

高阶显式指数龙格-库塔方法

邓翠艳 戴兆辉 姜珊珊*
(北京化工大学理学院, 北京 100029)

摘要: 针对带有震荡性的常微分方程初值问题的数值解, 构造了新型的显式三级三阶指数龙格-库塔方法, 分析了其误差及稳定性, 并应用于数值试验。结果表明指数龙格-库塔方法比经典龙格-库塔方法误差更小, 稳定性更好, 更易实现, 并适于实际应用。

关键词: 指数龙格-库塔方法; 三级三阶显式指数龙格-库塔公式; 误差分析; 稳定性

中图分类号: O241.81

引言

具有震荡特征的一阶常微分方程的数值求解问题, 如单摆问题、波传播问题等一直都是研究的热点。而对于此类问题, 经典的求解方法如欧拉法, 龙格-库塔方法, 线性多步法等^[1]在误差稳定性方面效果不尽人意。因而科研工作者一直都致力于对已有的数值方法进行改进。Gautschi^[2]较早地提出了利用已知频率发展新型线性多步法的理论。在此基础上, Vanden Berghe 等^[3-4]将指数方法应用到显式龙格-库塔方法, 进一步又将指数方法推广到整个龙格-库塔方法体系中。这种指数的龙格-库塔方法根据选取参数的不同, 可以构造出不同的格式。选取恰当的参数, 可使得求解误差更小、精度更高。本文在此类指数的龙格-库塔方法理论的基础上, 构造高阶显式三级三阶库塔格式, 选取一定的参数构造格式, 分析误差及稳定性, 并与经典的龙格-库塔方法、同级的不同参数的库塔方法^[4]进行比较, 最后应用于数值试验。

1 构造指数龙格-库塔格式

1.1 创建模型

针对一阶常微分方程

$$y' = f(x, y), y(x_0) = y_0 \quad (1)$$

引入指数龙格-库塔方法, 如式(2)所示

$$\begin{aligned} Y_i &= \gamma_i y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} f(x_n + c_i h, Y_j) \quad i = 1, 2, \dots, s \\ y' &= f(x, y), y(x_0) = y_0 \\ y_{n+1} &= y_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(x_n + c_i h, Y_i) \end{aligned} \quad (2)$$

或者写成 Butcher 表的形式,

c_1	γ_1			
c_2	γ_2	a_{21}		
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	
c_s	γ_s	a_{s1}	a_{s2}	a_{ss-1}
		b_1	b_2	b_s

经典的龙格-库塔方法, Butcher 表中参数均为常数, 且并不考虑 $\gamma_i (i = 1, 2, \dots, s)$ 的存在。为了确定指数龙格-库塔方法的各个参数, 首先引入线性泛函

$$\begin{aligned} L_i(y(x), h, A) &= y(x + c_i h) - \gamma_i y(x) - h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \\ y'(x_n + c_j h) \quad i &= 1, 2, \dots, s \\ L(y(x), h, b) &= y(x + h) - y(x) - h \sum_{i=1}^s b_i y'(x_n + c_i h) \end{aligned} \quad (3)$$

使得式(3)线性泛函对于基 $\{\exp(\omega x), \exp(-\omega x)\}$ 精确成立而非经典基 $\{1, x\}$, 其中 $\omega = i\lambda$ 。这里考虑三级库塔方法, 从而选取节点为

$$c_1 = 0, \quad c_2 = \frac{1}{2}, \quad c_3 = 1$$

等式转化为

$$1 = \gamma_1 \quad (4)$$

$$e^{\pm \frac{1}{2} v'} = \gamma_2 \pm v' a_{21} \quad (5)$$

$$e^{\pm v'} = 1 \pm v' [b_1 + b_2 e^{\pm \frac{v'}{2}} + b_3 e^{\pm v'}] \quad (6)$$

收稿日期: 2012-12-05

基金项目: 国家自然科学基金(110010009)

第一作者: 女, 1984年生, 硕士生

* 通讯联系人

E-mail: jiangss@mail.buct.edu.cn

$$e^{\pm v'} = \gamma_3 \pm v' [a_{31} + a_{32} e^{\pm \frac{v'}{2}}] \quad (7)$$

