

计算数学讲义 (三)

常微分方程数值解法

南京大学数学系计算数学专业 编

科学出版社

51.816

计算数学讲义 (三)

常微分方程数值解法

南京大学数学系计算数学专业 编

科学出版社

1979

内 容 简 介

本书共分八章：第一章简单介绍建立数值方法的基本思想，第二、三两章分别介绍常用的单步法和线性多步法，第四章介绍几种预测校正方法，第五章介绍常微分方程组及高阶微分方程的解法，第六章对常微分方程初值问题数值方法中的收敛性、稳定性、相容性等理论问题进行了讨论，第七章介绍坏条件(stiff)方程组及其解法，第八章讨论边值问题的解法，除介绍一般的差分方法外，还介绍了使用样条函数的方法和试射(shooting)法。

本书可供高等院校计算数学专业使用，也可供有关计算工作者参考。

计算数学讲义(三)

常微分方程数值解法

南京大学数学系计算数学专业 编

科学出版社出版

北京朝阳门内大街137号

上海商务印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

1979年2月第一版 开本：787×1092 1/32
1979年2月第一次印刷 印张：5 3/8
印数：0301—118,400 字数：121,000

统一书号：13031·858

本社书号：1224·13—1

定 价：0.55 元

说 明

1. 这一套《计算数学讲义》是在我专业过去所编教材的基础上修改补充而成的。

2. 这套讲义共分下列九册:

(一)数值逼近方法,

(二)线性代数计算方法,

(三)常微分方程数值解法,

(四)偏微分方程数值解法,

(五)最优化方法,

(六)概率统计基础和概率统计方法,

数学基础之一: 线性代数,

数学基础之二: 常微分方程,

数学基础之三: 偏微分方程.

由于篇幅的原因,我们把《概率统计基础》和《概率统计方法》合并为一册.

3. 这套讲义可作为综合性大学理科计算数学专业教材,也可供利用电子计算机从事科学计算的科技人员参考.

4. 这套《计算数学讲义》的主编是何旭初同志.

讲义各册由我专业有关同志分工负责.

这册《常微分方程数值解法》的编写者为包雪松同志.

5. 由于理论水平和实践经验所限,讲义中的缺点和错误在所难免,我们衷心盼望读者提出宝贵意见,以便进一步修改.

南京大学数学系计算数学专业

1978年4月

目 录

第一章 引言	1
§ 1 解常微分方程为什么要研究数值方法	1
§ 2 建立数值方法的基本思想与途径	2
§ 3 一些基本概念	5
第二章 常用的单步法	7
§ 1 Euler 方法	7
§ 2 Runge-Kutta 方法	15
§ 3 Richardson 外推法	27
第三章 线性多步法	35
§ 1 Adams 显式公式	35
§ 2 Adams 隐式公式	39
§ 3 初始出发值的计算	41
§ 4 Adams 公式的截断误差	44
§ 5 隐式公式的迭代解法	45
第四章 预测-校正法	51
§ 1 最简单的预测-校正法	51
§ 2 Milne 方法	55
§ 3 Hamming 方法	59
第五章 常微分方程组及高阶微分方程的数值解法	62
§ 1 常微分方程组简介	62
§ 2 Runge-Kutta 方法	64
§ 3 Hamming 方法	76
§ 4 不显含一阶导数的二阶方程的特殊计算方法	81

第六章	数值方法的相容性、收敛性和稳定性	87
§ 1	单步法的相容性和收敛性	87
§ 2	多步法的相容性和收敛性	90
§ 3	数值稳定性问题	92
§ 4	绝对稳定性	95
第七章	坏条件方程组简介	105
§ 1	什么是坏条件方程组	105
§ 2	适合于不同情况的解坏条件方程的线性方法	107
§ 3	非线性方法	118
§ 4	关于阶数、步长和方法的选择	122
第八章	边值问题的数值解法	128
§ 1	解线性边值问题的差分方法	129
§ 2	样条函数简介及其在两点边值问题上的应用	139
§ 3	试射法	143
§ 4	适合于非线性方程的差分方法	148
附录 I	差分方程简介	154
§ 1	一般差分方程	154
§ 2	线性差分方程	154
§ 3	线性常系数差分方程	156
附录 II	第六章 定理 2 的证明	158

