高等学校试用教材

常微分方程数值解法

（刚性问题与边值问题）

李庆扬 编著

高等教育出版社

高等学校试用教材

常微分方程数值解法
（刚性问题与边值问题）

李庆扬　编著

高等教育出版社

(京)112号

内容提要

本书是根据应用数学专业教材委员会提出的"常微分方程数值解"的教材基本要求编写的，内容包括两部分，第一部分是刚性方程数值解法，共四章．第一章讨论初值问题数值解法的基本理论，第二、三章介绍解刚性方程各种稳定性概念及线性多步法与隐式Runge-Kutta法及其有关理论，第四章介绍其他解刚性方程的方法．第二部分是两点边值问题的数值方法，也有四章，其中第五、六章介绍将边值问题转化为初值问题的求解方法，第七章为有限差分法，第八章是特征值问题．奇异边值问题，奇异摄动等特殊问题的数值方法

本教材也可供理工科其他有关专业高年级学生、研究生和需要常微计算的科技人员学习参考．

高等学校试用教材

常微分方程数值解法

(刚性问题与边值问题)

李庆扬　编著

*

高等教育出版社出版

新华书店北京科技发行所发行

北京市顺义县印刷厂印装

*

开本 850×1168　1/32　印张 9.125　字数 220 000

1991年9月第1版　1992年7月第1次印刷

印数 0001—1 254

ISBN7-04-003749-1/O·1106

定价3.35元

序　言

在科学和工程技术问题中，有很多问题其数学模型是常微分方程初值问题和边值问题，研究这些问题的数值解法不仅在理论上有重要意义，而且在实际上有广泛的应用．其中初值问题的数值解法比较成熟，理论上较完整，在“数值分析”[1]中对常用的方法和基本概念已有介绍．但很多实际问题，例如化学反应过程，自动控制系统的运行，飞行器运动等都提出了所谓刚性(*stiff*)常微分方程初值问题，在数值求解时往往遇到很大困难，常用的显式方法都不适用，这类问题近二三十年已引起计算数学和从事科学计算专家们的广泛重视，进行了很多探讨，提出了许多新算法和理论．常微分方程边值问题虽然也有很多数值解法和理论．但由于解的存在唯一性理论还不完善，还有许多问题尚待研究，因此也是目前常微分方程数值方法重要的研究方向，这些内容在“数值分析”课中很少涉及，而在科学计算与工程计算中却经常遇到，因此，进一步学习常微刚性问题与边值问题数值解法，对计算数学的本科生和研究生是很必要的，对理工科其他专业的学生和科技人员也有重要的作用，本教材就是为此而编写的．

本书是根据应用数学专业教材委员会提出的“常微分方程数值解”的教学基本要求编写的，内容包括两部分，第一部分是刚性方程数值解法，共四章．第一章讨论初值问题数值解法的基本理论，它是在“数值分析”中常微分方程初值问题数值方法基础上形成的，目的在于加深对已学方法的理解和为学习后三章打基础，第二、三章介绍解刚性方程各种稳定性概念及线性多步法与隐式

Runge-Kutta 法及其有关理论．第四章介绍其他解刚性方程的方法．第二部分是两点边值问题的数值方法，也有四章，其中第五、六章介绍将边值问题转化为初值问题求解的方法，包括打靶法、连续法、不变嵌入法等．第七章为有限差分法．第八章是特征值问题、奇异边值问题、奇异摄动等特殊问题的数值方法．

由于目前国内尚未见到本书内容的教材，国外"常微分方程数值解"的教材不少，但与本书要求差别较大，这给本教材的编写带来相当困难，我在参考国内外大量文献资料基础上形成本教材的体系，在选材上着重基本方法、概念和理论，同时注意反映70年代以来该领域的新方法及其理论．在介绍算法中注意结合计算机特点与实际应用，对常用方法都给出算法步骤与数值例题．在内容处理上力求深入浅出，符合认识规律，作为教材每章配有习题与上机实习题，便于教学，还注意与相关计算数学教材的配合．学习本教材应具有数值分析、微积分、常微分方程与高等代数的基础知识，还应具有用 FORTRAN 语言编程上机计算的能力．本教材的两部分内容相对独立，根据需要可以只学其中一部分．本教材也可供理工科其他有关专业高年级学生、研究生和需要常微计算的科技人员学习参考．