其中 $v' = \omega h$, 计算结果, 得到 $v = \lambda h$ 。

另外根据代数阶条件设 $b_1 + b_2 + b_3 = 1$, 得到

$$b_2 = \frac{2 \sin \frac{v}{2} - v \cos \frac{v}{2}}{v \left(1 - \cos \frac{v}{2}\right)}, \quad b_1 = b_3 = \frac{\frac{1}{2}v - \sin \frac{v}{2}}{v \left(1 - \cos \frac{v}{2}\right)}$$

令 $a_{31} = -1$, 由式(5)、(7)可得

$$a_{21} = \frac{\sin \frac{v}{2}}{v}$$

$$a_{32} = \frac{\sin v + v}{v \cos \frac{v}{2}}$$

$$\gamma_2 = \cos \frac{v}{2}$$

$$\gamma_3 = 1 + v \tan \frac{v}{2}$$

得到格式 I, 写成 Butcher 表格的形式为

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & 1 \\ \hline 1/2 & & \cos \frac{v}{2} & \frac{\sin \frac{v}{2}}{v} \\ 1 & 1 + v \tan \frac{v}{2} & -1 & \frac{\sin v + v}{v \cos \frac{v}{2}} \\ \hline & & b_1 & b_2 & b_3 \end{array}$$

$$b_2 = \frac{2 \sin \frac{v}{2} - v \cos \frac{v}{2}}{v \left(1 - \cos \frac{v}{2}\right)}, \quad b_1 = b_3 = \frac{\frac{1}{2}v - \sin \frac{v}{2}}{v \left(1 - \cos \frac{v}{2}\right)}$$

把所得系数进行泰勒展开, 得到

$$\left\{ \begin{array}{l} b_2 = \frac{2}{3} - \frac{1}{360}v^2 - \frac{1}{40320}v^4 - \frac{1}{4838400}v^6 + \dots \\ b_1 = b_3 = \frac{1}{6} + \frac{1}{720}v^2 + \frac{1}{80640}v^4 + \dots \\ a_{21} = \frac{1}{2} - \frac{1}{48}v^2 + \frac{1}{3840}v^4 - \frac{1}{645120}v^6 + \dots \\ a_{32} = 2 + \frac{1}{12}v^2 + \frac{13}{960}v^4 - \frac{71}{53760}v^6 + \dots \\ \gamma_2 = 1 - \frac{1}{8}v^2 + \frac{1}{384}v^4 - \frac{1}{46080}v^6 + \dots \\ \gamma_3 = 1 + \frac{1}{2}v^2 + \frac{1}{24}v^4 - \frac{1}{240}v^6 + \dots \end{array} \right. \quad (8)$$

由此可见, 当 $v \rightarrow 0$ 时, 该方法退化为经典的龙格-库塔方法中的库塔方法

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

并且具有三阶代数精度。

通过泰勒展开公式还可验证以下代数阶条件

$$\sum b_i = 1$$

$$\sum b_i a_{ij} = \frac{1}{2} + \frac{1}{384}v^4 + \dots$$

$$\sum b_i c_i = \frac{1}{2}$$

$$\sum b_i c_i^2 = \frac{1}{3} + \frac{1}{1440}v^2 + \frac{1}{161280}v^4 + \dots$$

$$\sum b_i c_i^3 = \frac{1}{4} + \frac{1}{960}v^2 + \frac{1}{107520}v^4 + \dots$$

$$b_3 a_{21} a_{32} = \frac{1}{6} + \frac{1}{720}v^2 + \frac{227}{24192}v^4 + \dots$$

$$b_3 a_{21}^2 a_{32} = \frac{1}{12} - \frac{1}{360}v^2 + \frac{13}{26880}v^4 + \dots$$

$$\sum b_i \gamma_i = 1 + \frac{7}{720}v^4 + \dots$$

$$\sum \sum b_i a_{ij} \gamma_j = \frac{1}{2} - \frac{1}{24}v^2 + \frac{1}{720}v^4 + \dots$$