第一章 引言

§ 1 解常微分方程为什么要研究数值方法

在《常微分方程》一书中，我们已经对一些典型的微分方程（例如线性方程、某些特殊的一阶非线性方程等）介绍了一些求解析解的基本方法。有了解析解，就可以（至少从理论上说）根据初值问题或边值问题的条件把其中的任意常数完全确定下来。然而，在生产实际和科学研究中所遇到的微分方程往往很复杂，在很多情况下都不可能给出解的解析表达式。有时候即使能求出封闭形式的解，也往往因计算量太大而不实用。例如，计算收敛缓慢的幂级数解，为了满足规定的精确度，就得计算很多的项。又如，容易求出初值问题

$$\begin{cases} y' = 1 - 2xy, \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

的解

$$y = e^{-x^2} \int_0^x e^{t^2} dt,$$

但是要计算它的值，还需应用数值积分的方法，而如果要求对于许多 x 值计算解 $y(x)$ 的值，那么工作量就十分庞大了。就连简单的初值问题

$$\begin{cases} y' = y, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

其解为 $y = e^x$ ，虽有表可查，但对表上所没有给出的 e^x 值也还得利用插值方法来计算；如果对大量的 x 值要进行这种插值的话，其工作量将是很可观的。此外，线性常系数微分方程看

来够简单的了,只要求出特征方程的根,就可以得到通解.可是,高次代数方程求根也并不容易,按照这种途径来求解析解那就更为困难了.

根据以上的讨论,可以看出:用求解析解的方法来计算微分方程的数值解往往是不适宜的,甚至是很难办到的.

实际上,对于解微分方程问题,一般只要求得到解在若干个点上的近似值或者解的便于计算的近似表达式(只要满足规定的精度就行了).所以,研究解微分方程的数值方法就显得十分必要了.

§2 建立数值方法的基本思想与途径

2.1. 离散化 我们以一阶微分方程的初值问题

$$\begin{cases} y' = f(t, y), & a \leq t \leq b, \\ y(a) = \eta \end{cases} \quad (1)$$

为例来说明建立数值方法的基本思想.初值问题(1)的解 $y(t)$ 是区间 $[a, b]$ 上的连续变量 t 的函数,因而问题(1)实际上是一个连续性的问题.求这个初值问题的数值解,就是要求在区间 $[a, b]$ 上的若干个离散的点处,例如

$$a \leq t_0 < t_1 < \cdots < t_n \leq b,$$

计算出解 $y(t)$ 的近似值

$$y_1, y_2, \cdots, y_n.$$

一般常取 $t_0, t_1, \cdots, t_n$ 为等距离的,即

$$t_1 - t_0 = t_2 - t_1 = \cdots = t_n - t_{n-1} = h \text{ (设),}$$

或

$$t_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \cdots, n,$$

我们称 h 为步长.建立数值方法的第一步工作就是把连续性问题(1)通过一定的方法化为在给定的 $n+1$ 个点上的近似的

差分方程的初值问题。我们称这个过程为离散化。关于离散化的方法,将在以下介绍。

2.2. 化导数为差商的方法 在点 t_i 处的导数 $y'(t_i)$ 可以近似地表示成差商

$$y'(t_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h},$$

从而就把微分方程初值问题(1)化为差分方程的初值问题

$$\begin{cases} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(t_i, y_i), & i=0, 1, \dots, \\ y_0 = \eta, \end{cases} \quad (2)$$

其中, y_i 表示解 $y(t)$ 在点 t_i 处的近似值, 即

$$y_i \approx y(t_i).$$

应当指出, 用差商来近似地表示导数, 方法不是唯一的, 这里所用的是前差, 也可以用另外的方法得出具有更高精确定度的差商近似。

用差商代替导数是微分方程问题离散化的一种基本方法。

2.3. Taylor 展式法 在一个点 (例如 t_i) 的附近, $y(t)$ 的同次数的近似多项式中以 Taylor 多项式

$$y(t_i + h) \approx y(t_i) + hy'(t_i) + \dots + \frac{h^p}{p!} y^{(p)}(t_i) \quad (3)$$

