8.3 Runge—Kutta方法

一、Runge-Kutta方法的基本思想

由Taylor展式

$$y(x_{n+1}) = y(x_n + h)$$

$$\approx y_{n+1} = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(x_n) + \cdots + \frac{h^p}{p!} y^{(p)}(x_n)$$

$T_{n+1} = O(h^{p+1})$，若提高p，可提高精度.

但因 $y' = f(x, y)$

$$y''(x) = f_x'(x, y) + f_y'(x, y) \cdot f(x, y)$$

……

高阶导数计算复杂，故可从另外角度考虑.

分析Euler公式及改进的Euler公式：

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hK_1 \\ K_1 = f(x_n, y_n) \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(\frac{K_1}{2} + \frac{K_2}{2}) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1) \end{cases}$$

局部截断误差：$O(h^2)$　　　局部截断误差：$O(h^3)$

可用$f(x,y)$在某些点处值的线性组合得y_{n+1}，增加计算$f(x,y)$的次数可提高阶数.

Runge-Kutta方法的基本思想：

设法计算$f(x,y)$在某些点上的函数值，然后对这些函数值作线性组合，构造近似计算公式，再把近似公式和解的泰勒展开式相比较，使前面的若干项吻合，从而获得达到一定精度的数值计算公式．

设

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{r} c_i K_i \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_i = f(x_n + \lambda_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{i-1} \mu_{ij} K_j), (i = 2, 3, \cdots, r) \end{cases}$$

c_i, λ_i, μ_{ij} 为待定常数.

上面第一个式子的右端在(x_n,y_n)作泰勒展开后,按h的幂次作升序排列：

$$y_{n+1}=y_n+\gamma_1 h+\frac{1}{2!}\gamma_2 h^2+\frac{1}{3!}\gamma_3 h^3+\cdots$$

再与初值问题的精确解$y(x)$在点$x=x_n$处的泰勒展开式

$$y(x_{n+1})=y(x_n+h)$$

$$=y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2!}y''(x_n)+\cdots+\frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x_n)+O(h^{p+1})$$

相比较，使其有尽可能多的项重合.

例如，要求

$$\gamma_1 = f_n, \gamma_2 = f_n', \gamma_3 = f_n'', \cdots, \gamma_p = f_n^{(p-1)}$$

就得到p个方程，从而定出参数c_i，λ_i，μ_{ij}，再代入K_1，K_2，…，K_r的表达式，就可得到计算微分方程初值问题的数值计算公式：

$$y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{r} c_i K_i$$

上式称为r 级Runge—Kutta方法的计算公式.

若 $T_{n+1}= O(h^{p+1})$，则称其为p 阶r 级R—K方法.

当r=1时，就是Euler方法.

要使Runge–Kutta公式具有更高的阶p，就要增加r的值. 下面我们只就r=2推导R–K方法.

二、二阶Runge-Kutta方法

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(c_1 K_1 + c_2 K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \lambda_2 h, y_n + \mu_{21} h K_1) \end{cases}$$

其中 $c_1, c_2, \lambda_2, \mu_{21}$ 待定.

上式的局部截断误差为：

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= y(x_{n+1}) - y_n \\ &\quad - h[c_1 f(x_n, y_n) + c_2 f(x_n + \lambda_2 h, y_n + \mu_{21} h f_n)] \end{aligned}$$

由 $$y(x_{n+1}) = y_n + hy_n' + \frac{h^2}{2!} y_n'' + O(h^3)$$

利用二元函数的Taylor展开，得

$$\begin{cases} y_n' = f(x_n, y_n) = f_n \\ y_n'' = \dfrac{d}{dx} f(x_n, y(x_n)) = f_x'(x_n, y_n) + f_y'(x_n, y_n) \cdot f_n \end{cases}$$

又 $$f(x_n + \lambda_2 h, y_n + \mu_{21} h f_n)$$
$$= f_n + f_x'(x_n, y_n)\lambda_2 h + f_y'(x_n, y_n)\mu_{21} h f_n + O(h^2)$$