本教材初稿曾在清华大学应用数学系研究生与本科生中使用多次，并在此基础上进行修改，但因这是一项新的工作，作者对这一领域学习研究尚不深入，编写中错误或不妥之处请读者批评指正．

在上海召开的全国高等工科院校应用数学专业教材委员会计算数学审稿会上，施吉林教授及其他与会同志，对本书初稿提出了许多宝贵意见，对本书的修改很有帮助，特此表示感谢对清华大学应用数学系领导和有关老师的支持和高等教育出版社有关编辑的具体帮助，本人也深表感谢．

李庆扬

1990年7月

目 录

第一部分 刚性常微分方程数值解法

第二部分 边值问题数值解法

第一部分　刚性常微分方程数值解法

许多用常微分方程组初值问题描述的物理或化学过程，往往包含有快变化与慢变化过程，有时变化速度可以相差很大的数量级，相应微分方程组的解也将包含快变分量与慢变分量，如果变化速度相差很大，数学上就称这种常微分方程组为刚性($stiff$) 方程. 用数值方法求解这种方程将遇到很大困难，理论和实践均已说明，许多方法特别是显式方法很难求出正确的解，为解决这类问题已经提出了许多理论和数值方法，这部分内容就是讨论求解刚性方程数值方法及其理论.

第一章　初值问题数值方法的基本理论

§1 引　言

考虑常微分方程组初值问题

$$\begin{cases} \boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}), & x \in [a, b], \\ \boldsymbol{y}(a) = \boldsymbol{y}_0, \end{cases} \tag{1.1}$$

其中 $\boldsymbol{y} = (y^1, \cdots, y^m)^T$, $\boldsymbol{f} = (f^1, \cdots, f^m)^T \in R^m$, 是已知的向量函数，$\boldsymbol{y}_0 \in R^m$ 是已知初始向量，下面讨论数值求解初值问题时总假定 $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$ 对 y 满足 Lipschitz(简写为 Lips.)条件，即对 $\forall x \in [a, b]$ 及 $\forall \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \in R^m$，总存在常数 $L > 0$，使

$$\|\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) - \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{z})\| \leqslant L \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{z}\| \tag{1.2}$$

成立，L 称为 Lips. 常数. 在这假定下初值问题 (1.1) 存在唯一

解 $y(x)$，用数值方法求它的解就是在$[a,b]$的一系列离散点 $x_{n+1}=x_n+h_n$，$h_n>0(n=0,1,\cdots,N-1)$ 上求解 $y(x)$ 的近似值 $y_n\approx y(x_n)$，这里 $x_0=a,x_N=b,h_n$ 称为步长，若 $h_n=h=\frac{b-a}{N}$ 则为等步长，在"数值分析"[1]中已对 $m=1$ 的情形给出了各种数值方法，并推广到 $m>1$ 的情形. 因此在讨论初值问题 (1.1)的数值解法时我们无妨假定 $m=1$，这时常用的数值方法均可用统一的公式表示，即

$$
(1.3)\qquad \begin{cases}\sum_{i=0}^{k}\alpha_i y_{n+i}=h\phi_f(x_n;y_{n+k},\cdots,y_n;h),\ 0\leqslant n\leqslant N-k,\\ y_r=S_r(h),\quad 0\leqslant r<k,\end{cases}
$$

其中 $\alpha_k\neq 0,y_0,\cdots,y_{k-1}$ 是已给出的值，当 $k=1$ 时称为单步法，$k>1$ 时称为多步法，由(1.3)可算出数值解序列$\{y_n\}$，公式(1.3)中 ϕ_f 取得不同时就得到不同数值方法，常用的方法有以下三种:

(a) 线性多步法(LMM). 在(1.3)中令

$$
\phi_f(x_n;y_{n+k},\cdots,y_n;h)=\sum_{i=0}^{k}\beta_i f(x_{n+i},y_{n+i}),
$$

于是方法(1.3)可表示为

$$
(1.4)\qquad \sum_{i=0}^{k}\alpha_i y_{n+i}=h\sum_{i=0}^{k}\beta_i f(x_{n+i},y_{n+i}),\ \alpha_k\neq 0,
$$

这公式就称为线性多步法，当 $\beta_k=0$ 时为显式公式，例如 Adams-Bashforth 公式 [1]，也称 Adams 显式公式. 当 $\beta_k\neq 0$ 时称为隐式公式，如 Adams-Moulton 公式[1]，也称 Adams 隐式公式. $k=4$ 的显式公式是

$$
(1.5)\qquad y_{n+4}=y_{n+3}+\frac{h}{24}(55f_{n+3}-59f_{n+2}+37f_{n+1}-9f_n),
$$

$k=3$ 的 Adams 隐式公式是

$$(1.6)\qquad y_{n+3}=y_{n+2}+\frac{h}{24}(9f_{n+3}+19f_{n+2}-5f_{n+1}+f_n),$$

这两个公式都是 4 阶公式.

