第7章

常微分方程初值问题数值解法

7.1.4 显式 Runge-Kutta法

7.1.4 显式Runge-Kutta法

Euler是最简单的单步法。单步法不需要附加初值，所需的存储量小，改变步长灵活，但线性单步法的阶最高为2，**Taylor**展开法，用在同一点(t_n,u_n)的高阶导数表示 $\varphi(t,u(t);h)$， 这不便于计算

通过观察我们发现显式**Euler**法和隐**Euler**法各用到了$u(t)$在$[t,t+h]$上的一个一阶导数值f，它们都是一阶方法。梯形法和改进的**Euler**法用到了$u(t)$在$[t,t+h]$上的两个一阶导数值，它们都是二阶方法。

我们要研究的**Runge-Kutta**方法是一种高阶单步法，它是用$u(t)$在$[t,t+h]$上的斜率f在一些点的值非线性表示 $f(t,u(t),h)$使得其局部截断误差的阶和**Taylor**展开法相等。

Runge-Kutta方法是求解初值问题(**7-1**)的一类重要的经典算法。其中显式**Runge-Kutta**法绝对稳定区域为有限，不适用于求解刚性方程。**1964**年**Butcher**首先提出了隐式的**Runge-Kutta**法，可用于求解刚性方程。

Runge-Kutta方法的一般结构

$$u_{n+1} = u_n + h\,\varphi\left(t_n, t_{n+1}, u_n, u_{n+1}, h\right) = u_n + h\sum_{i=1}^{m} c_i k_i$$

$$k_i = f\left(t_n + ha_i, u_n + h\sum_{j=1}^{m} b_{ij} k_j\right) \quad i = 1, \cdots, m,$$

其中 $t_n = t_0 + nh\,, (n = 0, 1, \cdots,)$，$h$为积分步长，$u_n$为$u(t_n)$的近似值， $\boldsymbol{B}=(b_{ij})$ $(i, j=1, \cdots, m)$称为**Runge-Kutta矩阵**，其中在上面公式中未出现的元素定义为零； $\boldsymbol{a}=(a_1, a_2, \cdots, a_m)^T$ 和 $\boldsymbol{c}=(c_1, c_2, \cdots, c_m)^T$ 分别称为**Runge-Kutta节点**和**Runge-Kutta权**。且这些系数要满足以下条件

$$c_i \geq 0,\quad \sum_{i=1}^{m} c_i = 1,\quad \sum_{j=1}^{m} b_{ij} = a_i,\quad i = 1, 2, \cdots, m$$

通常可将这些系数排列成以下形式，成为**Butcher**数表示法：

$$\begin{array}{c|c} \boldsymbol{a} & \boldsymbol{B} \\ \hline & \boldsymbol{c}^T \end{array} \qquad \begin{array}{c|ccc} a_1 & b_{11} & \cdots & b_{1m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_m & b_{m1} & \cdots & b_{mm} \\ \hline & c_1 & \cdots & c_m \end{array}$$

在公式中要用到m个$f(t,u)$的值，故称为m级**Runge-Kutta**法。

如果$j \geqslant i$时，b_{ij}=0，则为严格下三角矩阵, 就是显式**Runge-Kutta**方法, 此时 $k_1=f(t_n, u_n)$, 则由计算公式可逐个递推出k_2, ···, k_m。

如果$j > i$时, b_{ij}=0, 而对角元素b_{ii}不全为零, 这时公式称为半隐式**Runge-Kutta**方法, 这时k_i可表示为：

$$k_i = f\left(t + ha_i, u_n + h\sum_{j=1}^{m-1} b_{ij}k_j + hb_{ii}k_i\right) \qquad i = 1, \cdots, m,$$

这是关于k_i的非线性方程式，因此每一步要解m个非线性方程式，若b_{ii}均相等，则成为对角隐式**Runge-Kutta**方法简称**DIRK**方法，此时由上式求k_i的系数矩阵相同，故每步只求一个非线性方程式的解。

一般隐式**Runge-Kutta**方法的右端包含全部$k_1, k_2, \cdots, k_m$，故求$k_1, k_2, \cdots, k_m$需要解一个$m\times m$阶的非线性方程组。

为得到**Runge-Kutta**公式需要确定公式的系数$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{c}$。