代入T_{n+1}的表达式，得

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_n$$

$$- h[c_1 f(x_n, y_n) + c_2 f(x_n + \lambda_2 h, y_n + \mu_{21} h f_n)]$$

$$= y_n + h y_n' + \frac{h^2}{2!} y_n'' + O(h^3)$$

$$- y_n - h[c_1 f(x_n, y_n) + c_2 f(x_n + \lambda_2 h, y_n + \mu_{21} h f_n)]$$

$$= h f_n + \frac{h^2}{2}[f_x'(x_n, y_n) + f_y'(x_n y_n) f_n] - h[c_1 f_n$$

$$+ c_2(f_n + \lambda_2 f_x'(x_n, y_n) h + \mu_{21} f_y'(x_n, y_n) f_n h)] + O(h^3)$$

$$= (1 - c_1 - c_2) f_n h + (\frac{1}{2} - c_2 \lambda_2) f_x'(x_n, y_n) h^2$$

$$+ (\frac{1}{2} - c_2 \mu_{21}) f_y'(x_n, y_n) f_n h^2 + O(h^3)$$

要使上式p=2阶，则需

$$\begin{cases} 1 - c_1 - c_2 = 0 \\ \dfrac{1}{2} - c_2\lambda_2 = 0 \\ \dfrac{1}{2} - c_2\mu_{21} = 0 \end{cases} \quad \text{即} \quad \begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ c_2\lambda_2 = \dfrac{1}{2} \\ c_2\mu_{21} = \dfrac{1}{2} \end{cases}$$

方程组解不唯一，可令$c_2=a \neq 0$，则

$c_1 = 1-a$， $\lambda_2 = \mu_{21} = 1/(2a)$

满足上述条件的公式都为2阶R–K公式.

如取$a= ½$，则$c_1= c_2= ½$，$\lambda_2=\mu_{21}=1$，即为改进Euler公式.

若取$a= 1$，则$c_1= 0$，$c_2= 1$，$\lambda_2=\mu_{21} = ½$，得

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hK_2 \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \dfrac{h}{2}, y_n + \dfrac{h}{2} K_1) \end{cases}$$

称中点公式，相当于数值积分的中矩形公式：

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f(x_n, y_n))$$

三、三阶与四阶Runge-Kutta方法

当r=3时，R–K公式表示为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(c_1 K_1 + c_2 K_2 + c_3 K_3) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \lambda_2 h, y_n + \mu_{21} h K_1) \\ K_3 = f(x_n + \lambda_3 h, y_n + \mu_{31} h K_1 + \mu_{32} h K_2) \end{cases}$$

其中 $c_1, c_2, c_3, \lambda_2, \mu_{21}, \lambda_3, \mu_{31}, \mu_{32}$ 为8个待定常数.

上式的局部截断误差为

$$T_{n+1} = y_{n+1} - y_n - h[c_1 K_1 + c_2 K_2 + c_3 K_3]$$

类似二阶的推导过程，将K_2,K_3按二元函数展开，使$T_{n+1}=O(h^4)$，得

$$\begin{cases} c_1+c_2+c_3=1 \\ \lambda_2=\mu_{21} \\ \lambda_3=\mu_{31}+\mu_{32} \\ c_2\lambda_2+c_3\lambda_3=\dfrac{1}{2} \\ c_2\lambda_2^2+c_3\lambda_3^2=\dfrac{1}{3} \\ c_3\lambda_2\mu_{32}=\dfrac{1}{6} \end{cases}$$

方程有8个未知数，解不唯一.

满足该条件的公式统称为**三阶R–K公式**.

其中一个常用公式为：

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+\dfrac{h}{6}(K_1+4K_2+K_3) \\ K_1=f(x_n,y_n) \\ K_2=f(x_n+\dfrac{h}{2},y_n+\dfrac{h}{2}K_1) \\ K_3=f(x_n+h,y_n-hK_1+2hK_2) \end{cases}$$

当r=4时，利用相同的推导过程，经过较复杂的计算，可以得出四阶R–K公式的成立条件.

下列经典公式是其中常用的一个：

$$
\begin{cases}
y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\
K_1 = f(x_n, y_n) \\
K_2 = f(x_n + \dfrac{h}{2}, y_n + \dfrac{h}{2}K_1) \\
K_3 = f(x_n + \dfrac{h}{2}, y_n + \dfrac{h}{2}K_2) \\
K_4 = f(x_n + h, y_n + hK_3)
\end{cases}
$$

8.4 单步法的收敛性和稳定性

一、单步法的收敛性

定义： 若某数值方法对于任意固定的节点$x_n = x_0+nh$ $(n=0,1,2,\ldots)$，当$h\to 0$时有$y_n \to y(x_n)$，则称该方法是收敛的.

