

10.5 高阶单步方法

n阶Taylor方法的局部截断误差:

(1) Taylor展开法

$$T_{n+1}(h) = \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} y^{(n+1)}(x_i) + O(h^{n+2})$$

设初值问题 $\begin{cases} y' = f(x, y) & a \leq x \leq b, \\ y(a) = \alpha \end{cases}$

的解 $y(x)$ 充分光滑, 将 $y(x_{i+1})$ 在 x_i 点作Taylor展开:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \dots + \frac{h^n}{n!} y^{(n)}(x_i) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} y^{(n+1)}(x_i) + O(h^{n+2}) \quad (1)$$

将解 $y(x)$ 的导数用 $f(x, y(x))$ 表示: 有

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)), & y''(x) &= f'(x, y(x)) = f_x + f_y f, \\ &\dots & y^{(k)} &= f^{(k-1)}(x, y(x)) \end{aligned}$$

$$\begin{cases} y_0 = \alpha \\ y_{i+1} = y_i + h\Phi_n(x_i, y_i, h), & i = 0, 1, \dots, n-1 \\ \Phi_n(x_i, y_i, h) = f(x_i, y_i) + \frac{h}{2} f'(x_i, y_i) + \dots + \frac{h^{n-1}}{n!} f^{(n-1)}(x_i, y_i) \end{cases} \quad \text{n阶Taylor方法}$$

例1 (1) 应用2阶与4阶Taylor方法求解初值问题:

$$\begin{cases} y' = y - x^2 + 1, & 0 \leq x \leq 2 \\ y(0) = 0.5, & h = 0.2 \end{cases}$$

(2) 计算 $y(1.25)$.

解: (1) $f(x, y(x)) = y - x^2 + 1$, $f'(x, y(x)) = y' - 2x = y - x^2 + 1 - 2x$,

$$f''(x, y(x)) = y'' - 2 = y' - 2x - 2 = y - x^2 - 2x - 1$$

$$\Phi_2(x_i, y_i, h) = f(x_i, y_i) + \frac{h}{2} f'(x_i, y_i) = (1 + \frac{h}{2})(y_i - x_i^2 + 1) - hx_i$$

$$\Phi_4(x_i, y_i, h) = f(x_i, y_i) + \frac{h}{2} f'(x_i, y_i) + \frac{h^2}{6} f''(x_i, y_i) + \frac{h^3}{24} f'''(x_i, y_i)$$

$$= (1 + \frac{h}{2} + \frac{h^2}{6} + \frac{h^3}{24})(y_i - x_i^2) - (1 + \frac{h}{3} + \frac{h^2}{12})(hx_i) + 1 + \frac{h}{2} - \frac{h^2}{6} - \frac{h^3}{24}$$

2阶Taylor方法

$$\begin{cases} y_0 = 0.5 \\ y_{i+1} = y_i + h\Phi_2(x_i, y_i, h) \end{cases}$$

4阶Taylor方法

$$\begin{cases} y_0 = 0.5 \\ y_{i+1} = y_i + h\Phi_4(x_i, y_i, h) \end{cases}$$

这里 $h=0.2$, $n=10$, $x_i = ih$, $(i=0, 1, \dots, 10)$, $x_0=0$, 计算结果如下:

i	xi	y(xi)	Taylor(2)	Error	Taylor(4)	Error
			yi		yi	
0	0	0.5	0.5	0	0.5	0
1	0.2	0.8292986	0.83	0.0007	0.8293	0.0000014
2	0.4	1.21409	1.2158	0.0017	1.21409	0.0000034
3	0.6	1.64894	1.6521	0.0031	1.648946	0.0000062
4	0.8	2.12723	2.1323	0.0051	2.127239	0.0000101
5	1	2.640859	2.6486	0.0078	2.640874	0.0000153
6	1.2	3.17994	3.1913	0.0114	3.179964	0.0000225
7	1.4	3.7324	3.7486	0.0162	3.732432	0.0000321
8	1.6	4.28348	4.3061	0.0227	4.283529	0.0000447
9	1.8	4.8151763	4.8463	0.0311	4.815238	0.0000615
10	2	5.305472	5.3477	0.0422	5.305555	0.0000834

