

Numerical Computing Methods

数值计算方法

李晓鹏

Li Xiao-Peng

电子与信息工程学院

School of Electronic and Information Engineering

Semester-I 25/26

常微分方程数值解法

① 引言

② Runge-Kutta法

① 引言

② Runge-Kutta法

微分方程定义

- 含有未知函数的导数 (微分) 的方程, 称为微分方程
- 未知函数为一元函数的微分方程, 称为常微分方程
- 未知函数为多元函数的微分方程, 称为偏微分方程

给定微分方程及其初始条件, 称为初值问题:

$$\begin{cases} y' = f(x, y), & a \leq x \leq b \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

给定微分方程及其边界条件, 称为边值问题:

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y'), & a \leq x \leq b \\ y(a) = y_0 \\ y(b) = y_N \end{cases}$$

本章主要讨论常微分方程的初值问题。

问题: 实际中需要求解常微分方程的初值问题

$$\begin{cases} y' = f(x, y), & a \leq x \leq b \\ y(a) = y_0 \end{cases} \quad (5.1)$$

上述方程等价于积分方程

$$y(x) = y_0 + \int_a^x f(t, y(t))dt$$

引言

当 $f(x, y)$ 在矩形区域 $a \leq x \leq b, c \leq y \leq d$ 中连续, 并且关于变量 y 满足 Lipschitz 条件, 即对任意 $x \in [a, b], y \in [c, d]$ 都有

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq L |y_1 - y_2|$$

其中 L 为有限常数, 则初值问题的解存在且唯一。

所谓常微分方程的数值解: 就是求 $y(x)$ 在区间 $[a, b]$ 中一系列离散点 (或节点)

$$a < x_1 < x_2 < \cdots < x_N \leq b$$

上 $y(x_n)$ 的近似值 y_n ($n = 1, 2, \cdots, N$), 这些近似值就是 (5.1) 的数值解。

求解计算这些近似值的方法称为该方程数值方法。

由数值方法计算所得的数值解统称为计算解。

引言

在计算时, 从初始条件 $y(a) = y_0$ 出发, 先求 y_1 , 再从 y_0, y_1 求出 y_2 , 以此递推求出所有

$$y_n, \quad (n = 1, 2, \dots, N),$$

这种顺着节点的排列顺序一步步地向前推进的求解方法, 称为**步进法**。

如果在计算 y_n 时只利用了 y_{n-1} , 这种方法称为**单步法**。

如果在计算 y_n 时利用了 $y_{n-1}, y_{n-2}, \dots, y_{n-p}$, 这种方法称为**多步法**。

用数值方法求解常微分方程时, 往往采用等分区间取节点的方法对数学问题进行**数值化**, 即将求解区间 $[a, b]$ 分成 N 等份:

$$\frac{b-a}{N} = h, x_n - x_{n-1} = h, \quad (n = 1, 2, \dots, N)$$

将 $y(x_{n+1})$ 在点 x_n 处进行 Taylor 展开

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(\xi_n), \quad \xi_n \in [x_n, x_{n+1}]$$

略去 h^2 项:

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))$$

然后用 y_n 代替 $y(x_n)$, 即得

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N-1)$$

$$e_{n+1}(h) = \frac{h^2}{2!}y''(\xi_n) \approx \frac{h^2}{2!}y''(x_n)$$

称上述公式为**前进 Euler 公式**。

Euler方法

将 $y(x_n)$ 在点 x_{n+1} 处进行 Taylor 展开

$$y(x_n) = y(x_{n+1}) - hy'(x_{n+1}) + \frac{h^2}{2!}y''(\xi_n), \quad \xi_n \in [x_n, x_{n+1}]$$

略去 h^2 项:

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + hf(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$$

然后用 y_n 代替 $y(x_n)$, 即得

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}), \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N-1)$$

$$e_{n+1}(h) = -\frac{h^2}{2!}y''(\xi_n) \approx -\frac{h^2}{2!}y''(x_{n+1})$$

称上述公式为**后退 Euler 公式**。

注意: 后退 Euler 公式是**非显式**的。

例题

例：取 $h = 0.1$, 使用前进 Euler 公式、后退 Euler 公式求解初值问题

$$\begin{cases} y' = y - \frac{2x}{y}, & x \in [0, 1] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

例题

例：取 $h = 0.1$, 使用前进 Euler 公式、后退 Euler 公式求解初值问题

$$\begin{cases} y' = y - \frac{2x}{y}, & x \in [0, 1] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