为讨论方便，我们引入记号

$$\rho(\xi)=\sum_{i=0}^{k}\alpha_i\xi^i,$$

称为第一特征多项式.

$$\sigma(\xi)=\sum_{i=0}^{k}\beta_i\xi^i,$$

称为第二特征多项式.

(*b*) 预测校正法(PECE). 在(1.3)中令

$$(1.7)\qquad \phi_f=\beta_k f\left(x_{n+k},\frac{1}{\alpha_k^*}\sum_{i=0}^{k-1}[-\alpha_i^* y_{n+i}+\beta_i^* f(x_{n+i},y_{n+i})]\right)$$
$$+\sum_{i=0}^{k-1}\beta_i f(x_{n+i},y_{n+i})$$

就得到预测校正公式，它是用显式公式预测，再代入隐式公式得到的. 例如 Hamming 预测校正公式

$$y_{n+4}=\frac{1}{8}(9y_{n+3}-y_{n+1})+\frac{3}{8}h(\bar{f}_{n+4}+2f_{n+3}-f_{n+2}),$$

其中

$$\bar{f}_{n+4}=f(x_{n+4},\bar{y}_{n+4}),\quad f_{n+i}=f(x_{n+i},y_{n+i})$$

$$\bar{y}_{n+4}=y_n+\frac{4}{3}h(2f_{n+3}-f_{n+2}+2f_{n+1}).$$

在预测校正公式(1.7)中仍用 ρ 和 σ 表示校正的特征多项式. 而用 ρ^* 及 σ^* 表示预估的特征多项式. 即

$$\rho^*(\xi)=\sum_{i=0}^{k}\alpha_i^*\xi^i,$$

$$\sigma^*(\xi)=\sum_{i=0}^{k-1}\beta_i^*\xi^i.$$

(c) 龙格-库塔(Runge-Kutta)法. 在(1. 3)中取 $k=1$, 且

$$\phi_f=\sum_{j=1}^{s}c_jk_j,$$

其中 k_j 由(1. 8b)表示,这时公式(1. 3)表示为

$$y_{n+1}=y_n+h\sum_{j=1}^{s}c_jk_j, \tag{1. 8a}$$

$$k_j=f(x_n+a_jh,y_n+h\sum_{l=1}^{s}b_{jl}k_l),\ j=1,\cdots,s, \tag{1. 8b}$$

这公式称为 Runge-Kutta 法,简称 RK 方法,其中 $s\leqslant 4$ 的显式公式是大家很熟悉的[1],至于隐式 RK 方法在第三章中将详细讨论.

以上三种方法在"数值分析"课中都有介绍,但对方法的收敛性,稳定性及误差估计等问题讨论很少. 本章从一般公式 (1. 3) 出发对这些问题做深入讨论,它是初值问题数值解的基本理论,也是研究刚性问题数值方法的理论基础.

§2 相容性、收敛性与稳定性

2.1 相容性与收敛性

研究初值问题(1. 1)的数值解法第一个问题是数值公式(或称差分方程)(1. 3)是否逼近微分方程,即差分算子是否逼近微分算子,这就是相容性问题,下面先介绍有关定义.

定义 1.1 设 $y(x)$是方程(1. 1)的精确解,则方法(1. 3) 在 x_n 处的局部离散误差 d_n 定义为

$$
(1.9)\quad \begin{cases} d_r = y(x_r) - s_r(h), \quad 0 \leqslant r < k, \\ d_{n+k} = \dfrac{1}{\rho'(1)h}\Big[\sum\limits_{i=0}^{k} \alpha_i y(x_{n+i}) - h\phi_f(x_n; y(x_{n+k}), \cdots, \\ \qquad y(x_n); h)\Big], 0 \leqslant n \leqslant N-k. \end{cases} \qquad \square
$$

