校教材

微分方程数值解法

基础教程

(第二版)

林群 编著



科学出版社
www.sciencep.com

0248

1
—
)

21世纪高等院校教材

微分方程数值解法 基础教程

(第二版)

林 群 编著

科学出版社
北京

内 容 简 介

本书是高等院校信息与计算科学专业基础主干课程教材之一。为适应当前的教学需要，在内容的组织和叙述上做了新的有益的尝试。

全书共2篇4个部分，介绍了数值解法中最主要的两种方法——有限差分法和有限元法。依托经典的一维和二维问题，详尽地论述了算法的构造思想及其误差分析理论，具有系统性和实用性。本书还在第一版的基础上补充了适量的实习题和复习题，有利于读者较深刻地掌握有关的原理，为进一步的专题学习和研究打下坚实的基础。

本书可作为高等院校信息与计算科学专业学生的教材，也可作为从事工程科学计算的有关人员的参考书。

图书在版编目 (CIP) 数据

微分方程数值解法基础教程/林群编著。—2 版。—北京：科学出版社，
2003

(21世纪高等院校教材)

ISBN 7-03-011301-2

I . 微… II . 林… III . 微分方程-数值计算-高等院校-教材
IV . O241.8

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2003) 第 019159 号

责任编辑：林 鹏 杨 波 / 责任校对：朱光光

责任印制：安春生 / 封面设计：宋广通

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码：100717

<http://www.sciencep.com>

双 青 印 刷 厂 印 刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2001年3月第 一 版 开本：B5 (720×1000)

2003年6月第 二 版 印张：16 1/4

2003年6月第二次印刷 字数：302 000

印数：300 1—7 000

定价：23.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换〈环伟〉)

序

首先，让我借此作序的机会，向未来计算数学的工作者们讲一讲当前国内外计算界的一些共识。对于从事力学、工程的人来说，计算数学其实就是有限差分法和有限元法。它属于传统的、成熟的学科，现在已形成了专门的软件，给出参数，便得结果，即只有输入和输出。这里所考虑的是连续体，用微分方程来描述，这些基本方程在 19 世纪就已建立。比如在流体力学中，通过统一的 Navier-Stokes 方程，足以描述边界层、湍流等多种现象，因此可以用纯数学方式，按 Navier-Stokes 方程的解来研究流体。虽然建立这些方程的人可能是力学家自己，但毕竟是纯数学味的，数学家甚至忘记了它是力学，而把它作为数学自身的一部分。对于这类问题，在计算数学方面有待进一步深化的，原则上只剩下计算的效率和精度了。

当前，人们关心的主要问题是计算数学的前沿和未来，这将涉及数学上困难的、不成熟的、未解决的、有待创新的那些领域，例如材料科学，可能同时需要考虑电子、分子、晶体、多尺度等问题，不能作为一个连续体看待。至今还没有有效的、可靠的数学方程去描述，更谈不上严格的数学证明。所以，不可能作为数学去理解这些物理过程，而需要有该专业的知识背景，并通过算法和软件去进行数值模拟。纯数学的严密性、逻辑性、精确性还达不到，必须使用实验、计算这些原始的、不严格的手段。因此，前沿和未来的计算数学人才应具备纯数学、应用数学、计算数学以及某些应用专业的基本技能，最好跟其他专业人士合作。这就要求他们不仅必须透彻地掌握计算数学原理的精华，而且还应该具有面宽、多学科的知识结构，这也许是今后计算数学诱人的新时尚。

接着，我向读者介绍本书的作者，以及本书的写作特点。有趣的是，作者的姓名跟序者相同，又毕业于同一所大学，因此，各自分别的论著常被视为同一人。特别是在统计论文数目时，能使双方都得益。

本书是计算数学专业的原理性教材，它试图在以下几个方面作出新的探索：第一，它在取材上不想包罗万象，而是着眼于数值解法中精华的部分，突出经典算法的构造思想，并完整地论述了有限差分法和有限元法中具有特色的误差分析理论。其目的在于使读者能够牢固地掌握数值算法的基本原理，以利于在今后的专题学习和研究中达到举一反三的效果。第二，它的叙述尽量建立在基础微积分和线性代数的平台上，使读者在学习时不需要具备太多数学上的预备知识，有利

于扩大读者面。第三，在表述风格上，密切贴近实际计算的需要，简洁明快，适应70~80学时的教学，而且前后对比性和层次感强，便于读者循序渐进，把握方法和理论的精神实质。总之，本书在写作上有所创新，是其他教材不可替代的。