解：已知 $x_0 = a = 0, y_0 = 1, N = 1/h = 10$,

$$f(x, y) = y - 2x/y$$

利用 前进 Euler 法求解：

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) = y_0 + h \left(y_0 - \frac{2x_0}{y_0} \right) = 1.1000$$

$$y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1) = y_1 + h \left(y_1 - \frac{2x_1}{y_1} \right) \approx 1.1918$$

\vdots

$$y_{10} = y_9 + hf(x_9, y_9) = y_9 + h \left(y_9 - \frac{2x_9}{y_9} \right) \approx 1.7848$$

例题

例：取 $h = 0.1$, 求解初值问题

$$\begin{cases} y' = y - \frac{2x}{y}, & x \in [0, 1] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

解：已知 $x_0 = a = 0, y_0 = 1, N = 1/h = 10$,

$$f(x, y) = y - 2x/y$$

利用 后退 Euler 法求解：

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + hf(x_1, y_1) = y_0 + h \left(y_1 - \frac{2x_1}{y_1} \right) \\ \Rightarrow y_1 &= \frac{y_0 + (y_0^2 - 0.72x_1)^{1/2}}{1.8} \approx 1.0907 \\ &\vdots \end{aligned}$$

例题

例：取 $h = 0.2$, 使用前进 Euler 公式求解初值问题

$$\begin{cases} y' = x - \frac{2x}{y}, & x \in [0, 1] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

例题

例：取 $h = 0.2$, 使用前进 Euler 公式求解初值问题

$$\begin{cases} y' = x - \frac{2x}{y}, & x \in [0, 1] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

解：已知 $x_0 = a = 0, y_0 = 1, N = 1/0.2 = 5$,

$$f(x, y) = x - 2x/y$$

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) = y_0 + h \left(x_0 - \frac{2x_0}{y_0} \right) = 1.0000$$

$$y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1) = y_1 + h \left(x_1 - \frac{2x_1}{y_1} \right) = 0.9600$$

$$y_3 = y_2 + hf(x_2, y_2) = y_2 + h \left(x_2 - \frac{2x_2}{y_2} \right) = 0.8733$$

$$y_4 = y_3 + hf(x_3, y_3) = y_3 + h \left(x_3 - \frac{2x_3}{y_3} \right) = 0.7185$$

$$y_5 = y_4 + hf(x_4, y_4) = y_4 + h \left(x_4 - \frac{2x_4}{y_4} \right) = 0.4331$$

显式与隐式结合方法

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \quad \text{前进 Euler 求解公式}$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) \quad \text{后退 Euler 求解公式}$$

$$\begin{cases} \bar{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) & \text{预测值} \\ y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1}) & \text{校正值} \\ y(x_0) = y_0, \end{cases}$$

$$y_0 \rightarrow (\bar{y}_1) \rightarrow y_1 \rightarrow (\bar{y}_2) \rightarrow y_2 \rightarrow \dots \rightarrow (\bar{y}_N) \rightarrow y_N$$

这种求解方法称为**预测-校正系统**。

例题

例：取 $h = 0.1$, 利用预测-校正系统求解初值问题

$$\begin{cases} y' = y - \frac{2x}{y}, & x \in [0, 1] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

例题

例：取 $h = 0.1$, 利用预测-校正系统求解初值问题

$$\begin{cases} y' = y - \frac{2x}{y}, & x \in [0, 1] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

解：已知 $x_0 = a = 0, y_0 = 1, N = 1/h = 10$,

$$f(x, y) = y - 2x/y$$

$$\bar{y}_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) = y_0 + h \left(y_0 - \frac{2x_0}{y_0} \right) = 1.1000$$

$$y_1 = y_0 + hf(x_1, \bar{y}_1) = y_0 + h \left(\bar{y}_1 - \frac{2x_1}{\bar{y}_1} \right) = 1.0918$$

$$\bar{y}_2 = y_1 + hf(x_1, y_1) = y_1 + h \left(y_1 - \frac{2x_1}{y_1} \right) \approx 1.1827$$

$$y_2 = y_1 + hf(x_2, \bar{y}_2) = y_1 + h \left(\bar{y}_2 - \frac{2x_2}{\bar{y}_2} \right) \approx 1.1763$$

