第六章：常微分方程

(2)：Runge-Kutta (RK)

目录

背景

之前基于欧拉格式和其改造的方法仅具有一阶，或者两阶收敛。

目标： 设计更加高阶的格式（主要侧重于 Runge-Kutta)

- 了解 Runge-Kutta 的构造形式
- 能对 Runge-Kutta 算法验证局部截断误差、以及分析稳定性区间

- 能将涉及高阶导数的方程变成常微分方程组
- 并掌握如何使用欧拉法、RK 法来数值求解常微分方程组

思路 1：泰勒展开

考虑泰勒展开：

$$y\left(x_{k+1}\right)=y\left(x_k\right)+y'\left(x_k\right)h+\frac{y''\left(x_k\right)}{2}h^2+\cdots+\frac{y^{(p)}\left(x_k\right)}{p!}h^p+\mathcal{O}\left(h^{p+1}\right)$$

其中，

$$\begin{aligned}
y'(x)&=f\left(x,y(x)\right)=:g_1\left(x,y(x)\right)\\
y''(x)&=\partial_x f\left(x,y(x)\right)+\partial_y f\left(x,y(x)\right)f\left(x,y(x)\right)=:g_2\left(x,y(x)\right)\\
y'''(x)&=\partial_{xx}f\left(x,y(x)\right)+2\partial_{xy}f\left(x,y(x)\right)f\left(x,y(x)\right)+\partial_{yy}f\left(x,y(x)\right)\Big(f\left(x,y(x)\right)\Big)^2\\
&\quad+\partial_y f\left(x,y(x)\right)\partial_x f\left(x,y(x)\right)+\Big(\partial_y f\left(x,y(x)\right)\Big)^2 f\left(x,y(x)\right)=:g_3\left(x,y(x)\right)
\end{aligned}$$

$y^{(p)}$ $(p\geq 3)$ 涉及比较复杂的 f 的高阶导数的组合。

由于真实的解满足

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \sum_{k=1}^{p} \frac{g_k\left(x_k, y(x_k)\right)}{k!} h^k + \mathcal{O}\left(h^{p+1}\right)$$

我们可以构造一个 p 阶精度的格式:

$$y_{k+1} = y_k + \sum_{k=1}^{p} \frac{g_k\left(x_k, y_k\right)}{k!} h^k$$

该方法的问题是：由于 g_k 在 $k \geq 3$ 时一般而言比较复杂，我们希望找到一个更简洁的方法，即不去提前求 f 的高阶导数。

目录

思路 2：不同的斜率做线性组合

我们考虑局部截断误差；假设 $y(x_k) = y_k$，

$$\begin{aligned} y(x_{k+1}) - y(x_k) &= \int_{x_k}^{x_{k+1}} y'(x)\,\mathrm{d}x \\ &\approx h\Big(\lambda_1 y'(x_k) + \lambda_2 y'(x_k + \alpha h)\Big) \\ &\overset{\text{改个符号}}{=} h\Big(\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2\Big) \end{aligned}$$

其中，$\lambda_1, \lambda_2, \alpha$ 为待定系数；$K_1 = f(x_k, y_k)$，

$$K_2 = f\big(x_k + \alpha h, y(x_k + \alpha h)\big) \approx f\big(x_k + \alpha h, y_k + \alpha h K_1\big)$$

至此，我们猜测是否可以构造格式：

$$
\begin{aligned}
y_{k+1} &= y_k + h\Big(\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2\Big) \\
K_1 &= f(x_k, y_k) \\
K_2 &= f(x_k + \alpha h, y_k + \alpha h K_1)
\end{aligned}
$$

我们自然希望该格式的局部截断误差的精度足够高（过程类似求积公式中希望代数精度足够高）。

我们对真解做泰勒展开：

$$y(x_{k+1}) = y_k + hf(x_k, y_k) + \frac{h^2}{2}\Big(\partial_x f(x_k, y_k) + \partial_y f(x_k, y_k) f(x_k, y_k)\Big) + \mathcal{O}\big(h^3\big)$$

我们对 K_2 做泰勒展开：

$$K_2 = f(x_k, y_k) + \partial_x f(x_k, y_k)\alpha h + \partial_y f(x_k, y_k)\alpha h f(x_k, y_k) + \mathcal{O}\big(h^2\big)$$

因此，

$$\begin{aligned} y_{k+1} = y_k &+ h\lambda_1 f(x_k, y_k) \\ &+ h\lambda_2\Big(f(x_k, y_k) + \partial_x f(x_k, y_k)\alpha h + \partial_y f(x_k, y_k)\alpha h f(x_k, y_k) + \mathcal{O}\big(h^2\big)\Big) \\ = y_k &+ h(\lambda_1 + \lambda_2) f(x_k, y_k) + \alpha\lambda_2 h^2 \partial_x f(x_k, y_k) + \alpha\lambda_2 h^2 \partial_y f(x_k, y_k) f(x_k, y_k) + \mathcal{O}\big(h^3\big) \end{aligned}$$

通过对比，我们需要

$$\lambda_1 + \lambda_2 = 1, \qquad \alpha\ \lambda_2 = \frac{1}{2}$$

二阶 Runge-Kutta 格式

$$
\begin{aligned}
y_{k+1} &= y_k + h\Big(\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2\Big) \\
K_1 &= f(x_k, y_k) \\
K_2 &= f(x_k + \alpha h, y_k + \alpha h K_1)
\end{aligned}
$$