为最好。其中, p 为一正整数。通过微分方程

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

可以逐次把各阶导数 $y', y'', \dots$ 在 t_i 处的值表示出来, 例如,

$$y'(t_i) = f(t_i, y(t_i))$$

$$y''(t_i) = f'_t(t_i, y(t_i)) + f'_y(t_i, y(t_i))y'(t_i)$$

$$\dots\dots\dots$$

从而可知, 各阶导数的近似值近似地满足下列关系:

$$\begin{cases} y'_i = f(t_i, y_i) \\ y''_i = f'_t(t_i, y_i) + f'_{y_i}(t_i, y_i)y'_i \\ \dots\dots\dots \end{cases} \quad (4)$$

其中, y_i 表示 $y(t_i)$ 的近似值, 而 $y'_i, y''_i, \dots$ 分别表示各阶导数 $y'(t_i), y''(t_i), \dots$ 的近似值, 因此, 可以把微分方程初值问题 (1) 利用 Taylor 多项式 (3) 化为差分方程的初值问题:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + hy'_i + \frac{h^2}{2} y''_i + \dots + \frac{h^p}{p!} y^{(p)}_i, \quad i=0, 1, \dots \\ y_0 = \eta. \end{cases} \quad (5)$$

若取 $p=1$, 则 (5) 化为

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + hy'_i \approx y_i + hf_i, \\ y_0 = \eta, \end{cases}$$

其中 f_i 表示函数 $f(t, y(t))$ 在 t_i 点的近似值 $f(t_i, y_i)$. 这就是前一小节中的 (2). 应当指出, 用 Taylor 多项式 (3) 来建立差分方程, 当 p 稍大时, 差分方程就非常复杂, 因而不宜于直接应用.

2.4. 数值积分方法 把微分方程

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

在区间 $[t_i, t_{i+1}]$ 上求积分便得

$$y(t_{i+1}) - y(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt, \quad (6)$$

于是, 初值问题 (1) 便可以近似地化为:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt, \\ y_0 = \eta. \end{cases} \quad (7)$$

关于 (6) 式右端的积分, 可以用数值积分方法计算其近似值. 例如, 在 $[t_i, t_{i+1}]$ 上利用矩形公式, 则有

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt \approx hf_i,$$

这时(7)就化为

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + hf_i, \\ y_0 = \eta. \end{cases}$$

这又得到了(2). 若使用较精确的梯形公式,

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt \approx \frac{h}{2} (f_i + f_{i+1}),$$

这时, (7) 化为

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} (f_i + f_{i+1}), \\ y_0 = \eta. \end{cases} \quad (8)$$

在矩形求积公式中若取

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt \approx hf_{i+1},$$

则(1)近似地化为

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + hf(t_{i+1}, y_{i+1}), \\ y_0 = \eta. \end{cases} \quad (9)$$

我们称(2)为 Euler 公式, 而称(9)为后退 Euler 公式.

§ 3 一些基本概念

我们以 Euler 公式

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + hf_i, \\ y_0 = \eta \end{cases} \quad (10)$$

为例, 来介绍数值方法中的一些基本概念. 在 Euler 公式中, 若已知 y_0 , 便可以由递推公式 (2) 来求出 y_1 , 然后由 y_1 求出 y_2 , 依次类推, 由 y_n 可求出 y_{n+1} ; 为了求后一点 t_{n+1} 上的数值 y_{n+1} , 只要知道前一点 t_n 上的数值 y_n 就够了, 这种方法称为单步法, 显然它是一个自开始的公式, 即由微分方程给出的初始值 $y(0) = \eta = y_0$ 作为它的出发值, 就可以按所给公式计算出

层面的函数值 $y_1, y_2, \dots$, 而不需其他的信息.