例题

例：取 $h = 0.2$, 使用预测-校正方法求解初值问题

$$\begin{cases} y' = x - \frac{2x}{y}, & x \in [0, 0.6] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

例题

例：取 $h = 0.2$, 使用预测-校正方法求解初值问题

$$\begin{cases} y' = x - \frac{2x}{y}, & x \in [0, 0.6] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

解：已知 $x_0 = a = 0, y_0 = 1, N = 0.6/0.2 = 3$,

$$\bar{y}_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) = y_0 + h \left(x_0 - \frac{2x_0}{y_0} \right) = 1.0000$$

$$y_1 = y_0 + hf(x_1, \bar{y}_1) = y_0 + h \left(x_1 - \frac{2x_1}{\bar{y}_1} \right) = 0.9600$$

$$\bar{y}_2 = y_1 + hf(x_1, y_1) = y_1 + h \left(x_1 - \frac{2x_1}{y_1} \right) = 0.9167$$

$$y_2 = y_1 + hf(x_2, \bar{y}_2) = y_1 + h \left(x_2 - \frac{2x_2}{\bar{y}_1} \right) = 0.8655$$

$$\bar{y}_3 = y_2 + hf(x_2, y_2) = y_2 + h \left(x_2 - \frac{2x_2}{y_2} \right) = 0.7606$$

$$y_3 = y_2 + hf(x_3, \bar{y}_3) = y_2 + h \left(x_3 - \frac{2x_3}{\bar{y}_3} \right) = 0.6700$$

基于数值积分的求解公式

因为

$$\int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x, y(x)) dx = \int_{x_{n-1}}^{x_n} y'(x) dx = y(x_n) - y(x_{n-1})$$

因此

$$y(x_n) = y(x_{n-1}) + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x, y(x)) dx \quad (5.2)$$

若 $y(x_{n-1})$ 已知, 则由 (5.2) 可求出 $y(x_n)$ 。

若取近似, 利用矩形求积得

$$\begin{aligned} y(x_n) &= y(x_{n-1}) + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x, y(x)) dx \\ &\approx y(x_{n-1}) + hf(x_{n-1}, y(x_{n-1})) \end{aligned}$$

上式即为 Euler 求解公式, 故又可称为**矩形法**。

基于数值积分的求解公式

若在 (5.2) 中, 利用梯形公式:

$$\int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x, y(x)) dx \approx \frac{h}{2} [f(x_{n-1}, y(x_{n-1})) + f(x_n, y(x_n))]$$

则

$$y(x_n) \approx y(x_{n-1}) + \frac{h}{2} [f(x_{n-1}, y(x_{n-1})) + f(x_n, y(x_n))]$$

令

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

上式称为梯形求解公式, 简称**梯形法**。

问题: 几何解释?

问题: 梯形法是显式还是隐式?

基于数值积分的求解公式

梯形法是隐式, 故可以采用预测-校正系统

$$\begin{cases} \bar{y}_n = y_{n-1} + hf(x_{n-1}, y_{n-1}) \\ y_n = y_{n-1} + \frac{h}{2} [f(x_{n-1}, y_{n-1}) + f(x_n, \bar{y}_n)] \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (5.3)$$

上式又称为改进的 Euler 求解公式, 简称改进 Euler 法。

紧凑形式:

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

例题

例：用 Euler 法、梯形法以及改进 Euler 法求解

$$\begin{cases} y' = -y + x + 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

其中, 步长 $h = 0.1$, 计算至 $x = 0.5$ 。

例题

例：用 Euler 法、梯形法以及改进 Euler 法求解

$$\begin{cases} y' = -y + x + 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

其中，步长 $h = 0.1$ ，计算至 $x = 0.5$ 。

解：设

$$\begin{aligned} f(x, y) &= -y + x + 1, \\ x_0 &= a = 0, b = 0.5, y_0 = 1, n = 5, \end{aligned}$$

1) Euler法: 计算公式为

$$\begin{aligned} y_n &= y_{n-1} + h(x_{n-1} - y_{n-1} + 1) \\ &= hx_{n-1} + (1-h)y_{n-1} + h \\ &= 0.1x_{n-1} + 0.9y_{n-1} + 0.1 \end{aligned}$$

