Runge-Kutta 的有根树理论

Runge-Kutta 方法的阶条件可以通过将微分方程的解析解和数值解分别通过 Taylor 展开然后进行对比而获得。有根树理论可以用来简化 Taylor 展开式，因此对于 Runge-Kutta 方法阶条件的确定是十分有用的。[1]

对初值问题

$$\frac{dy}{dt} = f(t,y)\ ,$$
$$f(t_0) = y_0,\ t \in [0,T]\ . \tag{1}$$

对于解析解，其方程解的 Taylor 展开式为

$$y_1 = y_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{h^k}{k!} y^{(k)}(t_0)\ , \tag{2}$$

我们可以看到

$$y'(t) = f(y(t)) = f\ , \tag{3}$$

$$y^{(2)}(t) = \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dt} = f'f\ , \tag{4}$$

$$y^{(3)}(t) = f''(f,f) + f'f'f\ , \tag{5}$$

$$y^{(4)}(t) = f'''(f,f,f) + 3f''(f,f'f) + f'f''(f,f) + f'f'f'f\ , \tag{6}$$

其中 $f'$ 和 $f''$ 分别为线性和非线性的。即有

$$(f'f)^i = f^i_j f^j = \frac{\partial f^i}{\partial y_j} f^j\ , \tag{7}$$

$$f''(f,f)^i = f^i_{jk} f^j f^k = \frac{\partial^2 f^i}{\partial y_j \partial y_k} f^j f^k\ , \tag{8}$$

由上面式子可以看出，当方程解 Taylor 展开阶数越高，展开式则越复杂，为了能够简化表达式，我们采用有根树理论。采用与有根树相关的系数的迭代表达式来表达对应的 Taylor 展开。

**定义 1.** 设 $T$ 为有根树的集合，$\tau$ 用来表示一个树，其他树可以在这个树上递归的构建，$t \in [t_1, t_2, ..., t_m]$ 表示将子树 $t_1, t_2, ..., t_m$ 直接连接到公共根而构成的树。即 $\tau$ 可以用来表示只有一个节点的树，$\phi$ 表示空树。用 $\rho(t)$ 表示树 $t$ 的节点，$\gamma(t)$ 表示树 $t$ 的密度，$\alpha(t)$ 表示树 $t$ 按照节点进行标号的方法数。

根据树的定义，我们可以将方程 (1) 采用树的相关参数进行表示。

**定义 2.** 对方程 (1)，有根树 $t=[t_1,t_2,...,t_m]$ 的基本微分递归定义为

$$\begin{cases} F(t)y & =f^{(m)}(F(t_1)y,F(t_2)y,...,F(t_m)y)\ , \\ F(\phi)y & =y\ , \end{cases} \tag{9}$$

在基本微分的定义下，我们有如下定理

**定理 1.** *我们可以将方程 (1) 做简化，有 [2]*

$$y_1(t_0+h)=y_0+\sum_{t\in T}\frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}\alpha(t)F(t)(y_0)\ , \tag{10}$$

*其中 $\rho(t)$，$\gamma(t)$，$\alpha(t)$ 分别递归的表示为*

$$\rho(\tau)=1,\rho([t_1,t_2,...,t_m])=1+\sum_{j=1}^{m}\rho(t_j)\ , \tag{11}$$

$$\gamma(\tau)=1,\gamma([t_1,t_2,...,t_m])=\rho([t_1,t_2,...,t_m])\prod_{j=1}^{m}\gamma(t_j)\ , \tag{12}$$

$$\alpha(t)=\frac{\rho(t)!}{\gamma(t)\sigma(t)}\ . \tag{13}$$

*其中 $\sigma(t)$ 表示树的对称性，可以递归的表示，有*

$$\sigma(\tau)=1,\ \sigma([t_1^{n_1},t_2^{n_2},...,t_m^{n_m}])=n_1!n_2!\cdots n_m!\prod_{j=1}^{m}\sigma(t_j)^{n_j}\ . \tag{14}$$

*则方程 (10) 为解析解的 Taylor 展开。*

方程 (1) 的 Runge-Kutta 方法的一般形式为

$$\begin{cases} y_{n+1} & =y_n+h\sum_{i=1}^{s}b_ik_i\ , \\ k_i & =f(x_n+c_ih,y_n+h\sum_{j=1}^{s}a_{ij}k_j)\ i=1,2,...,s\ , \\ c_i & =\sum_{j=1}^{s}a_{ij}\ , \end{cases} \tag{15}$$

采用 Butcher 点阵来展示方程 (15) 中的系数，即

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array}$$

该点阵可以表示为

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}$$

则方程 (15) 可以简写为

$$\begin{cases} Y_i & = y_n + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(Y_j),\ i=1,2,...,s \\ y_{n+1} & = y_n + h\sum_{j=1}^{s} b_j f(Y_j)\ , \end{cases} \tag{16}$$

针对 Butcher 表，定义树的基本权重：

**定义 3.** 方程 (16) 对有根树有如下权重：$\Phi(t) = b^T\Psi(t)$，其中 $\Psi(t)$ 可以递归的定义 [3, 4]

$$\Psi(\tau) = 1, \Psi([t_1, t_2, ..., t_m]) = (A\Psi(t_1)) * (A\Psi(t_2)) * \cdots * (A\Psi(t_m))\ , \tag{17}$$

在基本权重的定义下，方程 (16) 有如下定理

**定理 2.** *方程 (16) 可以简化为*

$$y(t_0 + h) = y_0 + \sum_{t\in T} \frac{\bar{\beta}(t)}{\rho(t)!} h^{\rho(t)} \Phi(t) F(t)(y_0)\ , \tag{18}$$

*其中 $\bar{\beta}(t)$ 表示树 $t$ 不按照特定顺序进行标号的方法数。*

$$\bar{\beta}(t) = \gamma(t)\alpha(t)\ , \tag{19}$$

通过比较解析解和数值解 Taylor 展开的表达式，可以看出，当且仅当 $\Phi(t) = \frac{1}{\gamma(t)}, \rho(t) \le p$ 时，Runge-Kutta 具有 $p$ 阶精度。

# 参考文献


[1] 立君庞. *求解随机微分方程的三级随机 Runge-Kutta 方法*. 硕士学位论文, 河海大学, 中国江苏南京, 2008.

[2] Pamela Marion Burrage. *Runge-Kutta Methods for Stochastic Differential Equations*. Doctor of Philosophy, The University of Queensland Brisbane, Queensland, Australia, 1999.

[3] J.C. Butcher. Initial value problems: numerical methods and mathematics. *Computers & Mathematics with Applications*, 28(10-12):1–16, 1994.

[4] J. C. Butcher. *Numerical methods for ordinary differential equations*. Wiley, Chichester, West Sussex, United Kingdom, third edition edition, 2016.