下面我们用**Taylor展开思想**来构造高阶**显式Runge-Kutta**公式。

先引进若干记号，首先$[t, t+h]$取上的m个点：

$$t_1 = t \le t_2 \le t_3 \le \cdots \le t_m \le t + h,$$

令 $t_i = t + a_i h = t_1 + a_i h, \quad i = 2, \cdots, m$，此时**Runge-Kutta节点为：**

$\boldsymbol{a} = (0, a_2, \cdots, a_m)^T$，**Runge-Kutta矩阵$B$**为严格三角矩阵：

$$\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} b_{21} & & & \\ b_{31} & b_{32} & & \\ \cdots & \cdots & & \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mm-1} \end{pmatrix}$$

其中$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{B}$与$h$无关。

满足 $\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} = a_i, \quad i = 2, \cdots, m, \quad c_i \ge 0, \quad \sum_{i=1}^{m} c_i = 1$

假设三组系数 $\{a_i\}$ $\{b_{ij}\}$ 和 $\{c_i\}$ 已给定，则**Runge-Kutta**法的计算过程如下：

$$u_{n+1}=u_n+h\varphi(t_n,u_n,h),\quad n=0,1,\cdots \qquad \textbf{(7-12)}$$

其中

$$\varphi(t_n,u_n,h)=\sum_{i=1}^{m}c_ik_i \qquad \textbf{(7-13)}$$

$$\textbf{(7-14)}\quad \begin{cases} k_1=f(t_n,u_n), \\ k_2=f\left(t_n+ha_2,u_n+hb_{21}k_1\right),\quad b_{21}=a_2, \\ k_3=f\left(t_n+ha_3,u_n+h\left(b_{31}k_1+b_{32}k_2\right)\right),\quad b_{31}+b_{32}=a_3, \\ \cdots\quad\cdots \\ k_m=f\left(t_n+ha_m,u_n+h\sum_{j=1}^{m-1}b_{mj}k_j\right),\quad \sum_{j=1}^{m-1}b_{mj}=a_m \end{cases}$$

其**Butcher**数表示法为：

$$
\begin{array}{c|c}
\boldsymbol{a} & \boldsymbol{B} \\
\hline
 & \boldsymbol{c}^T
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|ccc}
a_1 & b_{21} & & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \\
a_m & b_{m1} & \cdots & b_{m-1m} \\
\hline
 & c_1 & \cdots & c_m
\end{array}
$$

系数 $\{a_i\}$, $\{b_{ij}\}$ 和 $\{c_i\}$ 将按如下原则确定：

假定 $u(t_n)=u_n$ ，由显式**Runge-Kutta**公式得到的数值解 u_{n+1} 与方的精确解 $u(t_{n+1})$ 局部截断误差为：

$$u(t_{n+1})-u_{n+1}=O\left(h^{p+1}\right)$$

将$u(t_{n+1})$在 t_n 处**Taylor**展开, 再将k_i关于h展开， 代入**(7-13)**式中, 使 h^l(l=0, 1, ⋯, p-1)的系数和(**7-11**)式同次幂的系数相等。

如此得到的算法(1. 4. 14)称为m级p阶**Runge-Kutta**法

现在推导一些常用的计算方案，特别地，给出 m=3 显式**Runge-Kutta**法的推导。

首先将$u(t+h)$在t处展开到h的三次幂, 即：

$$u(t+h)=u(t)+\sum_{l=1}^{3}\frac{h^l}{l!}u^{(l)}(t)+O(h^4)=u(t)+h\tilde{\varphi}(t,u(t),h), \quad \textbf{(7-15)}$$

其中

$$\begin{cases} \tilde{\varphi}(t,u,h)=f+\dfrac{1}{2}h\tilde{f}+\dfrac{1}{6}h^2(\tilde{f}f_u+\hat{f})+O(h^3) \\ \tilde{f}=f_t+ff_u \\ \hat{f}=f_{tt}+2ff_{tu}+f^2f_{uu} \end{cases} \quad \textbf{(7-16)}$$