所以

$$y_1 = 0.1x_0 + 0.9y_0 + 0.1 = 1.000$$

例题

2) 梯形法: 计算公式为

$$y_n = y_{n-1} + 0.5h [(x_{n-1} - y_{n-1} + 1) + (x_n - y_n + 1)]$$

解得

$$\begin{aligned} y_n &= \frac{(2-h)y_{n-1} + h(x_{n-1} + x_k) + 0.2}{2+h} \\ &= \frac{1.9y_{n-1} + 0.1(x_{n-1} + x_n) + 0.2}{2.1} \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{1.9y_0 + 0.1(x_0 + x_1) + 0.2}{2.1} \\ &= 1.004762 \end{aligned}$$

例题

3) 改进Euler法:

$$\begin{aligned}y_n &= y_{n-1} + 0.5h [(x_{n-1} - y_{n-1} + 1) + (-y_{n-1} - h(x_{n-1} - y_{n-1} + 1) + x_n + 1)] \\&= 0.905y_{n-1} + 0.045x_{n-1} + 0.05x_k + 0.095\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}y_1 &= 0.905y_0 + 0.045x_0 + 0.05x_1 + 0.095 \\&= 1.005000\end{aligned}$$

例题

例：用 Euler 法、梯形法以及改进 Euler 法求解

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

其中, 步长 $h = 0.2$, 计算至 $x = 0.4$ 。

例题

例：用 Euler 法、梯形法以及改进 Euler 法求解

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

其中, 步长 $h = 0.2$, 计算至 $x = 0.4$ 。

解: 设

$$\begin{aligned} f(x, y) &= y + x, \\ x_0 &= a = 0, b = 0.4, y_0 = 1, n = 2, \end{aligned}$$

1) Euler法: 计算公式为

$$\begin{aligned} y_n &= y_{n-1} + h(x_{n-1} + y_{n-1}) \\ &= hx_{n-1} + (1 + h)y_{n-1} \\ &= 0.2x_{n-1} + 1.2y_{n-1} \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} y_1 &= 0.2x_0 + 1.2y_0 = 1.2000 \\ y_2 &= 0.2x_1 + 1.2y_1 = 1.4800 \end{aligned}$$

例题

2) 梯形法: 计算公式为

$$y_n = y_{n-1} + 0.5h [(x_{n-1} + y_{n-1}) + (x_n + y_n)]$$

解得

$$\begin{aligned} y_n &= \frac{(2+h)y_{n-1} + h(x_{n-1} + x_n)}{2-h} \\ &= \frac{2.2y_{n-1} + 0.2(x_{n-1} + x_n)}{1.8} \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{2.2y_0 + 0.2(x_0 + x_1)}{1.8} = 1.2444 \\ y_1 &= \frac{2.2y_1 + 0.2(x_1 + x_2)}{1.8} = 1.5876 \end{aligned}$$

例题

3) 改进Euler法:

$$\begin{aligned}y_n &= y_{n-1} + 0.5h [(x_{n-1} + y_{n-1}) + (y_{n-1} + h(x_{n-1} + y_{n-1}) + x_n)] \\&= 1.22y_{n-1} + 0.12x_{n-1} + 0.1x_n\end{aligned}$$

所以

$$y_1 = 1.22y_0 + 0.12x_0 + 0.1x_1 = 1.2400$$

$$y_2 = 1.22y_1 + 0.12x_1 + 0.1x_2 = 1.5768$$

Simpson公式

$$\begin{aligned} & \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x, y(x)) dx \\ & \approx \frac{h}{6} \left[f(x_{n-1}, y_{n-1}) + 4f\left(\frac{x_{n-1} + x_n}{2}, y\left(\frac{x_{n-1} + x_n}{2}\right)\right) + f(x_n, y(x_n)) \right] \\ & = \frac{h}{6} \left[f(x_{n-1}, y_{n-1}) + 4f\left(x_{n-1} + \frac{h}{2}, y\left(x_{n-1} + \frac{h}{2}\right)\right) + f(x_{n-1} + h, y(x_{n-1} + h)) \right] \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} y_n = y_{n-1} + \frac{h}{6} & \left[f(x_{n-1}, y_{n-1}) + 4f\left(x_{n-1} + \frac{h}{2}, y\left(x_{n-1} + \frac{h}{2}\right)\right) \right. \\ & \left. + f(x_{n-1} + h, y(x_{n-1} + h)) \right] \end{aligned} \quad (5.4)$$

