8.2 Runge-Kutta 方法

8.2.1 二阶 Runge-Kutta 方法

常微分方程初值问题 $\begin{cases} y'(x)=f(x,y), \\ y(x_0)=y_0, \end{cases}$ $a \leqslant x \leqslant b$, 作 $y(x+h)$ 在 x 点的 Taylor 展开：

$$\begin{aligned} y(x+h) &= y(x)+hy'(x)+\frac{h^2}{2!}y''(x)+\cdots+\frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x)+\frac{h^{(p+1)}}{(p+1)!}y^{(p+1)}(x+\theta h) \\ &= y(x)+hy'(x)+\frac{h^2}{2!}y''(x)+\cdots+\frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x)+T \end{aligned}$$

这里 $0 \leqslant \theta \leqslant 1$, $T=O(h^{p+1})$. 取 $x=x_n$, 就有

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2!}y''(x_n)+\cdots+\frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x)+T_{n+1} \tag{8.11}$$

取 $p=1$,

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+hy'(x_n)+T_{n+1}=y(x_n)+hf(x_n,y(x_n))+T_{n+1}$$

截断 T_{n+1} 可得到 $y(x_{n+1})$ 近似值 y_{n+1} 的计算公式

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)$$

这就是 Euler 公式.

若取 $p=2$, (8.11) 可写成

$$\begin{aligned} &y(x_{n+1}) \\ =&y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2!}y''(x_n)+T_{n+1} \\ =&y(x_n)+hf(x_n,y(x_n))+\frac{h^2}{2!}[f_x(x_n,y(x_n))+f_y(x_n,y(x_n))f(x_n,y(x_n))]+T_{n+1} \end{aligned}$$

或

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+h\left\{f(x_n,y(x_n))\right.$$

$$\left.+\frac{h}{2!}[f_x(x_n,y(x_n))+f_y(x_n,y(x_n))f(x_n,y(x_n))]\right\}+T_{n+1} \quad (8.12)$$

截断 T_{n+1} 可得到 $y(x_{n+1})$ 近似值 y_{n+1} 的计算公式：

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

或

$$y_{n+1}=y_n+h\left[f(x_n,y_n)+\frac{h}{2}(f_x(x_n,y_n)+f_y(x_n,y_n)f(x_n,y_n))\right]$$

以上的公式为二阶方法，精度优于一阶的 Euler 公式 (8.2)，但是在计算 y_{n+1} 时，需要计算 f,f_x,f_y 在 (x_n,y_n) 点的值，因此，此法不可取。

Runge-Kutta(龙格 - 库塔) 设想用 $f(x,y)$ 在点 $(x_n,y(x_n))$ 和 $(x_n+ah,y(x_n)+bhf(x_n,y(x_n)))$ 值的线性组合逼近 (8.12) 的主体，用

$$c_1f(x_n,y(x_n))+c_2f(x_n+ah,y(x_n)+bhf(x_n,y(x_n)) \quad (8.13)$$

逼近

$$f(x_n,y(x_n))+\frac{h}{2}[f_x(x_n,y(x_n))+f_y(x_n,y(x_n))f(x_n,y(x_n))] \quad (8.14)$$

得到数值公式

$$y_{n+1}=y_n+h[c_1f(x_n,y_n)+c_2f(x_n+ah,y_n+bhf(x_n,y_n))]$$

或更一般地写成

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+h(c_1k_1+c_2k_2) \\ k_1=f(x_n,y_n) \\ k_2=f(x_n+ah,y_n+bhk_1) \end{cases}$$

对 (8.13) 在 $(x_n,y(x_n))$ 点展开得到

$$c_1f(x_n,y(x_n))+c_2[f(x_n,y(x_n))+ahf_x(x_n,y(x_n))$$
$$+bhf_y(x_n,y(x_n))f(x_n,y(x_n))+O(h^2)]$$
$$=(c_1+c_2)f(x_n,y(x_n))+\frac{h}{2}[2c_2af_x(x_n,y(x_n))$$
$$+2c_2bf_y(x_n,y(x_n))f(x_n,y(x_n))+O(h^2)]$$

将上式与 (8.12) 比较. 当 c_1, c_2, a, b 满足

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ 2c_2 a = 1 \\ 2c_2 b = 1 \end{cases}$$

时有最好的逼近效果. 此时式 (8.13)− 式 (8.14)= $O(h^2)$. 这是四个未知数的三个方程, 显然方程组有无数组解.

若取 $c_1 = \frac{1}{2}$, $c_2 = \frac{1}{2}$, $a = 1$, $b = 1$, 则有二阶 Runge-Kutta 公式:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_n + h, y_n + hk_1) \end{cases} \tag{8.15}$$

若取 $c_1 = 0$, $c_2 = 1$, $a = \frac{1}{2}$, $b = \frac{1}{2}$, 则得另一种形式的二阶 Runge-Kutta 公式, 也称中点公式:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hk_2 \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right) \end{cases} \tag{8.16}$$

从公式建立过程中可看到, 二阶 Runge-Kutta 公式的局部截断误差仍为 $O(h^3)$, 是二阶精度的计算公式. 类似地想法, 可建立高阶的 Runge-Kutta 公式. 同理可知四阶 Runge-Kutta 公式的局部截断误差界为 $O(h^5)$ 的四阶精度计算公式.