(2) 计算 $y(1.25)$ 1.25不是节点, 利用插值求解。

a) 分段线性插值

1.25 \in [1.2, 1.4], 这里 $x_6 = 1.2$, $x_7 = 1.4$

$$y(1.2) \approx y_6 = 3.1799640, y(1.4) \approx y_7 = 3.7324321$$

分段线性插值在[1.2, 1.4]的表达式为:

$$p(x) = \frac{x - 1.4}{1.2 - 1.4} \times y_6 + \frac{x - 1.2}{1.4 - 1.2} \times y_7$$

$$y(1.25) \approx p(1.25) = 3.3180810, \text{精确解为 } y(1.25) = 3.3173285$$

误差为 0.0007525

n阶Taylor方法虽然近似解的精度随着n的增大而增高, 但需要计算 $f(x, y)$ 的高阶导数。下面, 寻求其它途径, 构造高精度方法。

2 Runge-Kutta Methods

方法的阶越高, 方法就越准确。

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k), \quad \text{Euler 法} \quad \text{1阶方法}$$

特点: 计算1次 $f(x, y)$ 的函数值

$$y_{k+1} = y_k + (h/2)[f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})] \quad \text{梯形公式}$$

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}[f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_k + hf(x_k, y_k))]$$

改进欧拉公式 2阶方法

特点: 计算2次 $f(x, y)$ 的函数值

(2)Runge-Kutta方法

Runge-Kutta方法的基本思想

计算 $f(x,y)$ 在不同结点的函数值,然后作这些函数值的线性组合,构造近似公式,式中有一些可供选择的参数.将近似公式与Taylor展开式相比较,使前面的若干项密合,从而使近似公式达到较高的阶.

Runge-Kutta方法是一种高精度的单步法,简称R-K法.

下面以二阶R-K方法为例说明这一方法的基本思想.

二级二阶R-K方法(4个参数)

在 $[x_i, x_{i+1}]$ 上,取 $f(x,y)$ 在两个点的函数值作线性组合,得到二级R-K方法:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h(c_1 K_1 + c_2 K_2) \\ K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f(x_i + a_2 h, y_i + b_{21} h K_1) \end{cases} \quad (i = 0, \dots, n-1), (*)$$

其中, c_1, c_2, a_2, b_{21} 为待定参数.

令 $\phi(x,y,h) = c_1 K_1 + c_2 K_2 = c_1 f(x,y) + c_2 f(x+a_2 h, y+b_{21} h f(x,y))$

若要求式(*)达到二阶精度,则只要局部截断误差

$$T_{i+1}(h) = y(x_{i+1}) - y(x_i) - h\phi(x_i, y(x_i), h) = O(h^3).$$

$$T_{i+1}(h) = y(x_{i+1}) - y(x_i) - h\phi(x_i, y(x_i), h) = O(h^3).$$

这里 $\phi(x,y,h) = c_1 K_1 + c_2 K_2 = c_1 f(x,y) + c_2 f(x+a_2 h, y+b_{21} h f(x,y))$

将 $\phi(x,y,h)$ 在 (x_i, y_i) 点作Taylor展开,

$$\begin{aligned} f(x + \Delta x, y + \Delta y) &= f(x, y) + (\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial}{\partial y}) f(x, y) + \frac{1}{2!} (\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial}{\partial y})^2 f(x, y) \\ &= f(x, y) + (\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial}{\partial y}) f(x, y) + \frac{1}{2!} (\Delta x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\Delta x \Delta y \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + \Delta y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2}) f(x, y) \end{aligned}$$