上式是隐式, 不便计算, 因此需要显化。

Simpson公式

将每个小区间 $[x_{n-1}, x_n]$ 再进行对分, 令对分后的小区间长度为 $h_1 = \frac{h}{2}$, 于是有

$$x_{n-1} + \frac{h}{2} = x_n, x_{n-1} + h = x_{n+1}$$

则 (5.4) 化简为

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_{n-1} + \frac{h_1}{3} [f(x_{n-1}, y_{n-1}) + 4f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})] \\ \Rightarrow y_n &= y_{n-2} + \frac{h_1}{3} [f(x_{n-2}, y_{n-2}) + 4f(x_{n-1}, y_{n-1}) + f(x_n, y_n)] \end{aligned}$$

上式称为 Simpson 求解公式。

① 引言

② Runge-Kutta法

Runge-Kutta法

基本思想： 用不同点的函数值作线性组合，构造近似公式，把近似公式和解的 Taylor 展开比较，使前面的若干项吻合，从而使近似公式达到一定的阶数。

一般的显式 Runge-Kutta 方法，可以写成

$$\begin{cases} y_n = y_{n-1} + c_1 k_1 + c_2 k_2 + \cdots + c_N k_N \\ k_1 = hf(x_{n-1}, y_{n-1}) \\ k_2 = hf(x_{n-1} + a_2 h, y_{n-1} + b_{21} k_1) \\ k_3 = hf(x_{n-1} + a_3 h, y_{n-1} + b_{31} k_1 + b_{32} k_2) \\ \vdots \\ k_N = hf(x_{n-1} + a_N h, y_{n-1} + b_{N1} k_1 + b_{N2} k_2 + \cdots + b_{N,N-1} k_{N-1}) \end{cases}$$

其中， a_i, b_i, c_i 为常数，选取这些常数的原则是，要求第一式的右端在 (x_n, y_n) 处 Taylor 展开后，按 h 的幂次重新整理得到

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

Runge-Kutta法

与微分方程的解的 Taylor 展开式

$$y(x_n) = y(x_{n-1}) + f_{n-1}h + \frac{1}{2!}f'_{n-1}h^2 + \frac{1}{3!}f''_{n-1}h^3 + \cdots$$

有尽可能多的项重合，即要求

$$\gamma_1 = f_{n-1}, \gamma_2 = f'_{n-1}, \gamma_3 = f''_{n-1}, \cdots$$

其中, $f_{n-1}, f'_{n-1}, f''_{n-1}$ 分别表示

$$y'(x_{n-1}) = f(x_{n-1}, y_{n-1}), y''(x_{n-1}), y'''(x_{n-1}), \cdots$$

上述公式叫做 N 阶的 Runge-Kutta 方法, 其局部截断误差为 $O(h^{N+1})$ 。

Euler 法是不是 R-K 方法?

Runge-Kutta法

与微分方程的解的 Taylor 展开式

$$y(x_n) = y(x_{n-1}) + f_{n-1}h + \frac{1}{2!}f'_{n-1}h^2 + \frac{1}{3!}f''_{n-1}h^3 + \cdots$$

有尽可能多的项重合，即要求

$$\gamma_1 = f_{n-1}, \gamma_2 = f'_{n-1}, \gamma_3 = f''_{n-1}, \cdots$$

其中, $f_{n-1}, f'_{n-1}, f''_{n-1}$ 分别表示

$$y'(x_{n-1}) = f(x_{n-1}, y_{n-1}), y''(x_{n-1}), y'''(x_{n-1}), \cdots$$

上述公式叫做 N 阶的 Runge-Kutta 方法, 其局部截断误差为 $O(h^{N+1})$ 。

Euler 法是不是 R-K 方法? 显然, Euler 法是一阶 R-K 方法。

Runge-Kutta法

下面以二阶 R-K 公式为例, 来说明 R-K 方法的推导过程。

复习 $f(x, y)$ 在 (a, b) 的 Taylor 展开:

$$\begin{aligned} f(x, y) \approx & f(a, b) + f_x(a, b)(x - a) + f_y(a, b)(y - b) \\ & + \frac{f_{xx}(a, b)}{2}(x - a)^2 + f_{xy}(a, b)(x - a)(y - b) + \frac{f_{yy}(a, b)}{2}(y - b)^2 \end{aligned}$$

要求下式中

$$\begin{cases} y_n = y_{n-1} + c_1 k_1 + c_2 k_2 \\ k_1 = hf(x_{n-1}, y_{n-1}) \\ k_2 = hf(x_{n-1} + a_2 h, y_{n-1} + b_{21} k_1) \end{cases}$$