目 录

引言	1
第一篇 有限差分法	
第一部分 一维问题的有限差分法	7
一、Euler 法	7
二、线性多步法	11
三、LMS 法的计算问题	24
四、绝对稳定性	27
五、Runge-Kutta 法	33
第二部分 二维问题的有限差分法	47
一、古典显格式	47
二、线性多层差分格式	56
三、有关计算问题	67
四、稳定性的 Fourier 分析	77
第二篇 有限元法	
第一部分 一维问题的有限元法	87
一、算法构思	87
二、一次区间元	93
三、二次区间元	99
四、一般区间元	105
五、经典误差分析	110
第二部分 二维问题的有限元法	119
一、算法构思	119
二、矩形元	129
三、三角元	151
四、有限元方程形成的一般过程	185
五、经典误差分析	192
六、有关计算问题	205
七、半有限元	212

高性能有限元算法	236
复习题	247
参考文献	253
后记	254

引言

本课程的任务是研究微分方程的计算机解法,它有什么用处呢?这要从微分方程讲起.自牛顿发明微积分以来,微分方程在描述事物运动规律上已发挥了重要的作用,涌现出大量微分方程描述的动态数学模型,在自然现象、军事科技和国民经济等许多领域均屡见不鲜.以下仅举数例加以说明:

1. 导弹动力学弹道方程组

考虑导弹飞行中某时刻 t 所处的垂直平面

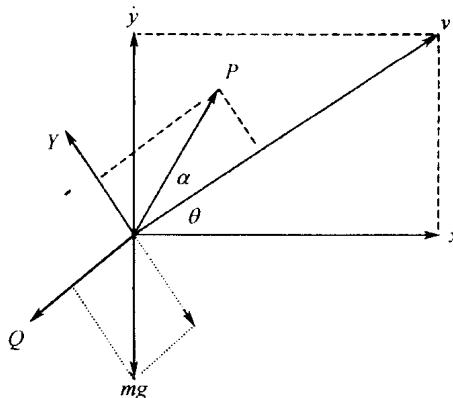
$$m \frac{dv}{dt} = P \cos \alpha - Q - mg \sin \theta$$

$$mv \frac{d\theta}{dt} = P \sin \alpha + Y - mg \cos \theta$$

$$\frac{dx}{dt} = v \cos \theta$$

$$\frac{dy}{dt} = v \sin \theta$$

$$\frac{dm}{dt} = - m_c$$



其中

m ——导弹质量;

v ——导弹速度;

- $P = P(t)$ ——已知的发动机推力及其调节方案；
 α ——推力 P 与速度 v 的夹角在垂直平面内的投影；
 Q ——气动阻力，由导弹的飞行速度、高度以及导弹外形、姿态和操纵面偏转角等因素确定；
 Y ——升力，确定条件同上；
 g ——重力加速度，在地面附近处视为常数；
 $\theta = \theta(t)$ ——已知的弹道倾角及其随时间变化的函数；
 x ——飞行路程；
 y ——飞行高度；
 m_c ——推进剂秒流量。

在弹道设计中，求解动力学弹道的目的是为了得到 x ， y 和 v 三个参数，以便对射程、导引方法及燃料添置等方案进行选择。

2. 激光诱导 DNA 分子动力学模型

考虑弱激光的电场作用，激发电场对 DNA（脱氧核糖核酸）中电荷和电偶矩的作用力可表为 $Q_e \cos \omega t$ ，其中 ω 为频率， t 为时间， Q_e 相当于 DNA 分子中的有效电荷。由于激光引起 DNA 中电荷与电偶矩的运动，从而导致 DNA 分子两基转子的运动，设 DNA 分子两基转子相对于平衡位置的角位移（或称扭转角）为 φ 。另外，因为生物体的 DNA 总是处于水溶质环境，所以在激光作用下，DNA 系统运动将会受到阻尼。把阻尼作线性处理，即取为 $\gamma d\varphi/dt$ ，式中 γ 为阻尼系数，则在阻尼下激光对 DNA 分子激励效应随时间演化的运动方程表为

$$A \frac{d^2\varphi}{dt^2} + \gamma \frac{d\varphi}{dt} + (B + Q_e \cos \omega t) \sin \varphi = 0$$

其中 A 是一个与 DNA 链堆积能、碱基相互作用及碱基对的局部相互作用常数相关的量。

以上所述及的微分方程只涉及单因素，即问题是一维的，这种方程称为常微分方程；如果微分方程涉及多因素，即问题是多维的，这时方程中出现的导数是偏导数，相应方程称为偏微分方程。

3. 定常物质或能量的扩散过程

考虑三维空间 $x = (x_1, x_2, x_3)$ 中由曲面 Γ 所包围的某体积 Ω 内的定常物质或能量（热量、电荷、流体渗透等）分布。若物质或能量的流量密度向量 w 正比于浓度 $u = u(x)$ 的梯度：

$$w = -k \cdot \nabla u$$

其中 $k = k(x)$ 为扩散系数, ∇ 为梯度算子. 流量密度的含义是单位时间内通过同浓度分布面单位面积的物质量或能量.