定理： 设$y_{n+1}=y_n+h\varphi(x_n, y_n, h)$具$p$阶精度，且$\varphi(x, y,h)$关于$y$满足Lipschitz条件

$$|\varphi(x,y,h)-\varphi(x,\bar{y},h)| \le L_\varphi |y-\bar{y}|$$

又设初值y_0准确，即$y_0=y(x_0)$，则其整体截断误差

$$y(x_n)-y_n= O(h^p).$$

证明： 记 $\bar{y}_{n+1} = y(x_n) + h\varphi(x_n, y(x_n), h)$

若取 $y_n = y(x_n)$

则局部截断误差 $T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \bar{y}_{n+1}$

由已知条件$T_{n+1} = O(h^{p+1})$，即存在常数C，使

$$|y(x_{n+1}) - \bar{y}_{n+1}| \le Ch^{p+1}$$

又

$$|\bar{y}_{n+1} - y_{n+1}| = |y(x_n) + h\varphi(x_n, y(x_n), h) - (y_n + h\varphi(x_n, y_n, h))|$$

$$\le |y(x_n) - y_n| + h|\varphi(x_n, y(x_n), h) - \varphi(x_n, y_n, h)|$$

$$\le |y(x_n) - y_n| + hL_\varphi |y(x_n) - y_n|$$

$$\le (1 + hL_\varphi)|y(x_n) - y_n|$$

故 $$\left|y(x_{n+1})-y_{n+1}\right|\le\left|\bar{y}_{n+1}-y_{n+1}\right|+\left|y(x_{n+1})-\bar{y}_{n+1}\right|$$
$$\le(1+hL_{\varphi})\left|y(x_n)-y_n\right|+Ch^{p+1}$$

即对整体截断误差e_n，满足

$$\left|e_n\right|=\left|y(x_n)-y_n\right|\le(1+hL_{\varphi})\left|e_{n-1}\right|+Ch^{p+1}$$
$$\le(1+hL_{\varphi})\left[(1+hL_{\varphi})\left|e_{n-2}\right|+Ch^{p+1}\right]+Ch^{p+1}$$
$$\le\cdots\ \cdots$$
$$\le(1+hL_{\varphi})^n\left|e_0\right|+\frac{Ch^p}{L_{\varphi}}\left[(1+hL_{\varphi})^n-1\right]$$

当$x_n-x_0=nh\le T$时，

$$(1+hL_{\varphi})^n\le(e^{hL_{\varphi}})^n\le e^{TL_{\varphi}}$$

可得下列估计式 $$|e_n| \le |e_0| e^{TL_\varphi} + \frac{Ch^p}{L_\varphi}(e^{TL_\varphi} - 1)$$

若$e_0=0$，则 $$|e_n| \le \frac{Ch^p}{L_\varphi}(e^{TL_\varphi} - 1)$$

即 $y(x_n) - y_n = O(h^p)$.

注：定理表明，当$p\ge 1$时单步法收敛.

二、单步法的稳定性

关于收敛性的讨论有个前提，即必须假定差分方法的每一步计算都是准确的. 然而实际计算中往往由于有舍入误差等原因而产生扰动，而这些扰动有可能 “淹没”真解，所以我们还要考虑稳定性问题.

定义： 某数值方法在节点y_n上有大小为δ的扰动，对于以后各节点值$y_m(m>n)$上产生的偏差均不超过δ，则称该方法是绝对稳定的.

稳定性分析相当复杂，不仅与方法本身有关，而且总跟方程的右端 $f(x,y)$ 和步长h有关.

为简单起见，通常只对试验方程（也称模型方程）

$$\frac{dy}{dx}=\lambda y$$

（其中 λ为常数，当 λ是复数时，$Re(\lambda)<0$）

进行讨论，即研究将数值方法用于解该方程时得到的差分方程是否数值稳定.

依据： 若一个数值方法对如此简单问题都不稳定的话，对一般微分方程更不稳定；若某一数值方法对试验方程稳定，对一般方程却不一定也是稳定的.

但试验方程在一定程度上还是反映了数值方法的特性.