$$f(x+a_2 h, y+b_{21} h f(x,y)) = f(x,y) + a_2 h f_x + b_{21} h f_y + O(h^2)$$

$$\text{所以 } \phi(x,y,h) = (c_1 + c_2) f(x,y) + c_2 (a_2 f_x + b_{21} h f_y) h + O(h^2)$$

$$\phi(x,y,h) = (c_1 + c_2) f(x,y) + c_2 (a_2 f_x + b_{21} h f_y) h + O(h^2)$$

$$T_{i+1}(h) = y(x_{i+1}) - y(x_i) - h\phi(x_i, y(x_i), h) = O(h^3).$$

$$\phi(x_i, y(x_i), h) = (c_1 + c_2) f(x_i, y(x_i)) + c_2 h (a_2 f_x + b_{21} h f_y)(x_i, y(x_i)) + O(h^2)$$

$y(x_{i+1})$ 在 x_i 点的Taylor展开为

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + h y'(x_i) + (h^2/2!) y''(x_i) + O(h^3)$$

$$= y(x_i) + h f(x_i, y(x_i)) + (h^2/2!) (f_x + f_y f)(x_i, y(x_i)) + O(h^3)$$

$$T_{i+1}(h) = y(x_{i+1}) - y(x_i) - h\phi(x_i, y(x_i), h)$$

$$= [(1-c_1-c_2) h f + (1/2-c_2 a_2) h^2 f_x + (1/2-c_2 b_{21}) h^2 f f_y](x_i, y(x_i)) + O(h^3)$$

若要求 $T_{i+1}(h) = O(h^3)$, 则应有

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ c_2 a_2 = 1/2 \\ c_2 b_{21} = 1/2 \end{cases}$$

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ c_2 a_2 = 1/2 \\ c_2 b_{21} = 1/2 \end{cases}$$

上述方程组含有3个方程, 4个未知数, 其解是不唯一的.

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h(c_1 K_1 + c_2 K_2) \\ K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f(x_i + a_2 h, y_i + b_{21} h K_1) \end{cases} \quad (i = 0, \dots, n-1), (*)$$

取 $c_2 = \beta$ 为自由参数, 则得其一族解:

$$c_1 = 1 - \beta, \quad c_2 = \beta, \quad a_2 = b_{21} = 1/(2\beta) \quad (**)$$

满足条件(**)的(*)式称为二级二阶R-K方法.

取 β 为不同的值时, 得到不同的二级二阶R-K方法. 特别当 $\beta = 1/2$ 时, $c_1 = 1/2, c_2 = 1/2, a_2 = b_{21} = 1$ 公式即是前面介绍的改进的Euler方法.

取 $\beta = 1/2$, 则 $c_1 = 1/2, c_2 = 1/2, a_2 = b_{21} = 1$

Modified Euler Method : 改进的Euler方法

$$\begin{cases} y_0 = \alpha \\ y_{i+1} = y_i + (1/2)h(K_1 + K_2), (i = 0, \dots, n-1) \\ K_1 = f(x_i, y_i), K_2 = f(x_{i+1}, y_i + hf(x_i, y_i)) \end{cases}$$

或

$$\begin{cases} y_0 = \alpha \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_i + hf(x_i, y_i))] \\ (i = 0, \dots, n-1) \end{cases}$$

二级R-K方法是显式单步式,每前进一步需要**计算两个函数值**。由上面的讨论可知,适当选择四个参数 c_1, c_2, a_2, b_{21} ,可使每步计算两次函数值的二级R-K方法达到二阶精度。能否在计算函数值次数不变的情况下,通过选择四个参数,使得二级R-K方法的精度再提高呢?