系数 c_1, c_2, a_2, b_2 , 使得 $y_n = y(x_n)$ 时, 局部截断误差为 $\mathcal{O}(h^3)$

将 k_2 在 (x_{n-1}, y_{n-1}) 处展开, 得

$$\begin{aligned}k_2 &= hf(x_{n-1} + a_2h, y_{n-1} + b_{21}k_1) \\&= h[f(x_{n-1}, y_{n-1}) + a_2hf_x(x_{n-1}, y_{n-1}) + b_{21}k_1f_y(x_{n-1}, y_{n-1}) \\&\quad + \frac{1}{2}[(a_2h)^2f_{xx}(x_{n-1}, y_{n-1}) + 2a_2b_{21}h^2k_1f_{xy}(x_{n-1}, y_{n-1}) \\&\quad + (b_{21}k_1)^2f_{yy}(x_{n-1}, y_{n-1})]] \\&= h[y'(x_{n-1}) + a_2hf_x(x_{n-1}, y_{n-1}) + b_{21}hy'(x_{n-1})f_y(x_{n-1}, y_{n-1}) \\&\quad + \frac{1}{2}[a_2^2h^2f_{xx}(x_{n-1}, y_{n-1}) + 2a_2b_{21}h^2y'(x_{n-1})f_{xy}(x_{n-1}, y_{n-1}) \\&\quad + b_{21}^2h^2y'(x_{n-1})^2f_{yy}(x_{n-1}, y_{n-1})]]\end{aligned}$$

Runge-Kutta法

将 k_1, k_2 代入 y_n 得

$$\begin{aligned}y_n &= y_{n-1} + c_1 k_1 + c_2 k_2 \\&= y(x_{n-1}) + c_1 h y'(x_{n-1}) + c_2 h y'(x_{n-1}) + a_2 c_2 h^2 f_x(x_{n-1}, y_{n-1}) \\&\quad + b_{21} c_2 h^2 y'(x_{n-1}) f_y(x_{n-1}, y_{n-1}) + \frac{1}{2} a_2^2 c_2 h^3 f_{xx}(x_{n-1}, y_{n-1}) \\&\quad + a_2 b_{21} c_2 h^3 y'(x_{n-1}) f_{xy}(x_{n-1}, y_{n-1}) + \frac{1}{2} b_{21}^2 c_2 h^3 (y'(x_{n-1}))^2 f_{yy}(x_{n-1}, y_{n-1}) \\&= y(x_{n-1}) + (c_1 + c_2) y(x_{n-1})' h + [a_2 c_2 f_x + c_2 b_{21} f f_y]_{(x_{n-1}, y_{n-1})} h^2 \\&\quad + [\frac{1}{2} a_2^2 c_2 f_{xx} + a_2 b_{21} c_2 f f_{xy} + \frac{1}{2} b_{21}^2 c_2 f_{yy}]_{(x_{n-1}, y_{n-1})} h^3\end{aligned}$$

Runge-Kutta法

y_{x_n} 在 x_{n-1} 处的 Taylor 展开为

$$\begin{aligned}y(x_n) &= y(x_{n-1}) + y'(x_{n-1})h + \frac{1}{2}y''(x_{n-1})h^2 + \frac{1}{6}y'''(x_{n-1})h^3 \\&= y(x_{n-1}) + y'(x_{n-1})h + \frac{1}{2}[f_x + ff_y]_{(x_{n-1}, y_{n-1})}h^2 \\&\quad + \frac{1}{6}[f_{xx} + 2ff_{xy} + f^2f_{yy} + f_y(f_x + ff_y)]_{(x_{n-1}, y_{n-1})}h^3\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}R_n &= y(x_n) - y_n \\&= (1 - c_1 - c_2)y'(x_{n-1})h \\&\quad + \left[\left(\frac{1}{2} - c_2a_2 \right) f_x + \left(\frac{1}{2} - c_2b_{21} \right) ff_y \right]_{(x_{n-1}, y_{n-1})} h^2 + \left[\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{2}a_2^2c_2 \right) f_{xx} \right. \\&\quad \left. + \left(\frac{1}{3} - a_2b_{21}c_2 \right) ff_{xy} + \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{2}b_{21}^2c_2 \right) f_{yy} + \frac{1}{6}f_y(f_x + ff_y) \right]_{(x_{n-1}, y_{n-1})} h^3\end{aligned}$$