由定义可知 d_n 实际上是用方程(1.1)的精确解在相应点 x_{n+i} 上的值 $y(x_{n+i})$ 代入公式(1.3)中对应点的值所产生的误差，一般说 $d_n \neq 0$, d_n 的大小表明了用公式(1.3)逼近方程(1.1)的精确程度，而在[1]中定义的局部截断误差 T_n 可表示为 $T_n = \rho'(1)hd_n$, 因此，**局部离散误差 d_n 与公式阶数一致.**

定义 1.2 对形如(1.3)的数值方法，如果

$$
\lim_{h\to 0} \max_{0\leqslant n\leqslant N} |d_n| = 0,
$$

就称该方法与微分方程(1.1)是相容的. 如果 $\max\limits_{0\leqslant h\leqslant N} |d_n| = O(h^p)$, 则称方法(1.3)是 p 阶相容的. □

由于(1.1)的解 $y(x) \in C^1[a,b]$, 故可利用中值定理将(1.9)第二式改写为

$$
\begin{aligned}
d_{n+k} &= \frac{1}{\rho'(1)h}\Big\{\sum_{i=0}^{k} \alpha_i [y(x_n) + ihy'(x_n + \lambda_i ih)] \\
&\qquad - h\phi_f(x_n; y(x_{n+k}), \cdots, y(x_n); h)\Big\} \\
&= \frac{1}{\rho'(1)h}\Big\{y(x_n)\sum_{i=0}^{k}\alpha_i + h\Big[\sum_{i=0}^{k} i\alpha_i f(x_n + i\lambda_i h, y(x_n + i\lambda_i h)\Big] \\
&\qquad - \phi_f(x_n; y(x_{n+k}), \cdots, y(x_n); h)\Big\}, \\
&\qquad\qquad 0 \leqslant \lambda_i \leqslant 1; \\
&\qquad\qquad 0 \leqslant n \leqslant N-k.
\end{aligned}
$$

于是由定义 1.2 得到方法(1.3)相容的充分必要条件是

$$
(1.10)\quad \begin{cases} (\text{i})\ \ y_r \to y_0, \text{当 } h \to 0, 0 \leqslant r < k. \\ (\text{ii})\ \ \sum\limits_{i=0}^{k} \alpha_i = \rho(1) = 0. \\ (\text{iii})\ \ \lim\limits_{h\to 0} \phi_f(x_n; y(x_{n+k}), \cdots, y(x_n); h) \end{cases}
$$

$$=\rho'(1)f(x_n,y(x_n)),$$

其中 $$\rho'(1)=\sum_{i=0}^{k} i\alpha_i.$$

根据公式(1.3)中 ϕ_f 的三种不同取法，条件(iii)对不同情况分别等价于下列条件:

$$(1.11)\quad\begin{cases}(a)\ LMM\ \text{方法}.\ \sigma(1)=\rho'(1),\\(b)\ PECE\ \text{方法}:\sigma(1)=\rho'(1),\rho^*(1)=0.\\(c)\ \text{RK方法}:\quad \sum_{j=1}^{s} c_j=\rho'(1).\end{cases}$$

在条件(1.10) 中(i)实际上是针对初始条件给出的，如果就(1.1)的方程而言,数值方法(1.3) 的相容性条件就是 $\rho(1)=0$ 及(1.11)中(a)或(b)或(c),例如对 LMM 方法相容性条件是

$$\rho(1)=0\ \text{及}\ \rho'(1)=\sigma(1).$$

其余两种方法也可类似给出.

定义 1.3 用数值方法(1.3)求解初值问题 (1.1)，如果对任何固定点 $x\in[a,b]$, $x=a+nh=x_n$, 有

$$\lim_{\substack{h\to 0\\(n\to\infty)}} y_n=y(x),\ \text{或}\ \lim_{\substack{h\to 0\\(n\to\infty)}}\|y_n-y(x_n)\|=0,$$

就称方法(1.3)得到的数值解 $\{y_n\}$ 收敛于方程 (1.1) 的精确解 $y(x)$,简称方法是收敛的. □

由此定义立即得

定理 1.1 数值方法(1.3)是收敛的则它一定是相容的.