其次, 由二元函数$f(t,u(t))$在(t, u)点处的**Taylor**展开式可得:

$$k_1 = f(t,u(t)) = f,$$

$$k_2 = f(t+ha_2, u+ha_2k_1)$$

$$= f + ha_2(f_t + k_1 f_u) + \frac{1}{2}h^2 a_2^{\ 2}\left(f_{tt} + 2k_1 f_{tu} + k_1^{\ 2} f_{uu}\right) + O(h^3)$$

$$= f + ha_2\tilde{f} + \frac{1}{2}h^2 a_2^{\ 2}\hat{f} + O(h^3)$$

$$k_3 = f + ha_3\tilde{f} + h^2(a_2 b_{32} f_u \tilde{f} + \frac{1}{2}a_3^{\ 2}\hat{f}) + O(h^3)$$

于是，将k_1, k_2, k_3代入（**7-13**）中,

$$\varphi(t,u,h) = \sum_{i=1}^{3} c_i k_i = \left(c_1k_1 + c_2k_2 + c_3k_3\right)$$

$$= c_1 f + c_2\left(f + ha_2\tilde{f} + \frac{1}{2}a_3\hat{f}\,h^2\right)$$

$$+ c_3\left(f + a_3\tilde{f}\,h + \left(a_2 b_{32} f_u \tilde{f} + \frac{1}{2}a_3^2\hat{f}\right)h^2\right) + O(h^3)$$

合并 $\varphi(t,u,h)$ 展开式中的各阶 $h^l\,(l=0,1,2)$ 的系数，

$$\varphi(t,u,h)=\sum_{i=1}^{3}c_ik_i=(c_1+c_2+c_3)\,f+h\left(\underline{a_2c_2+a_3c_3}\right)\tilde{f}$$

$$+\frac{1}{2}h^2\left[\underline{2a_2b_{32}c_3}\,\tilde{f}f_u+(\underline{a_2{}^2c_2+a_3{}^2c_3})\,\hat{f}\,\right]+O(h^3)\qquad \textbf{(7-17)}$$

由**(7-16)**已

$$\tilde{\varphi}(t,u,h)=u'(t)+u''(t)\frac{1}{2}h+u^{(3)}(t)\frac{1}{6}h^2$$

$$=f+\frac{1}{2}h\,\tilde{f}+\frac{1}{6}h^2\left(\tilde{f}f_u+\hat{f}\right)+O(h^3)$$

$$=f+\frac{1}{\underline{2}}h\,\tilde{f}+\frac{1}{2}h^2\left(\frac{1}{\underline{3}}\,\tilde{f}f_u+\frac{1}{\underline{3}}\,\hat{f}\right)+O(h^3)$$

其中

$$\tilde{f}=f_t+ff_u\,,\ \hat{f}=f_{tt}+2\,ff_{tu}+f^2f_{uu}\,。$$

比较 $\varphi(t,u,h)$ 和 $\tilde{\varphi}(t,u,h)$ 的同次幂系数，

特别地

（一）m=1 此时 c_2=c_3=0，$\varphi(t,u,h)=c_1 f$，比较h的零次幂, 知

$$\varphi(t,u,h)=f,$$

方法**(7-13)**为一级一阶**Runge-Kutta**法, 实际上为**Euler**法。

（二）m=2, 此时 c_3=0， 则

$$\varphi(t,u,h)=\underline{(c_1+c_2)}\,f+\underline{a_2c_2}h\,\tilde{f}+\frac{1}{2}h^2a_2^2c_2\,\hat{f}+O(h^3)$$

$$\tilde{\varphi}(t,u,h)=\underline{\ }\,f+\frac{1}{\underline{2}}h\,\tilde{f}+\frac{1}{6}h^2\left(\tilde{f}f_u+\hat{f}\right)+O(h^3)$$

与 $\tilde{\varphi}(t,u,h)$ 比较1, h的系数，则

$$c_1+c_2=1 \qquad a_2c_2=\frac{1}{2}$$

它有无穷多组解，从而有无穷多个二级二阶方法。

三个常见的方法是：

（1） $c_1=0, c_2=1, a_2=\frac{1}{2}$，此时

$$\begin{cases} u_{n+1}=u_n+hk_2, \\ k_1=f(t_n,u_n), \\ k_2=f\left(t_n+\frac{1}{2}h, u_n+\frac{1}{2}hk_1\right) \end{cases} \tag{7-18}$$

称为中点法。

其Butcher表为：

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

（2） $c_1 = c_2 = \frac{1}{2}$, $a_2 = 1$, 此时

$$\begin{cases} u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2), \\ k_1 = f(t_n, u_n), \\ k_2 = f(t_n + h, u_n + hk_1) \end{cases} \tag{7-19}$$