Runge-Kutta法

要使 R_n 尽量小, 应先让 h, h^2 项的系数为零:

$$c_1 + c_2 = 1, c_2 a_2 = \frac{1}{2}, c_2 b_{21} = \frac{1}{2}$$

由于要求二阶方法, $c_2 \neq 0$, 所以

$$c_1 = 1 - c_2, a_2 = \frac{1}{2c_2}, b_{21} = \frac{1}{2c_2}$$

此时 R_n 为

$$R_n = [(\frac{1}{6} - \frac{1}{8c_2})(f_{xx} + 2ff_{xy} + f^2f_{yy}) + \frac{1}{6}f_y(f_x + ff_y)]_{(x_{n-1}, y_{n-1})}h^3$$

要使 R_n 尽量小, 应令 $\frac{1}{6} - \frac{1}{8c_2} = 0$, 得

$$c_2 = \frac{3}{4}, c_1 = \frac{1}{4}, a_2 = \frac{2}{3}, b_{21} = \frac{2}{3}$$

局部截断误差为: $R_n = \frac{h^3}{6}[f_y(f_x + ff_y)]_{(x_{n-1}, y_{n-1})}$

Runge-Kutta法

所以二阶 R-K 方法为

$$\begin{cases} y_n = y_{n-1} + \frac{1}{4}(k_1 + 3k_2) \\ k_1 = hf(x_{n-1}, y_{n-1}) \\ k_2 = hf(x_{n-1} + \frac{2}{3}h, y_{n-1} + \frac{2}{3}k_1) \end{cases}$$

该方法又称为二阶 Heun （休恩）方法。

若取 $c_1 = c_2 = \frac{1}{2}$, 则 $a_2 = b_{21} = 1$

$$\begin{cases} y_n = y_{n-1} + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \\ k_1 = hf(x_{n-1}, y_{n-1}) \\ k_2 = hf(x_{n-1} + h, y_{n-1} + k_1) \end{cases}$$

得 Euler 预测-校正格式

Runge-Kutta法

Remark 1: 我们可以构造无穷多个二阶 R-K 方法，这些方法的截断误差均为 $\mathcal{O}(h^3)$ ，即都是二阶方法。其中二阶 Heun 方法是截断误差项数最少，且允许 f 任意变化的情况下截断误差最小的二阶方法。

Remark 2: 二阶 R-K 方法不可能达到三阶。

Remark 3: 同样可构造其他阶的 R-K 方法它们都有无穷多组解且三阶 R-K 方法阶数不超过3，四阶 R-K 方法阶数不超过4。

Remark 4: 更高阶的方法由于计算量较大一般不再采用。

Runge-Kutta法

三阶 R-K 法。

$$\begin{cases} y_n = y_{n-1} + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \\ k_1 = hf(x_{n-1}, y_{n-1}) \\ k_2 = hf\left(x_{n-1} + \frac{1}{2}h, y_{n-1} + \frac{1}{2}k_1\right) \\ k_3 = hf(x_{n-1} + h, y_{n-1} + (2k_2 - k_1)) \end{cases}$$

标准（经典）四阶 R-K 公式

$$\begin{cases} y_n = y_{n-1} + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 = hf(x_{n-1}, y_{n-1}) \\ k_2 = hf(x_{n-1} + \frac{1}{2}h, y_{n-1} + \frac{1}{2}k_1) \\ k_3 = hf(x_{n-1} + \frac{1}{2}h, y_{n-1} + \frac{1}{2}k_2) \\ k_4 = hf(x_{n-1} + h, y_{n-1} + k_3) \end{cases}$$

关于R-K方法计算量的讨论

二阶R-K方法需计算两个函数值，四阶R-K方法需计算四个函数值，但精度要比二阶方法高出两阶。因此，要达到同样的精度，用低阶方法需步长取得比较小，但若用高阶方法则可以将步长取得大一些，从而降低计算量。

例题

例: 使用三阶、四阶R-K法计算初值问题:

$$\begin{cases} y' = y^2, x \in [0, 0.5] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

的部分数值解 y_1, y_2, y_3 , 其中 $h = 0.1$

例题

例: 使用三阶、四阶R-K法计算初值问题:

$$\begin{cases} y' = y^2, x \in [0, 0.5] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