Euler 公式是一个显式公式, 因为所要求的量 y_{n+1} 可以用 y_n 和由 y_n 求得的 $f_n = f(t_n, y_n)$ 来表示. 相反, 后退 Euler 公式则是一个隐式公式, 因为所要求的 y_{n+1} 也包含在 f_{n+1} 中, 当 f 为 y 的非线性函数时, 一般来讲, 是不可能将 y_{n+1} 表示成 y_n 的函数, 故使用隐式公式时需由其他方法提供一个初次逼近值 $y_{n+1}^{(0)}$, 然后再通过适当的迭代过程来求得 y_{n+1} 的改进值, 所以它不是自开始的公式.

为了定义方法的截断误差及阶数, 我们先来比较数值解 y_n 所满足的 Euler 公式与精确解 $y(t)$ 所满足的带余项的 Taylor 公式

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

其中 ξ_n 为区间 (t_n, t_{n+1}) 中的某一点, 因为 $y'(t_n) = f(t_n, y(t_n))$, 上式可以改写为

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf(t_n, y(t_n)) + \frac{h^2}{2} y''(\xi_n). \quad (11)$$

由此可见, Euler 公式就是由精确解满足的方程中截去了 $\frac{h^2}{2} y''(\xi_n)$ 这一项而得到的近似公式. 我们称 $\frac{h^2}{2} y''(\xi_n)$ 为 Euler 公式的截断误差或称局部离散误差, 它是与 h^2 同阶的量, 记之为 $O(h^2)$. 又由于丢掉的项含有 $y(t)$ 的二阶导数, 所以 Euler 方法是一个一阶的方法. 我们定义: 为所有不超过 p 次的多项式都精确满足的公式为 p 阶的方法. 在第二章中我们将介绍其他一些常用的单步法, 我们将会发现方法的阶数正好比方法的截断误差中 h 的幂次低 1, 即若截断误差为 $O(h^{p+1})$, 则方法为 p 阶的. 所以方法的阶数可以作为衡量方法精确度的一个重要标志.

第二章 常用的单步法

§ 1 Euler 方法

Euler 方法是最简单的单步法，它是一阶的，精度较差，但由于公式简单，且有明显的几何解释，有利于初学者从直观上了解数值 y_n 怎样逼近微分方程精确解 $y(x)$ 的，所以有必要对这个方法进行详细的讨论。

1.1. Euler 公式及其几何解释 解初值问题

$$\begin{cases} y' = f(t, y), \\ y(0) = \eta \end{cases} \quad (1)$$

的 Euler 方法是由递推公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf_n, \\ y_0 = \eta \end{cases} \quad (2)$$

来定义的。微分方程 $y' = f(t, y)$ 的右端函数 $f(t, y)$ 在 (t, y) 平面上的带形区域 $R: a \leq t \leq b, -\infty < y < +\infty$ 内确定了一个方向场。求解初值问题(1)，其几何意义相当于确定一条通过初始点 (t_0, y_0) 的曲线 $y = y(t)$ ，使曲线上的每一点的切线方向与已给向量场在该点的方向一致。我们从 Euler 法的递推公式中可以看到，从 (t_0, y_0) 点出发求 (t_1, y_1) 点的过程，实际上是从 (t_0, y_0) 出发，沿方向场在这一点的方向 f_0 画一线段，它与直线 $t = t_1$ 的交点，便是所求的 (t_1, y_1) 点，同样从 (t_1, y_1) 点出发，沿方向场在这一点的方向 f_1 画一线段，它与直线 $t = t_2$ 的交点，便是所求的 (t_2, y_2) 点。依次类推，从 (t_{n-1}, y_{n-1}) 出发，便得到所要求的 (t_n, y_n) 点。以 $A_0, A_1, A_2, \dots, A_n$