称为**改进的Euler法**。

其**Butcher**表为

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ 1 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

（3）$c_1=\frac{1}{4}$，$c_2=\frac{3}{4}$，$a_2=\frac{2}{3}$，此时

$$
\begin{cases}
u_{n+1}=u_n+\frac{h}{4}\left(k_1+3k_2\right), \\
k_1=f(t_n,u_n), \\
k_2=f\left(t_n+\frac{2}{3}h, u_n+\frac{2}{3}hk_1\right)
\end{cases}
$$

其Butcher表为：

$$
\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
\frac{2}{3} & 1 & \\
\hline
 & \frac{1}{4} & \frac{3}{4}
\end{array}
$$

对于$m=3$ 比较**(7-16)**和**(7-17)**, 令 $1, h, h^2$ 的系数相等, 并注意 $\tilde{f}$, $\hat{f}$ 的任意性, 得

$$c_1+c_2+c_3=1, \qquad a_2c_2+a_3c_3=\frac{1}{2}$$

$$a_2^{\;2}c_2+a_3^{\;2}c_3=\frac{1}{3}, \qquad a_2b_{32}c_3=\frac{1}{6}.$$

四个方程不能完全确定六个系数，因此这是含两个参数的三级三阶方法类。 常见方案有：

（1）**Heun**三阶方法。 此时取

$$c_1=\frac{1}{4},\ c_2=0,\ c_3=\frac{3}{4},\ a_2=\frac{1}{3},\ a_3=\frac{2}{3},\ b_{32}=\frac{2}{3}。$$

$$
\begin{cases}
u_{n+1} = u_n + \dfrac{h}{4}\left(k_1 + 3k_3\right), \\
k_1 = f(t_n, u_n), \\
k_2 = f\left(t_n + \dfrac{1}{3}h, u_n + \dfrac{1}{3}hk_1\right) \\
k_3 = f\left(t_n + \dfrac{2}{3}h, u_n + \dfrac{2}{3}hk_2\right)
\end{cases}
\tag{7-20}
$$

Butcher表为：

$$
\begin{array}{c|ccc}
0 & & & \\
\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & \\
\frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & \\
\hline
 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4}
\end{array}
$$

（2）**Kutta三阶方法**， 此时

$$c_1=\frac{1}{6},\ c_2=\frac{2}{3},\ c_3=\frac{1}{6},\ \ a_2=\frac{1}{2},\ a_3=1,\ b_{31}=-1,\ b_{32}=2。$$

方法为：

$$\begin{cases} u_{n+1}=u_n+\dfrac{1}{6}h\left(k_1+4k_2+k_3\right), \\ k_1=f(t_n,u_n), \\ k_2=f\left(t_n+\dfrac{1}{2}h,u_n+\dfrac{1}{2}hk_1\right), \\ k_3=f\left(t_n+h,u_n-hk_1+2hk_2\right). \end{cases} \qquad (7\text{-}21)$$

Butcher表为：

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\ 1 & -1 & 2 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{2}{6} \end{array}$$

（四）m=4将**(7-16)**和**(7-17)**展开到h^3, 比较 $h^i\left(i=0,1,2,3\right)$ 的系数 则含13个待定系数的11个方程，由此得到含两个参数的**四级四阶Runge-Kutta方法**类，其中最常用的有以下两个方法：

$$\begin{cases} u_{n+1}=u_n+\dfrac{h}{6}\left(k_1+2k_2+2k_3+k_4\right), \\ k_1 = f(t_n,u_n), \\ k_2=f\left(t_n+\dfrac{1}{2}h,u_n+\dfrac{1}{2}hk_1\right), \\ k_3=f\left(t_n+\dfrac{1}{2}h,u_n+\dfrac{1}{2}hk_2\right), \\ k_4 = f(t_n+h,u_n+hk_3). \end{cases} \tag{7-22}$$

$$\begin{cases} u_{n+1}=u_n+\dfrac{h}{8}\left(k_1+3k_2+3k_3+k_4\right), \\ k_1 = f(t_n,u_n), \\ k_2=f\left(t_n+\dfrac{1}{3}h,u_n+\dfrac{1}{3}hk_1\right), \\ k_3=f\left(t_n+\dfrac{2}{3}h,u_n-\dfrac{1}{3}hk_1+hk_2\right), \\ k_4 = f(t_n+h,u_n+hk_3). \end{cases} \tag{7-23}$$