我们说,答案是否定的。无论四个参数怎样选择,都不能使公式(**)提高到三阶。

这说明每一步计算两个函数值的二级R-K方法最高阶为二阶。若要获得更高阶数值方法,就必须增加计算函数值的次数。



m 级显式Runge-Kutta 方法

仿照二级R-K方法,在 $[x_i, x_{i+1}]$ 上,取 f 在 m 个点的函数值做线性组合,即得到 m 级R-K方法

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=1}^m c_j K_j, (i = 0, \dots, n-1) \\ K_1 = f(x_i, y_i), \\ K_r = f(x_i + ha_r, y_i + h \sum_{s=1}^{r-1} b_{rs} K_s), r = 2, \dots, m \end{cases}$$



$m+m(m+1)/2-1$ 个参数

使用不同的方法确定参数 c_r, a_r, b_{rs} 可使上式成为不同阶的R-K方法。在 m 级R-K方法中,最著名的是经典R-K方法(4级4阶R-K方法):

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4), (i = 0, \dots, n-1) \\ K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f(x_i + h/2, y_i + hK_1/2) \\ K_3 = f(x_i + h/2, y_i + hK_2/2) \\ K_4 = f(x_i + h, y_i + hK_3) \end{cases}$$

由于它每前进一步需要计算四个点的函数值,因此称为四级公式。按定义可直接验证它的局部截断误差为 $O(h^5)$,故它是四阶方法。

前面已经看到,二级、四级R-K方法可分别达到最高阶数二阶、四阶,但是 $m(m>4)$ 级R-K方法的最高阶却不一定是 m 阶。R-K方法的级数表示公式中计算函数值 f 的次数。Butcher给出了R-K方法计算函数值 f 的次数与阶数之间的关系表,如下:

计算 f 的次数	2	3	4	5	6	7
方法的最高阶数	2	3	4	4	5	6

由表可见,四级以下R-K的方法其最高阶数与计算 f 的次数一致,对 m 级R-K公式,当 $m>4$,虽然计算 f 的次数增加,但是方法阶数不一定增加。因此四级四阶R-K公式是应用最为广泛的公式。



例题1: 用经典的R-K方法求初值问题的数值解(取步长 $h=0.1$ 计算到 y_3):

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

解: 经典的R-K方法为

这里 $f(x,y) = -2xy^2$,

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4), (i = 0, 1, 2) \\ K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f(x_i + h/2, y_i + hK_1/2) \\ K_3 = f(x_i + h/2, y_i + hK_2/2) \\ K_4 = f(x_i + h, y_i + hK_3) \end{cases} \quad \begin{cases} K_1 = -2x_i y_i^2 \\ K_2 = -2(x_i + h/2)(y_i + hK_1/2)^2 \\ K_3 = -2(x_i + h/2)(y_i + hK_2/2)^2 \\ K_4 = -2(x_i + h)(y_i + hK_3)^2 \end{cases}$$

将 $x_0=0, y_0=1, h=0.1$ 带入, 计算结果如下

x_k	0.0	0.1	0.2	0.3
<i>Euler</i>	1	1	0.9800	0.9416
改进 <i>Euler</i>	1	0.9900	0.9614	0.9173
经典 R-K	1	0.9901	0.9615	0.9174
精确解	1	0.9901	0.9615	0.9174

经典的R-K方法所得近似解与精确解完全一样(精确到小数点后4位)

方法的比较

4级4阶R-K公式每一步需要计算4次f的值, 2级2阶R-K公式每一步需要计算2次f的值, Euler公式每一步需要计算1次f的值, 因此, 4级4阶R-K公式每一步的计算量最大。要证明4级4阶R-K公式优于2级2阶R-K公式与Euler公式, 应表明步长为 h 的4级4阶R-K公式优于步长为 $h/2$ 的2级2阶R-K公式与步长为 $h/4$ 的Euler公式。

例题2: 分别用Euler方法 ($h=0.05$)、改进的Euler方法 ($h=0.1$) 经典的R-K方法($h=0.2$) 求初值问题的数值解计算 $y(0.6)$ 的近似值。