分别表示这些点。把这些横坐标间隔为 h 的点 $A_0, A_1, A_2, \dots, A_n$, 分别用直线段联起来, 便得到了一条折线 $\overline{A_0A_1}, \overline{A_1A_2}, \dots, \overline{A_{n-1}A_n}, \dots$ 我们将它记作 P_0 。同样, 以 $\frac{h}{2}$ 为步长按上述方法, 从 (t_0, y_0) 这一点出发, 便可得到 $(t_1^{(1)}, y_1^{(1)}), (t_2^{(1)}, y_2^{(1)}), \dots$ 。把这些点联接起来, 就得另一条折线 $P_1, \overline{A_0^{(1)}A_1^{(1)}}, \overline{A_1^{(1)}A_2^{(1)}}, \dots, \overline{A_{n-1}^{(1)}A_n^{(1)}}, \dots$ 。依次类推, 以 $\frac{h}{2^k}$ 作步长得到折线 $P_k: \overline{A_0^{(k)}A_1^{(k)}}, \overline{A_1^{(k)}A_2^{(k)}}, \dots, \overline{A_{n-1}^{(k)}A_n^{(k)}} \dots$ 。这样, 便得到了一个折线序列 $\{P_n\}$, 其中 $A_0 = A_0^{(1)} = \dots = A_0^{(k)} = \dots$ 。

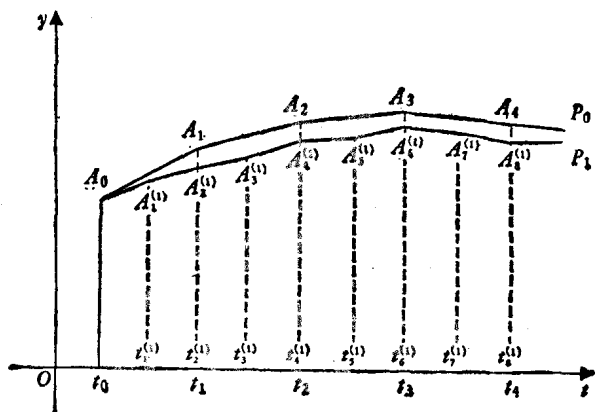


图 2.1

Euler 法便是以折线序列 $\{P_n\}$ 来逼近微分方程精确解的方法, 所以 Euler 法又称为折线法。

1.2. 用 Euler 法解 $y' = \lambda y$ 的收敛性 从前一节对 Euler 法的讨论, 我们可以看到这样一个事实: 折线序列 $\{P_n\}$ 中每一条折线的每一个小线段都是以左端点处方向场所规定的方向为斜率的, 所以如果我们观察 (a, b) 中的某一点 t , 以 $t - a = h$ 作为步长, 用 Euler 公式计算一次, 便得到 t 这一点

$y(t)$ 的近似值 $y_i^{(0)}$, 下标 i 表示横坐标为 t . 如以 $\frac{h}{2}$ 为步长, 使用 Euler 公式计算两次, 所得到的近似值记为 $y_i^{(1)}$. $y_i^{(1)}$ 应较 $y_i^{(0)}$ 更接近 $y(t)$. 因为在中点用微分方程所规定的方向修正了一次, 参看图 2.2.

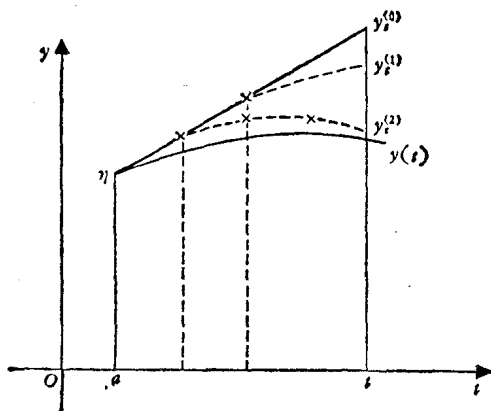


图 2.2

如果以 $\frac{h}{4}$ 为步长用 Euler 公式计算四次, 所得到的 t 这一点的近似值记为 $y_i^{(2)}$, 则 $y_i^{(2)}$ 较之 $y_i^{(1)}$ 更接近于 $y(t)$ 了. 所以, 对固定的任意点 t 以越来越小的步长反复多次使用 Euler 公式所得到的 t 点的数值解, 就会越来越接近微分方程的解在这一点精确值 $y(t)$. 今以初值问题

$$\begin{cases} y' = \lambda y, \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (3)$$

为例来证明这一事实.