$$\sum \sum b_i c_i (\gamma_i - 1) = \frac{1}{24}v^2 + \frac{5}{576}v^4 + \dots$$

$$\sum \sum b_i c_i (\gamma_i - 1)^2 = \frac{3}{128}v^4 + \dots$$

$$\sum b_i c_i^2 (\gamma_i - 1) = \frac{1}{32}v^2 - \frac{47}{11520}v^4 + \dots$$

$$\sum \sum b_i c_i (\gamma_i - 1) a_{ij} = \frac{1}{16}v^2 + \frac{23}{1440}v^4 + \dots$$

.....

1.2 分析误差

由三级龙格-库塔格式的一般表达式

$$Y_2 = \gamma_2 y_n + h a_{21} f(x_n, y_n)$$

$$Y_3 = \gamma_3 y_n + h a_{31} f(x_n, y_n) + h a_{32} f(x_n + c_2 h, Y_2)$$

可以得到表达式

$$y_{n+1} = y_n + h b_1 f(x_n, y_n) + h b_2 f(x_n + c_2 h, Y_2) + h b_3 f(x_n + c_3 h, Y_3)$$

在不引起混淆的情况下将 $f(x_n, y_n)$ 可简写成 f 。令 $D = f(x_n + c_2 h, Y_2)$, 简化表达式为

$$y_{n+1} = y_n + h b_1 f + h b_2 D + h b_3 f(x_n + c_3 h, \gamma_3 y_n + h a_{31} f + h a_{32} D)$$

将含 D 的项进一步进行多元泰勒展开并整理, 又可得到

$$\begin{aligned} y_{n+1} = & y_n + hf + \frac{1}{2}h^2f_x + \frac{1}{2}h^2ff_y + \frac{1}{6}h^3f_{xx}f_y + \frac{1}{6} \\ & h^3ff_y^2 + \frac{1}{6}h^3f_{xx} + \frac{1}{3}h^3ff_{xy} + \frac{1}{6}h^3f^2f_{yy} + \frac{1}{24}h^4f^2f_{yy}f_y + \frac{1}{24} \\ & h^4f_{xx}f_y + \frac{1}{12}h^4ff_{xy}f_y + \frac{1}{6}h^4f_{xx}f_{xy} + \frac{1}{6}h^4ff_{xy}f_y + \frac{1}{12}h^4ff_{xy}f_y + \\ & \frac{1}{6}h^4f_{xx}f_{xy} + \frac{1}{6}h^4ff_{xy}f_y + \frac{1}{24}h^4f_{xxx} + \frac{1}{8}h^4f^2f_{xyy} + \frac{1}{6}h^3f^2f_{yy} + \\ & \frac{1}{24}h^4f^3f_{yyy} + \frac{1}{8}h^4ff_{xyy} + \frac{1}{12}h^4ff_{xyy} - \frac{1}{6}h^4f^2f_{xyy} + \frac{1}{24} \\ & h^2v^2y_nff_{yy} - \frac{1}{24}h^2v^2y_nf_{xyy} - \frac{1}{24}h^2v^2y_nf_y^2 + \frac{1}{24}h^2v^2y_nf_{xy} + \\ & O(h^5) \end{aligned} \quad (9)$$

另一方面, 方程的精确解具有泰勒展开形式, 如式(10)所示

$$\begin{aligned} y(t_n + h) = & y_n + hy' + \frac{h^2}{2!}y^{(2)} + \frac{h^3}{3!}y^{(3)} + \frac{h^4}{4!}y^{(4)} + \\ & O(h^5) = y_n + hy' + \frac{h^2}{2}f_x + \frac{h^2}{2}ff_y + \frac{h^3}{6}f_{xx} + \frac{h^3}{3}ff_{xy} + \frac{h^3}{6}f^2 \\ & f_{yy} + \frac{h^3}{6}f_{xx}f_y + \frac{h^3}{6}ff_y^2 + \frac{h^4}{24}f_{xxx} + \frac{h^4}{8}ff_{xyy} + \frac{h^4}{8}f^2f_{xyy} + \frac{h^4}{8}f_{xx}f_{xy} + \\ & \frac{5}{24}h^4ff_{xy}f_y + \frac{h^4}{24}f^3f_{yyy} + \frac{h^4}{8}ff_{xyy} + \frac{h^4}{6}f^2f_{xyy} + \frac{h^4}{24}f_{xx}f_{xy} + \frac{h^4}{24} \\ & f_{xx}f_y^2 + \frac{h^4}{24}ff_y^3 + O(h^5) \end{aligned} \quad (10)$$