定义：一个数值方法用于解试验方程 $\dfrac{dy}{dx}=\lambda y$

若在 $\mu=\lambda h$复平面中的某个区域R中方法都是绝对稳定的，而在域R外，方法是不稳定的，则称区域R是该数值方法的**绝对稳定域**. 与实轴的交称**绝对稳定区间**.

显然，R越大，绝对稳定性越好，若某个数值方法的绝对稳定域包含$\mu=\lambda h$复平面中左半平面，则称该数值方法是**A—稳定**的.

例如，对Euler方法： $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$

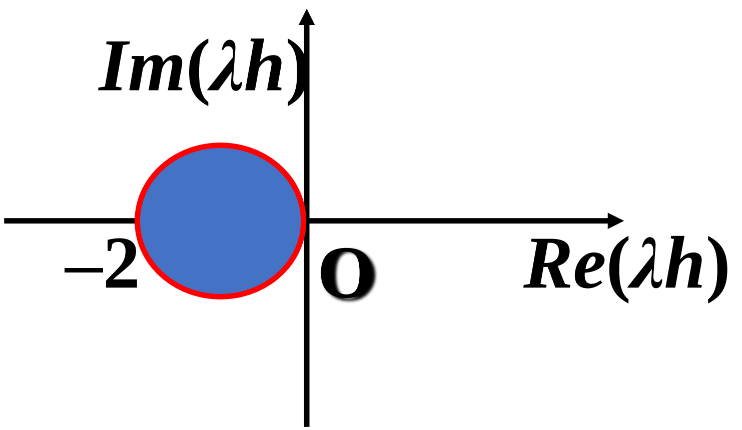
解$y`=\lambda y$，得 $y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n = (1+\lambda h)y_n$

故 $\delta_{n+1} = (1+\lambda h)\delta_n$

当$m>n$时，要使 $|\delta_m| < |\delta_n|$ 只要 $|1+\lambda h| < 1$

此时Euler方法是绝对稳定的.

在 $\mu=\lambda h$复平面上，$|1+\mu|<1$表示以$(-1,0)$为圆心，1为半径的单位圆内.



绝对稳定区间：$-2< \lambda h<0$

对后退的Euler方法：　$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$

解$y` = \lambda y$，得　$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1}$

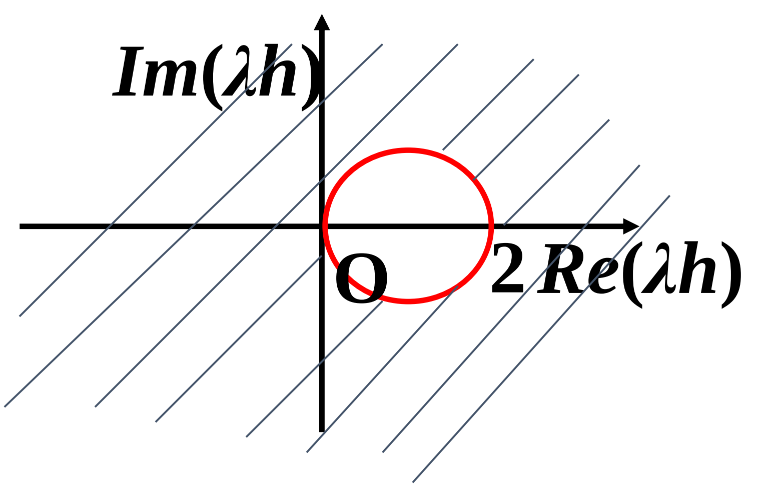
则　$y_{n+1} = \dfrac{1}{1-\lambda h} y_n$　　故　$\delta_{n+1} = \dfrac{1}{1-\lambda h}\delta_n$

绝对稳定域：$\left|\dfrac{1}{1-\lambda h}\right| < 1$　即　$|1-\lambda h| > 1$

在$\mu=\lambda h$复平面上，是以(1,0)为圆心，1为半径的圆外部.

包含左半平面，因此是

A—稳定的.



由上知，Euler方法（显式）与后退Euler方法（隐式）阶数相同，但后退的Euler方法的绝对稳定域大得多，说明隐式方法稳定性比显式方法好.