给定表面为 S 且全部位于 Ω 内的体积 V , 若 V 中存在一个按密度 $f(x)$ 分布的物质或能量的扩散源, 则定常浓度 $u = u(x)$ 的方程是

$$\nabla \cdot (k \nabla u) = -f(x)$$

或写成其展开的形式:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(k \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(k \frac{\partial u}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(k \frac{\partial u}{\partial x_3} \right) = -f(x_1, x_2, x_3)$$

在均匀介质的情况下, $k = \text{const}$, 定常浓度分布 $u = u(x)$ 由泊松(poisson)方程来描述

$$\Delta u = -\bar{f}(x), \quad \bar{f} = f/k$$

其中 $\Delta = \nabla^2$, 或

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_3^2} = -\bar{f}(x)$$

如果没有物质或能量的扩散源, 即 $f(x) \equiv 0$, 则对定常浓度 $u = u(x)$, 可得齐次方程

$$\nabla \cdot (k \nabla u) = 0$$

在均匀介质 $k = \text{const}$ 下化为拉普拉斯(Laplace)方程 $\Delta u = 0$.

4. 金融工程期权定价模型

在基于股票的衍生证券市场上, 欧式买入期权的行使办法是: 在到期日 T , 当股票价格 $S_T > X$ (行使价格) 时, 则按 X 买入股票, 否则不行使期权. 欧式卖出期权的行使办法是: 在到期日 T , 当股票价格 $S_T < X$ (行使价格) 时, 则按 X 卖出股票, 否则不行使期权.

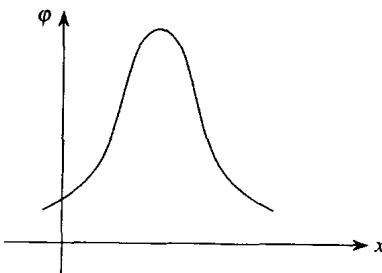
1973 年布莱克(Black)和休尔斯(Scholes)按下列倒向微分方程决定欧式期权的无套利价格:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + rS \frac{\partial f}{\partial S} + \frac{1}{2} \sigma^2 S^2 \frac{\partial^2 f}{\partial S^2} = rf$$

这里, 对买入期权有 $f|_{t=T} = \max(S_T - X, 0)$; 对卖出期权则有 $f|_{t=T} = \max(X - S_T, 0)$. 其中, r 为无风险利率, S 为股票价格, X 为期权的行使价格, $f(S, t)$ 为基于 S 的期权价格.

5. 非线性波 KdV 方程

1895 年德国的科特韦格(Korteweg)和德夫里斯(de Vries)在解释拉塞尔观察



到的奇突现象时,提出了著名的 KdV 方程. 它说明:不弥散的波包是由非线性效应与色散现象相互抵消所致,称为“孤立波”,满足粒子条件的孤立波称为孤立子 (soliton).

$$\varphi_t - a\varphi\varphi_x + b\varphi_{xxx} = 0$$

其中, φ 表示波幅, $\varphi_t = \partial \varphi / \partial t$, $\varphi_{xxx} = \partial^3 \varphi / \partial x^3$, $a, b > 0$.

由于求解方面的困难,这一方程搁置了多年. 直到 1965 年,才由扎布斯基 (Zabusky) 和克鲁斯科尔 (Kruskal) 用计算机求出它的解.