式(10)减式(9)得

$$\begin{aligned} y(t_n + h) - y_{n+1} = & -\frac{1}{24}h^4(f_{xx}f_{xy} + ff_{xy}f_y + ff_{xy}f_y) - \\ & \frac{1}{24}h^4(-7f^2f_{xyy} - f_{xx}f_y^2 - ff_y^3) - \frac{1}{24}h^4\lambda^2(f_{xy} + ff_{yy} - f_{xx}f_{yy} - \\ & f_y^2)y_n + O(h^5) \end{aligned}$$

对照文献[5]中的误差分析方法, 从而得到定理1、2。

定理1 三级指数龙格-库塔格式 I 具有三阶代数精度, 且具有局部截断误差

$$\begin{aligned} L_{\text{EFRK}} = & -\frac{1}{24}h^4(f_{xx}f_{xy} + ff_{xy}f_y + ff_{xy}f_y) - \frac{1}{24}h^4 \\ & (-7f^2f_{xyy} - f_{xx}f_y^2 - ff_y^3) - \frac{1}{24}h^4\lambda^2(f_{xy} + ff_{yy} - f_{xx}f_{yy} - \\ & f_y^2)y_n + O(h^5) \end{aligned}$$

其中, 当函数 $y = \cos \lambda x$ 或者 $y = \sin \lambda x$ 时, 局部截断误差的首项就退化为零。

同理, 也可以设格式中 $a_{32} = 2$, 从而得到另一个类似的格式 II

0	1	
1/2	$\cos \frac{v}{2}$	$\frac{\sin \frac{v}{2}}{v}$
1	$\cos v + 2v \sin \frac{v}{2}$	$\frac{\sin v}{v} - 2 \cos \frac{v}{2}$
		$b_1 \quad b_2 \quad b_3$
	$b_2 = \frac{2 \sin \frac{v}{2} - v \cos \frac{v}{2}}{v(1 - \cos \frac{v}{2})}$	$b_1 = b_3 = \frac{\frac{1}{2}v - \sin \frac{v}{2}}{v(1 - \cos \frac{v}{2})}$

同样可以得到类似结论。

定理2 三级指数龙格-库塔格式 II 具有三阶代数精度, 且具有局部截断误差

$$\begin{aligned} L_{\text{EFRK}} = & -\frac{1}{24}h^4(f_{xx}f_{xy} + ff_{xy}f_y + ff_{xy}f_y) - \frac{1}{24}h^4 \\ & (-f_{xx}f_y^2 - ff_{xyy} - ff_y^3) - \frac{1}{24}h^4(-f_{xx}f_y^2 - ff_{xyy} - ff_y^3) - \\ & \frac{1}{24}h^4\left(-\frac{3}{2}f^2f_{xyy} - \frac{3}{2}f^2f_{yy}\right) - \frac{1}{24}h^4\lambda^2(f_{xy} - f_{xx}f_{yy} - \\ & f_y^2)y_n + O(h^5) \end{aligned}$$

如果在假设格式时不仅仅考虑已有的4个方程, 但也不另外设定参数, 则得到带有两个自由参数的格式的一般形式

0	1	
1/2	$\cos \frac{v}{2}$	$\frac{\sin \frac{v}{2}}{v}$
1	$\cos v + a_{32}v \sin \frac{v}{2}$	$\frac{\sin v}{v} - a_{32} \cos \frac{v}{2}$
		$b_1 \quad b_2 \quad b_3$
	$b_2 = \frac{2 \sin \frac{v}{2}}{v} - 2b_3 \cos \frac{v}{2}$	$b_1 = b_3$