Butcher表分别为：

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\
\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6}
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & & \\
\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & 1 & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & \frac{1}{8} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} & \frac{1}{8}
\end{array}
$$

(7-22)是最常用的**Runge-Kutta**方法（经典**Runge-Kutta**方法）。

以上讨论的是m级**Runge-Kutta**法在m=1, 2, 3, 4时, 可分别得到最高阶级一、二、三、四阶， 但是， 通常m级**Runge-Kutta**方法最高阶不一定是m阶。 若设$p(m)$是m级**Runge-Kutta**方法可达到的最高阶, 可证：

$$p(5)=4,\ p(6)=5,\ p(7)=6,\ p(8)=6,\ p(9)=7。$$

例1 分别用**Euler**法, 改进的**Euler**法和**Runge-Kutta**法(**5.22**)

求解初值问题:

$$u' = 1 - \frac{2tu}{1+t^2}, \quad 0 \le t \le 2, \quad u(0) = 0$$

解：**Euler**法计算公式为：$u_{n+1} = u_n + h\left(1 - \dfrac{2t_n u_n}{1+t_n^{\,2}}\right),$

改进的**Euler**法计算公式为：

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{2}h(k_1 + k_2),\ k_1 = 1 - \frac{2t_n u_n}{1+t_n^{\,2}},\quad k_2 = 1 - \frac{2(t_n + h)(u_n + hk_1)}{1+(t_n+h)^2},$$

Runge-Kutta法计算公式为：

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),\quad k_1 = 1 - \frac{2t_n u_n}{1+t_n^{\,2}},\ k_2 = 1 - \frac{2\left(t_n + \frac{1}{2}h\right)\left(u_n + \frac{1}{2}hk_1\right)}{1+\left(t_n + \frac{1}{2}h\right)^2},$$

$$k_3 = 1 - \frac{2\left(t_n + \frac{1}{2}h\right)\left(u_n + \frac{1}{2}hk_2\right)}{1+(t_n+h)^2},\quad k_4 = 1 - \frac{2(t_n + h)(u_n + hk_3)}{1+(t_n+h)^2}.$$

取步长h=0. 5, t_n=0. 5n, n=0, 1, 2, 3。并与精确解：$u(t)=\dfrac{t(3+t^2)}{3(1+t^2)}$ 作比较, 计算结果见下表：

三个方法计算结果比较表

n	t_n	精确解$u(t_n)$	Euler法		改进Euler法		经典Runge-Kutta法	
			数值解u_n	误差	数值解u_n	误差	数值解u_n	误差
0	**0**	**0**	**0**	**0**	**0**	**0**	**0**	**0**
1	**0.5**	**0.433333**	**0.500000**	**0.066667**	**0.400000**	**0.033333**	**0.433218**	**0.000115**
2	**1.0**	**0.666667**	**0.800000**	**0.133333**	**0.635000**	**0.031667**	**0.666312**	**0.000355**
3	**1.5**	**0.807692**	**0.900000**	**0.092308**	**0.787596**	**0.020096**	**0.807423**	**0.000269**
4	**2.0**	**0.933353**	**0.985615**	**0.051282**	**0.921025**	**0.012308**	**0.933156**	**0.000171**