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

解: Euler方法 ($h=0.05$), $y(0.6) \approx y_{12}$,
改进的Euler方法 ($h=0.1$), $y(0.6) \approx y_6$,
经典的R-K方法($h=0.2$), $y(0.6) \approx y_3$, 计算结果如下

x_k	0.0	0.2	0.4	0.6
Euler ($h = 0.05$)	1	0.9705	0.8746	0.7456
改进 Euler ($h = 0.1$)	1	0.9614	0.8620	0.7355
经典 R-K ($h = 0.2$)	1	0.9615	0.8621	0.7353
精确解	1	0.9615	0.8621	0.7353

3 Runge-Kutta 方法的绝对稳定性

将经典的R-K方法(4级4阶)与改进的Euler法(2级2阶R-K方法)分别求解实验方程: $y' = \lambda y$, 得

$$y_{k+1} = (1 + h\lambda + \frac{1}{2}(h\lambda)^2 + \frac{1}{6}(h\lambda)^3 + \frac{1}{24}(h\lambda)^4) y_k \quad (1)$$

$$\text{与} \quad y_{k+1} = (1 + h\lambda + \frac{1}{2}(h\lambda)^2) y_k \quad (2)$$

设 $y_k = \tilde{y}_k + \varepsilon_k$, 且 \tilde{y}_k 满足上述方程 (1)、(2)

则误差 ε_k 满足方程:

$$\varepsilon_{k+1} = (1 + h\lambda + \frac{1}{2}(h\lambda)^2 + \frac{1}{6}(h\lambda)^3 + \frac{1}{24}(h\lambda)^4) \varepsilon_k \quad (1)$$

$$\text{与} \quad \varepsilon_{k+1} = (1 + h\lambda + \frac{1}{2}(h\lambda)^2) \varepsilon_k \quad (2)$$

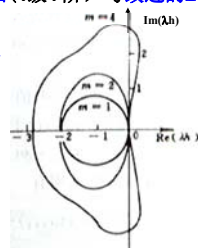
要使 $|\varepsilon_{k+1}| < |\varepsilon_k|$, 必须

$$\left| 1 + h\lambda + \frac{1}{2}(h\lambda)^2 + \frac{1}{6}(h\lambda)^3 + \frac{1}{24}(h\lambda)^4 \right| < 1 \quad (3)$$

$$\text{与} \quad \left| 1 + h\lambda + \frac{1}{2}(h\lambda)^2 \right| < 1 \quad (4)$$

(3)、(4) 即为经典的R-K方法(4级4阶)与改进的Euler法的绝对稳定域。

经典的R-K方法(4级4阶)与改进的Euler法的绝对稳定区间分别为 $(-2.785, 0)$ 与 $(-2, 0)$ 。



单步法的绝对稳定区间

方法	绝对稳定区间
Euler	$-2 < \lambda h < 0$
向后 Euler	$-\infty < \lambda h < 0$
改进 Euler	$-2 < \lambda h < 0$
梯形	$-\infty < \lambda h < 0$
4阶 R-K	$-2.785 < \lambda h < 0$

$$\text{步长: } h > 0, \quad \lambda = \frac{\partial f}{\partial y}$$

例题3 用经典的R-K方法求解初值问题 $\begin{cases} y' = -20y \\ y(0) = 1 \end{cases}$

取步长 $h=0.1$ 及 0.2 , 问算法是否绝对稳定?

解: 经典的R-K方法的绝对稳定区间为 $(-2.785, 0)$, 此题中 $\lambda = -20$, h 分别为 0.1 及 0.2 。 λh 分别为 -2 及 -4 。

$\because -2 \in (-2.785, 0)$, \therefore 取步长 $h=0.1$ 时, 算法绝对稳定。

$\because -4 \notin (-2.785, 0)$, \therefore 取步长 $h=0.2$ 时, 算法不绝对稳定。

计算结果如下:

x_n	误差($h=0.1$)	误差($h=0.2$)
0.0	0	0
0.2	-0.092795	4.98
0.4	-0.012010	25.0
0.6	-0.001366	125.0
0.8	-0.000152	625.0
1.0	-0.000017	3125.0

合理选择步长至关重要。

作业

习题 10

P364:

4