显而易见, 一般格式包含格式 I 和格式 II, 而选取不同的参数, 就可以得到此类中任意的三级指数格式。

1.3 λ 的选取

新构造的函数类, 均带有自由参数, 格式也随着参数的选择不同而不同, 但并没有系统的数学理论精确地讨论过 λ 的取值。目前仅有的目标就是通过一种算法使计算误差尽可能的小。因此, 在误差计算表达式中, 使局部截断误差的首项等于零, 即 $L=0$ 来计算 λ 在每个 $[x_n, x_{n+1}]$ 上的值^[6]。

如果 $y(x_n)$ 是 $\sin \alpha x$ 与 $\cos \alpha x$ 的线性组合且 y

$(x_n) \neq 0$, 则从上面的方法中得到 $\lambda = \alpha$ 且 $y(x_n)$ 也是线性的。

1.4 稳定性分析

考虑一阶微分方程数值方法的线性稳定性, 一般将格式应用到模型方程

$$y' = \mu y, \operatorname{Re}(\mu) < 0$$

得到一般形式

$$y_{n+1} = y_n + hb_1f(x_n, y_n) + hb_2f(x_n + c_2h, Y_2) + hb_3f(x_n + c_3h, Y_3) = y_n + b_1zy_n + b_2zY_2 + b_3zY_3 = (1 + b_1z + b_2\gamma_2z + b_3\gamma_3z)y_n + (b_2a_{21}z^2 + b_3a_{31}z^2 + b_3a_{32}\gamma_2z^2 + b_3a_{21}a_{32}z^3)y_n$$

要是方法达到绝对稳定, 就必须有如下条件成立

$$\left| 1 + \left(\sum_{i=1}^3 b_i \gamma_i \right) z + \left(\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^{i-1} b_i a_{ij} \gamma_j \right) z^2 + (b_3 a_{21} a_{32}) z^3 \right| \leq 1$$

带入格式 I 的参数数值, 得到

$$\left| 1 + z + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{24}v^2 \right) z^2 + \left(\frac{1}{6} + \frac{1}{720}v^2 \right) z^3 \right| \leq 1$$

带入格式 II 的参数数值, 得到

$$\left| 1 + z + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{24}v^2 \right) z^2 + \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{180}v^2 \right) z^3 \right| \leq 1$$

当 $v \rightarrow 0$ 时, 即两个格式退化为经典库塔方法的稳定性条件

$$\left| 1 + z + \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{6}z^3 \right| \leq 1$$

图像如图 1 所示。

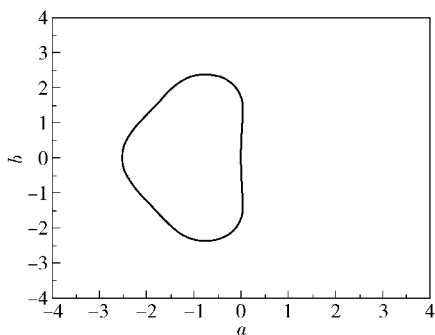


图 1 稳定分布图

Fig. 1 Stable distribution diagram

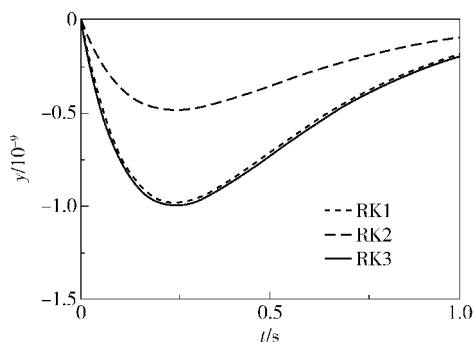
2 数值试验

$$(1) y' = -4y \quad y(0) = 1, 0 \leq x \leq 1, \lambda_0 = 0.5$$

真实解为 $y(x) = \exp(-4x)$ 。

分别用经典的 RK 方法, 指数的 RK 方法, 文献 [4] 中指数的 RK 方法求解方程, 可以得出本文构造

的方法 RK2 最好, 误差最小的结论。误差图如图 2 所示。



RK1—经典的 RK 方法; RK2—指数 RK 方法;