证明 假定由 (1.3) 生成的序列$\{y_n\}$收敛于一个非恒为常量的函数 $y(x)$, 当 $x=a+nh$ 时, 则有

$$\lim_{\substack{h\to 0\\(n\to\infty)}} y_{n+i}=y(x),\ i=0,1,\cdots,k.$$

从(1.3)取极限,得到

$$\sum_{i=0}^{k}\alpha_i y(x)=0,\text{因 } y(x)\neq 0,\ \text{故 }\sum_{i=0}^{k}\alpha_i=0.$$

因此(1.10(ii))成立，注意上述推导并未假定 $y(x)$是(1.1)的解，下面假定 $y(x)$为(1.1)的解，即 $y'(x)=f(x,\ y(x))$，现将(1.3)改写为

$$\sum_{i=0}^{k} i\alpha_i(y_{n+i}-y_n)/ih=\phi_f(x_n;y_{n+k},\cdots,y_n;h),$$

由于 $y(x)\in C^1[a,b]$，对 $\forall x\in[a,b]$，取 $n=\dfrac{x-a}{h}$，当 $h\to 0$ 时，

$$y_n\to y(x),\ \frac{y_{n+i}-y_n}{ih}\to y'(x),\ i=1,\cdots,k,$$

于是

$$\phi_f(x_n;y_{n+k},\cdots,y_n;h)\to\sum_{i=0}^{k} i\alpha_i y'(x)=\rho'(1)f(x,y(x)),$$

即(1.10(iii))成立．由于 $y(x)$满足(1.1) 的初始条件，则(1.10(i))也成立．于是相容性条件(1.10)成立，故方法相容．□

一般说定理1.1的逆定理是不成立的，例1.1给出了相容而不收敛例子，但下节将证明对单步法逆定理也成立．

例1.1 用线性2步法

$$(1.12)\qquad\begin{cases}y_{n+2}=3y_{n+1}-2y_n+h(f_{n+1}-2f_n),0\leqslant n\leqslant N-2,\\ y_0=s_0(h),s_1=s_1(h),\end{cases}$$

求解初值问题

$$y'=2x,y(0)=0.$$

证明方法是相容的但不收敛．

解 此初值问题精确解 $y(x)=x^2$，由(1.12)知

$$\rho(\xi)=\xi^2-3\xi+2,\sigma(\xi)=\xi-2,$$

故 $\rho(1)=0,\sigma(1)=\rho'(1)$，还可选择初始值使当 $h\to 0$ 时，$s_0(h)\to 0$，

$s_1(h)\to 0$，故方法(1.12)是相容的.

下面研究差分方程的解序列$\{y_n\}$的收敛性，由(1.12)知$\{y_n\}$满足差分方程

$$(1.13)\quad \begin{cases}\text{(i)}\ \ y_0=s_0(h),\ y_1=s_1(h).\\ \text{(ii)}\ \ y_{n+2}-3y_{n+1}+2y_n=2h(x_{n+1}-2x_n)=2h^2(1-n),\\ \qquad\qquad 0\leqslant n\leqslant N-2.\end{cases}$$

根据线性差分方程解的构造(见本章附录)，由(1.13)的特征方程$\rho(\xi)=\xi^2-3\xi^2+2=0$根为$\xi_1=1$．$\xi_2=2$，且非齐次差分方程(1.13(ii))有一个特解为$n(n-1)h^2$，于是差分方程(1.13(II))的一般解为

$$y_n=A+B2^n+n(n-1)h^2,$$

A,B为任意常数，可由条件(1.13(I))确定，故(1.13)的解为

$$(1.14)\quad y_n=[2s_0(h)-s_1(h)]+[s_1(h)-s_0(h)]2^n+n(n-1)h^2.$$

如果选初始值$s_0(h)=s_1(h)=0$（它满足相容性条件），则对$\forall x=nh\in[a,b]$都有

$$y_n=n(n-1)h^2=(nh)^2-(nh)h=x^2-xh\to x^2,\ h\to 0.$$

但当初始值选为当$h\to 0$时$s_0(h)\to 0$，$s_1(h)\to 0$且$s_1(h)-s_0(h)=0(h^q)$，$q>0$，由于

$$\lim_{h\to 0}h^q\xi^n=x^q\lim_{n\to\infty}\frac{\xi^n}{n^q}=\infty,$$当$|\xi|>1$时．由(1.14)中y_n的第二项当$h\to 0$时显然得

$$y_n\to\infty.$$

故方法不收敛.

2.2 稳定性与收敛性

在实际计算中，由于初始值不精确或计算过程舍入误差传播，使计算结果产生影响，如上例1.1，由于初始值有微小误差（或称