衡量求解公式好坏的一个主要标准是求解公式的精度。

定义 假设$u_i=(u(t_i))$，$i=0, 1, 2, \cdots, n-1$，则称

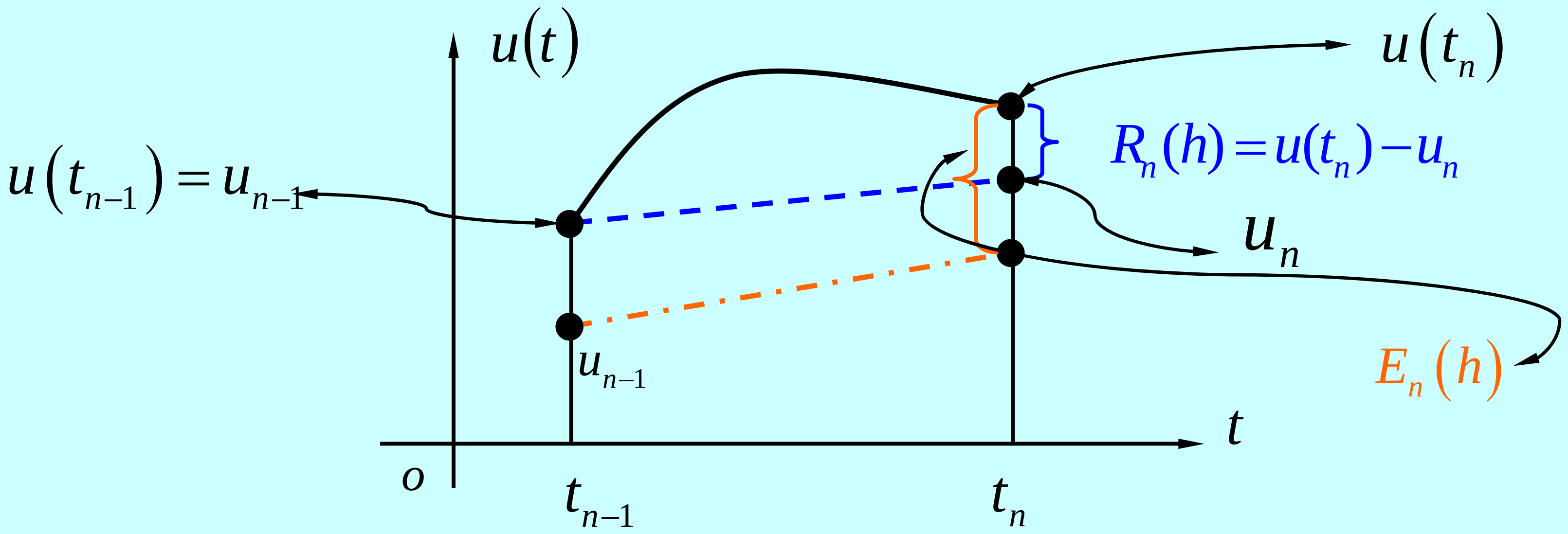
$$R_n(h)=u(t_n)-u_n$$

为求解公式第n步的局部截断误差。

定义

$$E_n(h)=u(t_n)-u_n=\sum_{i=1}^{n}R_i(h)$$

为求解公式在t_n点上的整体截断误差。



如果设某求解公式的局部截断误差：$R_n(h)=O(h^{p+1})$

则我们可以证明其整体截断误差为： $E_n(h)=O(h^p)$

这样我们就称该求解公式具有 p 阶精度。

事实上，若 $R_i(h)=O(h^{p+1}),\ i=1,2,\cdots,n$，则

$$E_n(h)=\sum_{i=1}^{n}R_i(h)=\sum_{i=1}^{n}O\left(h^{p+1}\right)=\sum_{i=1}^{n}h\cdot O\left(h^{p}\right)$$

$$=h\cdot O\left(h^{p}\right)\cdot n=O\left(h^{p}\right)\cdot \cancel{n}\times\frac{b-a}{\cancel{n}}=O\left(h^{p}\right)$$

求解公式的精度越高, 计算解的精确性可能越好。 通过简单的分析, 可知**Euler**法具有一阶精度, 梯形法具二阶精度。

下面利用**Taylor**展开, 求**Euler**法的局部截断误差

$$
\begin{aligned}
R_{n+1}(h) &= u(t_{n+1}) - u_{n+1} = u(t_{n+1}) - \left[u_n + h\, f(t_n, u_n)\right] \\
&= u(t_{n+1}) - \left[u(t_n) + h\, f(t_n, u(t_n))\right] \qquad \boxed{u(t_n) = u_n} \\
&= \underline{u(t_{n+1})} - \left[u(t_n) + h\, u'(t_n)\right] \qquad \boxed{u'(t_n) = f(t_n, u(t_n))} \\
&= \cancel{u(t_n)} + \cancel{h u'(t_n)} + \frac{h^2}{2!} u'(t_n) + O(h^3) - \cancel{u(t_n)} - \cancel{h u'(t_n)} \\
&= O(h^2)
\end{aligned}
$$

课堂练习

已知某**Runge-Kutta**法的 **Butcher**表为：

$$
\begin{array}{c|ccc}
0 & & & \\
\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & & \\
\frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & \\
\hline
 & \frac{1}{4} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8}
\end{array}
$$

请正确的写出它的计算公式。

THE END