对二阶R-K方法（改进的Euler方法），用其解 $y`=\lambda y$，得

$$y_{n+1}=y_n+\frac{1}{2}\left[\lambda h y_n+\lambda h(y_n+\lambda h y_n)\right]$$

$$=\left[1+\lambda h+\frac{(\lambda h)^2}{2}\right]y_n$$

令$\mu=\lambda h$，得 $y_{n+1}=\left[1+\mu+\frac{\mu^2}{2}\right]y_n$

绝对稳定域：$\left|1+\mu+\frac{\mu^2}{2}\right|<1$

由曲线 $\left|1+\mu+\frac{\mu^2}{2}\right|=1$ 围成.

经典的四阶R-K方法的绝对稳定域：

$$\left|1+\mu+\frac{\mu^2}{2!}+\frac{\mu^3}{3!}+\frac{\mu^4}{4!}\right|<1$$

8.5 线性多步法

计算 y_{n+k} 时，除用 y_{n+k-1} 的值外，还用到 y_{n+i} $(i=0,1,\ldots,k-2)$的值，则称此方法为线性多步法.

一、一般公式：

$$y_{n+k}=\alpha_0 y_n+\alpha_1 y_{n+1}+\cdots+\alpha_{k-1}y_{n+k-1}+h(\beta_0 f_n+\beta_1 f_{n+1}+\cdots+\beta_k f_{n+k})$$

$$=\sum_{i=0}^{k-1}\alpha_i y_{n+i}+h\sum_{i=0}^{k}\beta_i f_{n+i}$$

其中 $f_{n+i}=f(x_{n+i},y_{n+i})$， $x_{n+i}=x_0+ih$， α_i,β_i为常数.

若α_0 ，β_0不全为0，称线性k步法；若β_k=0，称显式k步法；否则称隐式k步法.

系数α_i及β_i可根据方法的局部截断误差及阶确定.

定义：线性k步法在x_{n+k}上的局部截断误差为

$$T_{n+k}=y(x_{n+k})-\sum_{i=0}^{k-1}\alpha_i y(x_{n+i})-h\sum_{i=0}^{k}\beta_i y'(x_{n+i})$$

若T_{n+k}= $O(h^{p+1})$，则称多步法为p阶的.

由 $$y(x_n+ih)=y(x_n)+ihy'(x_n)+\frac{(ih)^2}{2!}y''(x_n)+\frac{(ih)^3}{3!}y'''(x_n)+\cdots$$

$$y'(x_n+ih)=y'(x_n)+ihy''(x_n)+\frac{(ih)^2}{2!}y'''(x_n)+\cdots$$

得 $$T_{n+k}=y(x_{n+k})-\sum_{i=0}^{k-1}\alpha_i y(x_{n+i})-h\sum_{i=0}^{k}\beta_i y'(x_{n+i})$$

$$=y(x_n+kh)-\sum_{i=0}^{k-1}\alpha_i y(x_n+ih)-h\sum_{i=0}^{k}\beta_i y'(x_n+ih)$$

$$=y(x_n)+khy'(x_n)+\frac{(kh)^2}{2!}y''(x_n)+\frac{(kh)^3}{3!}y'''(x_n)+\cdots$$

$$-\sum_{i=0}^{k-1}\alpha_i\left[y(x_n)+ihy'(x_n)+\frac{(ih)^2}{2!}y''(x_n)+\frac{(ih)^3}{3!}y'''(x_n)+\cdots\right]$$

$$-h\sum_{i=0}^{k}\beta_i\left[y'(x_n)+ihy''(x_n)+\frac{(ih)^2}{2!}y'''(x_n)+\cdots\right]$$

$$=c_0y(x_n)+c_1hy'(x_n)+c_2h^2y''(x_n)+\cdots+c_ph^py^{(p)}(x_n)+\cdots$$

其中 $c_0 = 1 - (\alpha_0 + \cdots + \alpha_{k-1})$

$$c_1 = k - [\alpha_1 + 2\alpha_2 + \cdots + (k-1)\alpha_{k-1}] - (\beta_0 + \beta_1 + \cdots + \beta_k)$$

……

$$c_q = \frac{1}{q!}[k^q - (\alpha_1 + 2^q\alpha_2 + \cdots + (k-1)^q\alpha_{k-1})]$$

$$-\frac{1}{(q-1)!}[\beta_1 + 2^{q-1}\beta_2 + \cdots + k^{q-1}\beta_k] \quad q=2,3,\ldots$$

若选α_i , β_i，使$c_0=c_1=c_2=\ldots=c_p=0$，$c_{p+1}\neq 0$

则 $$T_{n+1} = c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2})$$

多步法为p阶的.