6. 流体力学海域潮流场模拟

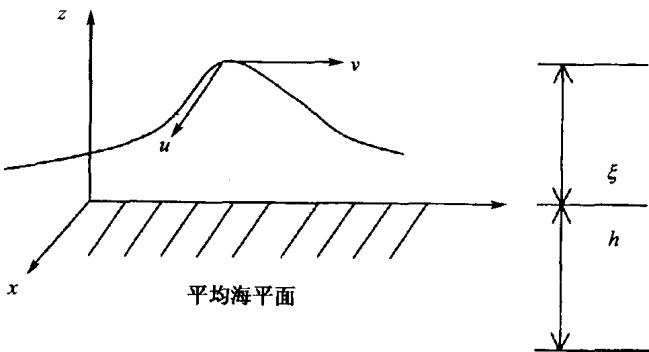
$$\begin{aligned}\frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial Hu}{\partial x} + \frac{\partial Hv}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + fu &= -g \frac{\partial \xi}{\partial x} - g \frac{u(u^2 + v^2)^{1/2}}{c_z^2 H} \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} - fv &= -g \frac{\partial \xi}{\partial y} - g \frac{v(u^2 + v^2)^{1/2}}{c_z^2 H}\end{aligned}$$

其中

h ——平均海平面下水深;

ξ ——海平面相对平均海平面的高度;

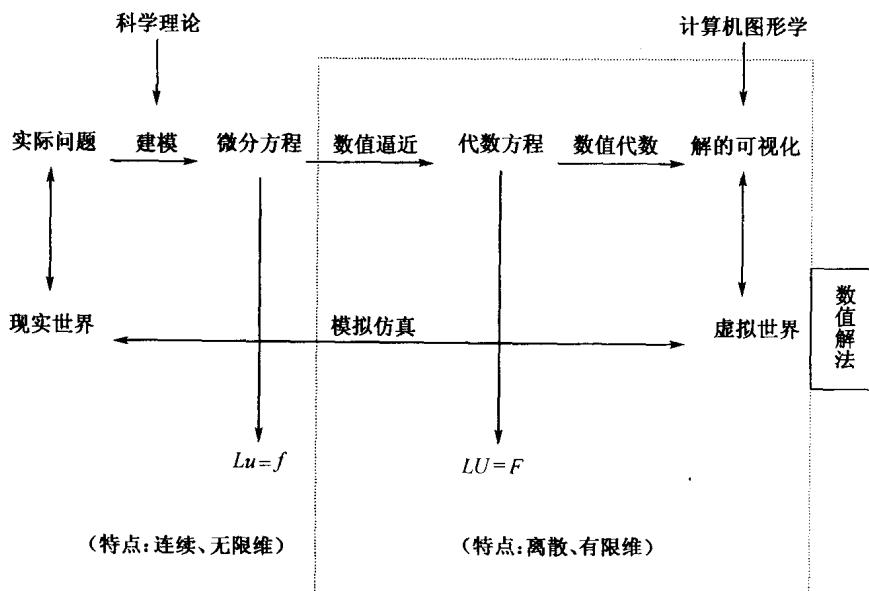
$H = h + \xi$ ——总水深;



u, v ——垂直平均流速的 x, y 分量.

由于实际应用的需要,人们必须求解微分方程,从而真正把握事物的运动规律,或者对各种决策方案作出选择.如何求解这些微分方程呢?当然可以考虑求解析解,但随着问题的复杂化,求解析解将变得十分困难甚至不可能.计算机出现后,人们开始寻求微分方程的计算机解法,其中一种重要方法称为“数值解法”.用这种方法在计算机上求解微分方程,称为数值模拟或数值仿真.

计算机主要的两大功能是数值计算和(非数值)数据管理,计算机用于数值计算以及本课程的地位可由下图说明:



如今,以计算数学为基础的科学计算已成为科学的研究的三个基本要素之一,这三个要素包括:科学理论、科学实验和科学计算.现在,科学计算可以大大降低科学实验的成本,为新的科学理论的诞生奠定基础;一项技术、产品或工程的先进性也很大程度上取决于计算上的先进性.随着知识时代的到来,计算数学在科技、经济和社会发展中必将发挥越来越重要的作用.

本课程的内容分为两大部分:一、一维和二维有限差分法;二、一维和二维有限元法.

本课程的讨论包括两大方面:一方面是算法构造,它直接面向计算机编程;另一方面是理论分析(即误差分析与效率分析,本课程以误差分析为主),这是对算法计算性态的理论研究,不具备良好计算性态的算法,其实际计算效果很可能是不

佳的.

由于实际中提出的微分方程种类繁多,如果对每种方程来逐一学习,便会令人眼花缭乱,不得要领.因此,本课程不以方程为导向,而是以算法原理为导向.针对经典问题,掌握算法原理的精神实质,便可举一反三,触类旁通,为解决现实中出现的各种新问题打下必要的基础.