8.2.2 四阶 Runge-Kutta 格式

下面列出常用的三阶、四阶 Runge-Kutta 计算公式:

三阶 Runge-Kutta 公式:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1\right) \\ k_3 = f(x_n + h, y_n - hk_1 + 2hk_2) \end{cases} \tag{8.17}$$

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{4}(k_1 + 3k_3) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f\left(x_n + \dfrac{1}{3}h, y_n + \dfrac{1}{3}hk_1\right) \\ k_3 = f\left(x_n + \dfrac{2}{3}h, y_n + \dfrac{2}{3}hk_2\right) \end{cases} \tag{8.18}$$

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{9}(2k_1 + 3k_2 + 4k_3) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f\left(x_n + \dfrac{1}{2}h, y_n + \dfrac{1}{2}hk_1\right) \\ k_3 = f\left(x_n + \dfrac{3}{4}h, y_n + \dfrac{3}{4}hk_2\right) \end{cases} \tag{8.19}$$

四阶 Runge-Kutta 公式：

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f\left(x_n + \dfrac{1}{2}h, y_n + \dfrac{1}{2}hk_1\right) \\ k_3 = f\left(x_n + \dfrac{1}{2}h, y_n + \dfrac{1}{2}hk_2\right) \\ k_4 = f(x_n + h, y_n + hk_3) \end{cases} \tag{8.20}$$

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{8}(k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f\left(x_n + \dfrac{1}{3}h, y_n + \dfrac{1}{3}hk_1\right) \\ k_3 = f\left(x_n + \dfrac{2}{3}h, y_n + \dfrac{1}{3}hk_1 + hk_2\right) \\ k_4 = f(x_n + h, y_n + hk_1 - hk_2 + hk_3) \end{cases} \tag{8.21}$$

例 8.3 用四阶 Runge-Kutta 公式 (8.20) 解初值问题:

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = y^2 \cos x, & 0.1 \leqslant x \leqslant 0.8 \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

解 取步长 $h = 0.2$, 计算公式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{0.2}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 = y_n^2 \cos x_n \\ k_2 = (y_n + 0.1k_1)^2 \cos(x_n + 0.1) \\ k_3 = (y_n + 0.1k_2)^2 \cos(x_n + 0.1) \\ k_4 = (y_n + 0.2k_3)^2 \cos(x_n + 0.2) \end{cases}$$

计算结果列于表 8.3 中.

表 8.3

n	x_n	y_n	$y(x_n)$	$\|y_n - y(x_n)\|$
1	0.2	1.24789	1.24792	0.00003
2	0.4	1.63762	1.63778	0.00016
3	0.6	2.29618	2.29696	0.00078
4	0.8	3.53389	3.53802	0.00413

8.2.3 步长的自适应

Euler 方法和 Runge-Kutta 方法在计算 y_{n+1} 时仅用到前一步 y_n 的值, 我们称这样的方法为单步法. 在单步法计算中根据需要可以取等步长或变步长. 对于 $y(x)$ 变化平缓的区段, 步长可以取大一些; 而对于 $y(x)$ 变化激烈的区段, 则步长可以取小一些. 怎样合理选取步长?

以计算 y_1 为例, 已知 y_0 的数值, 取 $h = h_0$ 作初始步长, ε 是给定的控制精度, 用 Euler 法或 Runge-Kutta 公式的计算公式.

记 $y_1^{(h)}$ 为由 y_0 和步长 h 算出的 y_1, 记 $y_1^{(h/2)}$ 为由 y_0 和步长 $h/2$ 算出的 y_1, 即 $y_1^{(h)}, y_1^{(h/2)}$ 均是 $y(x_0 + h)$ 的近似值, 当 $|y_1^{(h)} - y_1^{(h/2)}| < \varepsilon$, 逐步放大步长, $h \leftarrow 2h$, 直到 $|y_1^{(h)} - y_1^{(h/2)}| > \varepsilon$ 时为止, 最后取 $h/2$ 为步长的值.

而当 $|y_1^{(h)} - y_1^{(h/2)}| > \varepsilon$, 逐步缩小步长, $h \leftarrow h/2$, 直到 $|y_1^{(h)} - y_1^{(h/2)}| < \varepsilon$ 时为止, 取 h 为步长的值.

下面给出自适应算法的描述:

给定控制精度 e 和初始步长 h_0

对于 $n=1,2,\cdots,m$

$h=h_0$

IF $|y_n^{(h)}-y_n^{(h/2)}|\leqslant e$ THEN

WHILE $|y_n^{(h)}-y_n^{(h/2)}|\leqslant e$

$h=2\cdot h$ ENDWHILE

$h=h/2$

ELSE

WHILE $|y_n^{(h)}-y_n^{(h/2)}|>e$

$h=h/2$ ENDWHILE

$h=h$

ENIF

8.3　线性多步法

常微分方程初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=f(x,y), \\ y(a)=y_0,\end{cases}\quad a\leqslant x\leqslant b$$

与积分 $y(x)=y(x^*)+\displaystyle\int_{x^*}^{x}y'(t)\mathrm{d}t$ 等价, 在 8.1.3 节中用数值积分公式建立了 Euler 和梯形等数值方法, 下面给出一些更一般的用数值积分工具求解常微分方程初值问题的方法. 当积分节点中包含 x_{n+1} 时称为隐式公式, 否则称为显式公式. 分别取 x^* 为剖分点 x_{n+1},x_{n-p}, 有

$$y(x_{n+1})=y(x_{n-p})+\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}}y'(x)\mathrm{d}x$$

若用积分节点 $x_n,x_{n-1},\cdots,x_{n-q}$ 构造插值多项式近似 $y'(x)$, 在区间 $[x_{n-p},x_{n+1}]$ 计算数值积分 $\displaystyle\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}}y'(x)\mathrm{d}x$, 则称构造计算 y_{n+1} 的方法为线性多步法. 这是显