的部分数值解 y_1, y_2, y_3 , 其中 $h = 0.1$

解: (1) 三阶R-K法

$$\begin{cases} y_n = y_{n-1} + \frac{h}{6} (k_1 + 4k_2 + k_3) \\ k_1 = f(x_{n-1}, y_{n-1}) = y_{n-1}^2 \\ k_2 = f(x_{n-1} + 0.5h, y_{n-1} + 0.5hk_1) = (y_{n-1} + 0.5hy_{n-1}^2)^2 \\ k_3 = f(x_{n-1} + h, y_{n-1} + h(2k_2 - k_1)) = (y_{n-1} + h(2k_2 - k_1))^2 \end{cases}$$

例题

当 $n = 1$

$$\begin{cases} k_1 = f(x_0, y_0) = y_0^2 = 1 \\ k_2 = f(x_0 + 0.5h, y_0 + 0.5hk_1) = (y_0 + 0.5hy_0^2)^2 = 1.102500 \\ k_3 = f(x_0 + h, y_0 + h(2k_2 - k_1)) = (y_{n-1} + h(2k_2 - k_1))^2 \approx 1.255520 \\ y_1 = y_0 + \frac{h}{6}(K_1 + 4k_2 + k_3) \approx 1.111092 \end{cases}$$

当 $n = 2$

$$\begin{cases} k_1 = f(x_1, y_1) = y_1^2 = 1.111092^2 \approx 1.234525 \\ k_2 = f(x_1 + 0.5h, y_1 + 0.5hk_1) = (y_1 + 0.5hy_1^2)^2 = 1.375502 \\ k_3 = f(x_1 + h, y_1 + h(2k_2 - k_1)) = (y_1 + h(2k_2 - k_1))^2 \approx 1.594512 \\ y_2 = y_1 + \frac{h}{6}(K_1 + 4k_2 + k_3) \approx 1.249943 \end{cases}$$

当 $n = 3$: 略

例题

(2) 四阶R-K法

$$\begin{cases} K_1 = f(x_{n-1}, y_{n-1}) = y_{n-1}^2 \\ K_2 = f(x_{n-1} + 0.5h, y_{n-1} + 0.5hK_1) = (y_{n-1} + 0.5hK_1)^2 \\ K_3 = f(x_{n-1} + 0.5h, y_{n-1} + 0.5hK_2) = (y_{n-1} + 0.5hK_2)^2 \\ K_4 = f(x_{n-1} + h, y_{n-1} + hK_3) = (y_{n-1} + hK_3)^2 \\ y_n = y_{n-1} + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{cases}$$

当 $n = 1$

$$\begin{cases} k_1 = f(x_0, y_0) = y_0^2 = 1.000000 \\ k_2 = f(x_0 + 0.5h, y_0 + 0.5hk_1) = (y_0 + 0.5hk_1)^2 = 1.102500 \\ k_3 = f(x_0 + 0.5h, y_0 + 0.5hk_2) = (y_0 + 0.5hk_2)^2 \approx 1.113289 \\ k_4 = f(x_0 + h, y_0 + hk_3) = (y_0 + hk_3)^2 \approx 1.235052 \\ y_1 = y_0 + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \approx 1.111111 \end{cases}$$

例题

当 $n = 2$

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = f(x_1, y_1) = y_1^2 = 1.234568 \\ k_2 = f(x_1 + 0.5h, y_1 + 0.5hk_1) = (y_1 + 0.5hk_1)^2 = 1.375551 \\ k_3 = f(x_1 + 0.5h, y_1 + 0.5hk_2) = (y_1 + 0.5hk_2)^2 \approx 1.392138 \\ k_4 = f(x_1 + h, y_1 + hk_3) = (y_1 + hk_3)^2 \approx 1.563313 \\ y_2 = y_1 + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \approx 1.249999 \end{array} \right.$$

当 $n = 3$

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = f(x_2, y_2) = y_2^2 = 1.562498 \\ k_2 = f(x_2 + 0.5h, y_2 + 0.5hk_1) = (y_2 + 0.5hk_1)^2 = 1.763913 \\ k_3 = f(x_2 + 0.5h, y_2 + 0.5hk_2) = (y_2 + 0.5hk_2)^2 \approx 1.790766 \\ k_4 = f(x_2 + h, y_2 + hk_3) = (y_2 + hk_3)^2 \approx 2.042258 \\ y_3 = y_2 + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \approx 1.428568 \end{array} \right.$$