第一篇 有限差分法

第一部分 一维问题的有限差分法

一、Euler 法

考虑一维经典初值问题：

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = f(t, u), & t \in (0, T] \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

假设：存在惟一、足够光滑的解 $u(t)$.

差分法的基本思想是：“以差商代替微商”，Euler(欧拉)法虽简单，但其中却包含着我们将研究的几乎所有内容。

(一) 算法构造

给定等距剖分： $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n \leq T$ ，其中，步长为 $h = t_{m+1} - t_m$ ， $m = 0, 1, \dots, n-1$ 。

在 $[t_m, t_{m+1}]$ 上，作

$$\frac{u(t_{m+1}) - u(t_m)}{h} \approx \frac{du}{dt} \Big|_{t=t_m} = f(t_m, u(t_m))$$

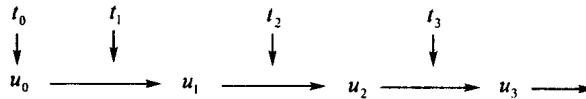
$$\Rightarrow u_{m+1} = u_m + h f(t_m, u_m), \quad m = 0, 1, \dots, n-1$$

其中 $u(t_m)$ ——微分方程在 $t = t_m$ 处的精确解；

u_m ——差分方程在 $t = t_m$ 处的精确解。

这一方法称为“Euler 法”。

应用时采用递推方式计算：



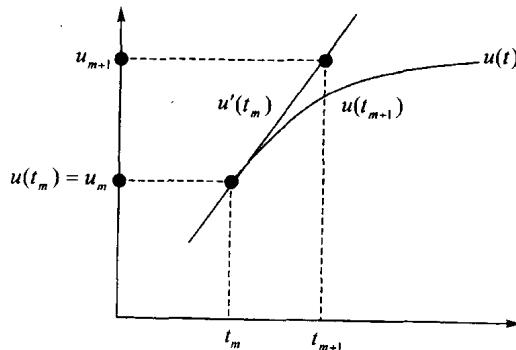
Euler 法的几何意义如下：

在递推的每一步，设点 (t_m, u_m) 落在某积分曲线 $u(t)$ 上，即 $u(t_m) = u_m$ 。过该点作 $u(t)$ 的切线，其点斜式方程为

$$u_{m+1} - u_m = u'(t_m)(t_{m+1} - t_m)$$

即

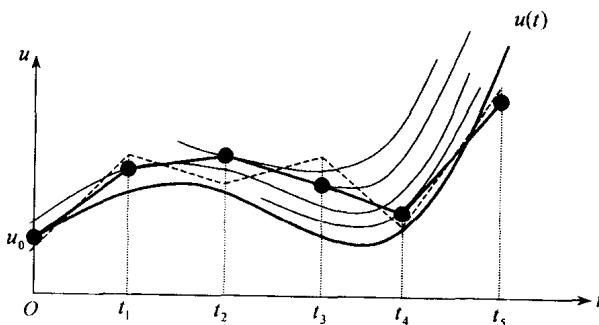
$$u_{m+1} - u_m = f(t_m, u_m)h$$



(二) 误差分析

构造算法后, 这一算法在实际中是否切实可行呢? 也就是说, 是否使计算机仿真而不是失真, 这还须进一步分析.

误差来源分为三种: 替代误差、跳跃误差、舍入误差. 替代误差是指用切线代替积分曲线所产生的误差; 跳跃误差是指切点从一条积分曲线跳跃至另一曲线所产生的误差; 而舍入误差则是实际计算时由于计算机字长有限所造成的误差.



图中

折线: ———包含替代误差、跳跃误差, 但不包含舍入误差;
----- 同时包含替代误差、跳跃误差和舍入误差.

下面将在理论上分别加以考察:

1. 相容性

相容性研究的是替代误差, 它是指差商代替微商所引起的误差. 或称为局部截断误差.

在 $[t, t+h]$ 上, 定义算子:

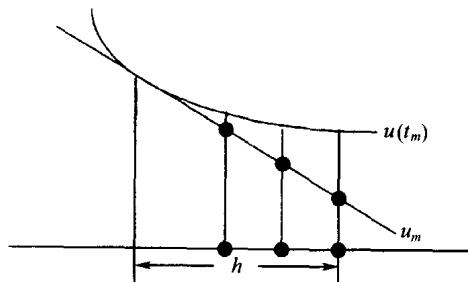
$$L[u(t); h] = u(t+h) - u(t) - hf(t, u(t))$$