这时由于 $f(t, y) = \lambda y$, Euler 公式便化为

$$y_{n+1} = y_n + \lambda h y_n = (1 + \lambda h) y_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

由初始条件 $y(0) = 1$, 得 $y_0 = 1$, 因此有 $y_1 = 1 + \lambda h$, $y_2 = (1 + \lambda h)y_1 = (1 + \lambda h)^2$, 一般有

$$y_n = (1 + \lambda h)^n, \quad n = 1, 2, \dots$$

由于 $n = t/h$, 所以解在 $t_n = t$ 的近似值可以表示成

$$y_n = (1 + \lambda h)^{\frac{t}{h}} = \left[(1 + \lambda h)^{\frac{1}{\lambda h}} \right]^{\lambda t}.$$

令 $h \rightarrow 0$, 即 $n \rightarrow \infty$ 便得到 $y_n \rightarrow e^{\lambda t}$. 这就说明了微分方程初值问题(3)的解在 t 点的值可由 Euler 公式所得到的数值解任意地逼近.

在下节中我们将对一般方程 $y' = f(t, y)$ 来证明 Euler 公式的收敛性.

1.3. 误差分析简介 Euler 法离散误差的估计

理论上由 Euler 法所得的解 y_n , 当 $h \rightarrow 0$ ($nh = t$) 时收敛于微分方程的精确解 $y(t)$. 由于我们总是以一定的步长进行计算的 (其他的数值公式也是这样的), 所以用数值方法求得的解在 t_n 点的近似值 y_n 与微分方程的解 $y(t_n)$ 之间就有差别, 记为

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

我们称 e_n 为 Euler 法在 t_n 点的离散误差. 它是由于微分方程的离散化而产生的, 所以又称为方法误差.

此外, 由于计算机的字长有限, 在计算过程中不可避免地会产生舍入误差, 因此由近似公式计算得到的值 $\tilde{y}_n$ 和 Euler 法的理论解 y_n 也有差别, 记为

$$r_n = \tilde{y}_n - y_n,$$

我们称 r_n 为舍入误差.

如果利用三角不等式, 则可得总误差

$$|\tilde{y}_n - y(x_n)| = |(\tilde{y}_n - y_n) + (y_n - y(x_n))| \leq |e_n| + |r_n|.$$

借助于解析工具, 我们可以估计数值公式所带来的误差, 即离散误差, 而舍入误差却复杂得多, 因为它的产生是多因素的, 概括起来大致可以分为下面几方面:

(i) 计算机的字长;

(ii) 机器所使用的数字系统;

(iii) 定点或浮点运算;

(iv) 数的运算次序;

(v) 计算 $f(x, y)$ 所用子程序的精确度;

以及其它的因素。因此讨论舍入误差是很复杂的,但还是可以设法估计出它的界。例如,可以把舍入误差当作随机变量,采用统计方法,可得较好的结果。Henrici 对定点运算作出了系统的研究¹⁾。

下面讨论 Euler 方法的离散误差。对一阶常微分方程的初值问题

$$\begin{cases} y' = f(t, y), \\ y(0) = \eta, \end{cases} \quad (1)$$

估计用 Euler 法所产生的离散误差的界。此处,假设(1)中的函数 $f(t, y)$ 和它的导数在区域 $R: a \leq t \leq b, -\infty < y < +\infty$ 内连续且有界。这时,存在唯一的解 $y(t)$ 。于是必定存在两个常数 M 和 K ,使得不等式

$$\begin{aligned} |y''(t)| &= |f'(t, y(t))| \\ &= \left| \frac{\partial f(t, y)}{\partial t} + f(t, y) \frac{\partial f(t, y)}{\partial y} \right| \leq M \end{aligned} \quad (4)$$

及

$$|f(t, y) - f(t, y^*)| = \left| \frac{\partial f(t, \alpha)}{\partial y} \right| |y - y^*| \leq K |y - y^*| \quad (5)$$

成立。(5)式是由微分学的中值定理而推得,其中 α 为界于 y, y^* 之间的一个量。 (x, y) 和 (x, y^*) 为区域 R 中的两个点。

在点 t_{n+1} 和 t_n 上的离散误差分别为

1) P. Henrici, Discrete Variable Method in Ordinary Differential Equations, 1962.