RK3—文献[4]中 RK 方法

图 2 数值试验各方法的误差结果

Fig. 2 The result of numerical experiments

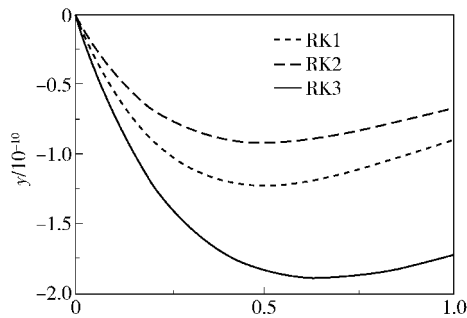
$$(2) y'_1 = -y_1 + y_2, y_1(0) = 3,$$

$$y'_2 = y_1 - y_2, y_2(0) = 1 \quad 0 \leq x \leq 1$$

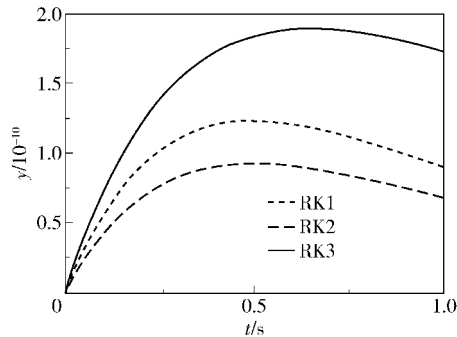
真实解为

$$y_1(x) = 2 + \exp(-2x), y_2(x) = 2 - \exp(-2x)$$

用经典的 RK 方法, 指数的 RK 方法, 文献 [4] 中指数的 RK 方法求解方程组, 得到的误差图如图 3



(a) $\lambda=1$



(b) $\lambda=-1$

RK1—经典的 RK 方法; RK2—指数 RK 方法;

RK3—文献[4]中 RK 方法

图 3 数值试验各方法的误差结果

Fig. 3 The result of numerical experiments

所示,可以看出本文构造的方法 RK2 误差相对较小,精度更高。

参考文献:

- [1] 余德浩, 汤华中. 微分方程数值解[M]. 北京: 科学出版社, 2003.
Yu D H, Tang H Z. The numerical solution for differential equation[M]. Beijing: Science Press, 2003. (in Chinese)
- [2] Gautschi W. Numerical integration of ordinary differential equations based on trigonometric polynomials[J]. Numerische Mathematik, 1961, 11(3): 381-397.
- [3] Vanden Berghe G, De Meyer H, Van Daele M, et al. Exponentially-fitted explicit Runge-Kutta methods[J]. Computer Physics Communication, 1999, 123(2): 7-15.
- [4] Vanden Berghe G, De Meyer H, Van Daele M, et al. Exponentially fitted Runge-Kutta methods[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2000, 125(1): 107-115.
- [5] Anderson D F, Ganguly A, Kurtz T G. Error analysis of tau-leap simulation methods[J]. Annals of Applied Probability, 2011, 21(6): 2226-2262.
- [6] Ma Y P, Kong L H, Hong J L, et al. High-order compact splitting multisymplectic method for the coupled nonlinear Schrödinger equations[J]. Computers and Mathematics with Application, 2011, 61(2): 319-333.

High-order explicit exponentially fitted explicit Runge-Kutta methods

DENG CuiYan DAI ZhaoHui JIANG ShanShan

(School of Science, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: For systems of first-order differential equations where the problems exhibit a pronounced oscillatory character, we create new exponentially fitted explicit Runge-Kutta methods and analysis their errors and stability. The numerical experiments show that exponentially fitted Runge-Kutta methods have much smaller errors and better stability than classical Runge-Kutta methods, and should have many future applications.

Key words: exponentially fitted explicit Runge-Kutta method; the three-order explicit Runge-Kutta method; error analysis; stability