将 $u(t+h)$ 在 t 处做 Taylor 展开, 得

$$\begin{aligned}
 L[u(t); h] &= [u'(t) - f(t, u(t))]h + \frac{1}{2}u''(\xi)h^2 \\
 &= [u'(t) - f(t, u(t))]h + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial u} \cdot u'(t)\right)|_{t=\xi} h^2 \\
 &\stackrel{u(t) \text{ 是微分方程的解}}{=} \frac{1}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial u} \cdot f(t, u(t))\right)|_{t=\xi} h^2
 \end{aligned}$$

这样,引进相容性的概念:

当 $L[u(t); h] = O(h^p)$, $p \geq 2$ 时,称数值方法是相容的. $L[u(t); h]$ 也称为局部截断误差. 于是在 $[t_m - h, t_m]$ 上,当 $h \rightarrow 0$ 时,有 $u_m \rightarrow u(t_m)$.



2. 稳定性

稳定性研究的是舍入误差,它是指由于计算机字长有限所引起的数值舍入的误差.

我们的要求是:最初产生的小误差在以后的计算中虽然会传递下去,但不会无限制地扩大.

引进稳定性的概念:

设由初值 u_0 得精确解 u_m ;由初值 v_0 得精确解 v_m ,若存在常数 C 和充分小的步长 h_0 ,使得

$$|u_m - v_m| \leq C |u_0 - v_0|, \quad h \leq h_0, mh \leq T$$

则称数值方法是稳定的.

由概念的定义可以看出,我们是以 v_m 的精确计算来体现 u_m 的浮点计算.

设

$$\begin{aligned}
 e_m &= u_m - v_m \\
 u_m &= u_{m-1} + hf(t_{m-1}, u_{m-1}) \\
 v_m &= v_{m-1} + hf(t_{m-1}, v_{m-1})
 \end{aligned}$$

以及

$$L = \max_{0 \leq i \leq T} \left| \frac{\partial f}{\partial u} \right|$$

则

$$e_m = e_{m-1} + h[f(t_{m-1}, u_{m-1}) - f(t_m, u_{m-1})] = e_{m-1} + h \cdot \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{u=\eta} \cdot e_{m-1}$$

于是

$$\begin{aligned} |e_m| &\leqslant |e_{m-1}| + hL|e_{m-1}| \\ &= (1 + hL)|e_{m-1}| \\ &\leqslant \dots \leqslant (1 + hL)^m|e_0| \leqslant e^{LT}|e_0| \end{aligned}$$

其中

$$h \leqslant \frac{T}{m} \Rightarrow (1 + hL)^m \leqslant \left(1 + \frac{LT}{m}\right)^m \leqslant e^{LT}$$

因此当 L 有限时, Euler 法是稳定的.

3. 收敛性

收敛性研究的是跳跃误差, 它是指由局部截断误差引起的、差分解从一条积分曲线跳跃至另一条积分曲线上所产生的误差. 或称为整体截断误差.

引进收敛性的概念:

当 $h \rightarrow 0$ 时, 若 $u_m \rightarrow u(t_m)$, $t_m \in [0, T]$, 则称数值方法是收敛的. $\epsilon_m = u(t_m) - u_m$ 称为整体截断误差.

设

$$K = \max_{0 \leqslant t \leqslant T} \left| \frac{\partial f}{\partial t} \right|, \quad M = \max_{0 \leqslant t \leqslant T} |f(t, u(t))|$$

则

$$|L[u(t); h]| \leqslant \frac{1}{2}h^2(K + LM) \stackrel{\Delta}{=} R$$

$$u(t_m + h) - u(t_m) - hf(t_m, u(t_m)) = L[u(t_m); h]$$

即

$$\begin{aligned} u(t_{m+1}) - u(t_m) - hf(t_m, u(t_m)) &= L[u(t_m); h] \\ \underline{-) \qquad \qquad \qquad u_{m+1} - u_m - hf(t_m, u_m) = 0} \\ \epsilon_{m+1} - \epsilon_m - h[f(t_m, u(t_m)) - f(t_m, u_m)] &= L[u(t_m); h] \end{aligned}$$

亦即

$$\begin{aligned} \epsilon_{m+1} &= \epsilon_m + h \cdot \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{u=\eta} \cdot \epsilon_m + L[u(t_m); h] \\ \Rightarrow |\epsilon_{m+1}| &\leqslant |\epsilon_m| + hL|\epsilon_m| + R = (1 + hL)|\epsilon_m| + R \end{aligned}$$

或

$$|\epsilon_m| \leqslant (1 + hL)|\epsilon_{m-1}| + R$$

从而