其中

$$
\lambda_1 + \lambda_2 = 1, \qquad \alpha\ \lambda_2 = \frac{1}{2}
$$

选择 1： $\alpha = 1,\ \lambda_1 = \lambda_2 = \frac{1}{2}$

该格式其实就是**改进的 Euler 格式**

选择 2： $\alpha = 1/2,\ \lambda_2 = 1,\ \lambda_1 = 0$

（有点类似积分中的矩形格式，有时被称为**变形的 Euler 格式**）

练习： 对任意的二阶显式 Runge-Kutta，给出稳定性区间。

目录

三阶 Runge-Kutta

$$
\begin{aligned}
y_{k+1} &= y_k + h\Big(\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2 + \lambda_3 K_3\Big) \\
K_1 &= f(x_k, y_k) \\
K_2 &= f(x_k + \alpha h, y_k + \alpha h K_1) \\
K_3 &= f\Big(x_k + \beta h, y_k + \beta h(r K_1 + s K_2)\Big)
\end{aligned}
$$

通过选择待定系数 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \alpha, \beta, r, s$ 使得局部截断误差越小越好。计算可得

$$
\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 1 \qquad \alpha^2\lambda_2 + \beta^2\lambda_3 = \frac{1}{3} \qquad r + s = 1
$$

$$
\alpha\lambda_2 + \beta\lambda_3 = \frac{1}{2} \qquad \lambda_3\alpha\beta s = \frac{1}{6}
$$

取 $\lambda_1 = \frac{1}{6}$, $\lambda_2 = \frac{4}{6}$, $\lambda_3 = \frac{1}{6}$, $\alpha = 1/2$, $\beta = 1$, $r = -1$, $s = 2$

我们可得如下具体的格式

$$
\begin{aligned}
y_{k+1} &= y_k + h\left(\frac{1}{6}K_1 + \frac{4}{6}K_2 + \frac{1}{6}K_3\right)\\
K_1 &= f(x_k, y_k)\\
K_2 &= f(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{2}hK_1)\\
K_3 &= f\left(x_k + h, y_k - hK_1 + 2hK_2\right)
\end{aligned}
$$

四阶 Runge-Kutta 格式：请自行看课本 5.3.5

一般的显式 Runge-Kutta 格式

更一般地，我们可以考虑如下的格式:

$$y_{k+1} = y_k + h\sum_{i=1}^{M} \lambda_i K_i$$

$$K_i = f\left(x_k + c_i h, y_k + h\sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} K_j\right)$$

Butcher Tableau： （不要求）

$$\begin{array}{c|ccccc}
0 & & & & & \\
c_2 & a_{21} & & & & \\
c_3 & a_{31} & a_{32} & & & \\
\vdots & & & & & \\
c_M & a_{M,1} & a_{M,2} & \cdots & a_{M,M-1} & \\
\hline
 & \lambda_1 & \lambda_2 & \cdots & \lambda_{M-1} & \lambda_M
\end{array}$$

目录

实际问题往往需要引入多个变量

例如对 $\ddot{q}(x) = -V'\big(q(x)\big)$，$q(0) = q_0$, $q'(0) = p_0$，我们可以改写成

$$\begin{aligned}\dot{q}(x) &= p(x)\\ \dot{p}(x) &= -V'\big(q(x)\big)\end{aligned}$$

我们可以再写成 $\boldsymbol{y}(x) = \begin{bmatrix} q(x) \\ p(x) \end{bmatrix}$,

$$\dot{\boldsymbol{y}}(x) = \begin{bmatrix} p(x) \\ -V'(q(x)) \end{bmatrix} = \boldsymbol{f}\big(x, \boldsymbol{y}\big) \qquad \boldsymbol{y}(0) = \begin{bmatrix} q_0 \\ p_0 \end{bmatrix}$$

此时，函数 $\boldsymbol{f}$ 具有输入 $x \in \mathbb{R}$, $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^2$, 以及输出 $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) \in \mathbb{R}^2$

练习： 考虑问题 $\frac{\mathrm{d}^4 q(x)}{\mathrm{d}x^4} = g\big(x, q(x)\big)$，请把该涉及高阶导数的方程改写成常微分方程组。

一般情景

$$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ y^{(2)} \\ \vdots \\ y^{(d)} \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) = \begin{bmatrix} f_1(x, \boldsymbol{y}) \\ f_2(x, \boldsymbol{y}) \\ \vdots \\ f_d(x, \boldsymbol{y}) \end{bmatrix}$$

我们需要解微分方程组:

$$\dot{\boldsymbol{y}}(x) = \boldsymbol{f}\left(x, \boldsymbol{y}\right)$$

欧拉格式 $y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k)$ 变成 $\boldsymbol{y}_{k+1} = \boldsymbol{y}_k + h\boldsymbol{f}(x_k, \boldsymbol{y}_k)$ 即可。

二阶 Runge-Kutta

$$
\begin{aligned}
y_{k+1} &= y_k + h\Big(\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2\Big) \\
K_1 &= f(x_k, y_k) \\
K_2 &= f(x_k + \alpha h, y_k + \alpha h K_1)
\end{aligned}
$$

对于方程组变成了

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{y}_{k+1} &= \boldsymbol{y}_k + h\Big(\lambda_1 \boldsymbol{K}_1 + \lambda_2 \boldsymbol{K}_2\Big) \\
\boldsymbol{K}_1 &= \boldsymbol{f}(x_k, \boldsymbol{y}_k) \\
\boldsymbol{K}_2 &= \boldsymbol{f}(x_k + \alpha h, \boldsymbol{y}_k + \alpha h \boldsymbol{K}_1)
\end{aligned}
$$

目录

总结

- 了解 Runge-Kutta 的构造形式
- 能对 Runge-Kutta 算法验证局部截断误差，以及分析稳定性区间
- 能将涉及高阶导数的方程变成常微分方程组
- 并掌握如何使用欧拉格式、RK 格式等方法来数值求解常微分方程组