由收敛性分析知， $p\geq 1$ ，即$c_0=c_1=0$，则

$$\begin{cases} \alpha_0+\alpha_1+\cdots+\alpha_{k-1}=1 \\ \sum_{i=1}^{k-1} i\alpha_i+\sum_{i=0}^{k}\beta_i=k \end{cases}$$

当$k=1$时，

（1）若$\beta_1=0$，则$\alpha_0=1$， $\beta_0=1$

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)$$ --Euler公式

$c_2=1/2\neq 0$，具有1阶精度.

$$T_{n+1}=\frac{h^2}{2}y''(x_n)+O(h^3)$$

（2）若$\beta_1 \neq 0$，隐式方法，由$c_0=c_1=c_2=0$，得

$$1-\alpha_0=0 \qquad 1-\beta_0-\beta_1=0 \qquad \frac{1}{2}-\beta_1=0$$

故 $\alpha_0=1 \qquad \beta_0=\beta_1=\frac{1}{2}$

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}\left[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})\right]$$ --梯形公式

$c_3=-1/12\neq 0$，具有2阶精度..

$$T_{n+1}=-\frac{h^3}{12}y'''(x_n)+O(h^4)$$

$k\geq 2$时，可确定α_i，β_i和T_{n+1}.

关于几种常用的多步法公式请参考教材.

8.6 一阶常微分方程组和高阶微分方程的 数值解法简介

一、一阶常微分方程组的数值解法：

下列包含多个一阶常微分方程的初值问题：

$$
\begin{cases}
y_1' = f_1(x, y_1, y_2, \cdots, y_n) & y_1(x_0) = y_{10} \\
y_2' = f_2(x, y_1, y_2, \cdots, y_n) & y_2(x_0) = y_{20} \\
\quad \cdots\cdots\cdots\cdots & \\
y_n' = f_n(x, y_1, y_2, \cdots, y_n) & y_n(x_0) = y_{n0}
\end{cases}
$$

称为一阶常微分方程组的初值问题.

引进向量记号:

$$\vec{y}=\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \qquad \vec{f}(x,\vec{y})=\begin{pmatrix} f_1(x,\vec{y}) \\ f_2(x,\vec{y}) \\ \vdots \\ f_n(x,\vec{y}) \end{pmatrix} \qquad \vec{y}_0=\begin{pmatrix} y_1(x_0) \\ y_2(x_0) \\ \vdots \\ y_n(x_0) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} y_{10} \\ y_{20} \\ \vdots \\ y_{n0} \end{pmatrix}$$

则上述一阶常微分方程组的初值问题化为矩阵形式:

$$\begin{cases} \vec{y}'=\vec{f}(x,\vec{y}) \\ \vec{y}(x_0)=\vec{y}_0 \end{cases}$$

它在形式上跟单个微分方程的初值问题形式完全相同,只是函数变成了向量函数. 故前面介绍的一切数值方法都适用,只要把函数换成向量函数即可.

二、高阶常微分方程的数值解法：

可化为一阶常微分方程组求解.

例如，二阶常微分方程初值问题

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ y(x_0) = y_0 \\ y'(x_0) = y_0' \end{cases}$$

引进新的变量，令z=y`，即可将上述二阶方程化为如下的一阶方程组的初值问题：

$$\begin{cases} z' = f(x, y, z), \qquad z(x_0) = y_0' \\ y' = z, \qquad y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

例　求下列高阶微分方程的数值解：

$$y''' - 3y'' - y'y = 0$$

$$y(0) = 0, y'(0) = 1, y''(0) = -1 \qquad (0 \le x \le 2)$$

解：显然　$y''' = 3y'' + y'y$

假设　$y_1 = y \qquad y_2 = y' \qquad y_3 = y''$

则

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = y_3 \\ y_3' = 3y_3 + y_2 y_1 \\ y_1(0) = 0, y_2(0) = 1, y_3(0) = -1 \end{cases}$$

即二阶问题化为微分方程组的初值问题.

THE

END