Алгебраический подход к методам Рунге-Кутта

Хашин Сергей Иванович
http://math.ivanovo.ac.ru/dalgebra/Khashin/index.html

ИвГУ, Иваново

Доклад на семинаре кафедры алгебры,
мех-мат, МГУ, 2013-02-18

Разработка методов РК

Разработка методов Рунге-Кутта (РК) сводится к решению системы полиномиальных уравнений, условий порядка или уравнений Бутчера.

Для методов 4-го порядка это 8 уравнений от 10 переменных, максимальная степень уравнений – 4.

Для 9-стадийных методов 7-го порядка это 85 уравнений от 45 переменных, максимальная степень уравнений – 7.

Для 17-стадийных методов 10-го порядка это 1205 уравнений от 136 переменных, максимальная степень уравнений – 10.

Начиная с порядка 6 общее решение этой системы до сих пор не найдено.

Заметного прогресса в этой области можно добиться изучая алгебраическую структуру уравнений Бутчера, явно выделяя общие алгебраические конструкции.

Что такое методы РК

Пусть дано ОДУ $y' = f(t, y)$, $t \in \mathbb{R}$, $y \in \mathbb{R}^n$ и начальное условие $y(t_0) = y_0$. Выбираем некоторый малый шаг h и находим вектор $y_1 = y(t_1) = y(t_0 + h)$ по формулам (правило «3/8»):

$$y_1 = y_0 + (k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4)/8$$

где

$$\begin{aligned}
k_1 &= hf(t_0 &&, y_0)\,, \\
k_2 &= hf(t_0 + \tfrac{1}{3}h &&, y_0 + \tfrac{1}{3}k_1)\,, \\
k_3 &= hf(t_0 + \tfrac{2}{3}h &&, y_0 - \tfrac{1}{3}k_1 + k_2)\,, \\
k_4 &= hf(t_0 + h &&, y_0 + k_1 - k_2 + k_3)\,,
\end{aligned}$$

Классические методы имеют четвертый порядок и 4 стадии (`RK(4,4)`).

Таблица Бутчера

Все коэффициенты метода можно объединить в одну таблицу (таблица Бутчера):

$$\begin{array}{c|cccc} c_2 & a_{21} & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & \\ c_4 & a_{41} & a_{42} & a_{43} & \\ \hline & b_1 & b_2 & b_3 & b_4 \end{array}$$

при этом будут выполнены соотношения:

$$\begin{aligned} c_2 &= a_{21}\,, \\ c_3 &= a_{31} + a_{32}\,, \\ c_4 &= a_{41} + a_{42} + a_{43}\,, \\ 1 &= b_1 + b_2 + b_3 + b_4\,. \end{aligned}$$

Расширенная матрица метода

Оказывается очень удобно собрать все коэффициенты в нижнетреугольную квадратную матрицу с нулевой диагональю:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 & 0 & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & 0 & 0 \\ b_1 & b_2 & b_3 & b_4 & 0 \end{pmatrix},$$

при этом будем полагать:

$$\begin{aligned} a_{21} &= c_2\,, \\ a_{31} &= c_3 - a_{32}\,, \\ a_{41} &= c_4 - a_{42} - a_{43}\,, \\ b_1 &= 1 - b_2 - b_3 - b_4\,. \end{aligned}$$

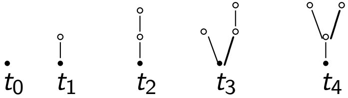
Условия порядка

Мы рассматриваем нижнетреугольную квадратную матрицу с действительными коэффициентами с нулевой диагональю. Ее коэффициенты должны удовлетворять некоторой системе уравнений, называемой условиями порядка или уравнениями Бутчера. Для методов `RK(4,4)` это:

$$
\begin{aligned}
b_1 + b_2 + b_3 + b_4 &= 1,\\
b_2 c_2 + b_3 c_3 + b_4 c_4 &= 1/2,\\
b_3 a_{32} c_2 + b_4 (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) &= 1/6,\\
b_2 {c_2}^2 + b_3 {c_3}^2 + b_4 {c_4}^2 &= 1/3,\\
b_4 a_{43} a_{32} c_2 &= 1/24,\\
b_3 c_3 a_{32} c_2 + b_4 c_4 (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) &= 1/8,\\
b_2 c_2^3 + b_3 c_3^3 + b_4 c_4^3 &= 1/4,\\
b_3 a_{32} c_2^2 + b_4 (a_{42} c_2^2 + a_{43} c_3^2) &= 1/12,
\end{aligned}
$$

Умножение деревьев, w, δ

Пусть t_0 – дерево с одной вершиной, $t_1 = \alpha t_0$ – две вершины и ребро, $t_2 = \alpha^2 t_0$, $t_3 = t_1 \cdot t_2$, $t_4 = \alpha(t_1 \cdot t_1)$. So



Определение. а) Для любого дерева t через $\rho(t)$ обозначим количество ребер («вес» дерева).
б) Через $\delta(t)$ обозначим произведение по всем вершинам a, кроме корня $(\rho(t_a) + 1)$.
$\rho(t)$ – аддитивная функция, а $\delta(t)$ – мультипликативная:

$$\rho(t_1 t_2) = \rho(t_1) + \rho(t_2)\,,$$

$$\delta(t_1 t_2) = \delta(t_1)\delta(t_2)\,.$$

Вектора

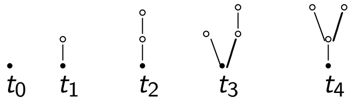
Рассмотрим пространство $\mathbb{R}^n$ с векторами-столбцами и пусть

$$e = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \; d = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Пусть $*$ – покоординатное умножение в $\mathbb{R}^n$:

$$(x_1, \ldots, x_n)^t * (y_1, \ldots, y_n)^t = (x_1 y_1, \ldots, x_n y_n)^t.$$

Оператор Φ



Определим вектора $\Phi_t(A) \in \mathbb{R}^n$ следующим образом ($e = (1, \ldots, 1)^t$):

$$
\begin{aligned}
\rho(t_0) &= 0, & \delta(t_0) &= 1, & \Phi_{t_0}(A) &= e,\\
\rho(t_1) &= 1, & \delta(t_1) &= 1, & \Phi_{t_1}(A) &= Ae,\\
\rho(t_2) &= 2, & \delta(t_2) &= 2, & \Phi_{t_2}(A) &= A^2 e,\\
\rho(t_3) &= 3, & \delta(t_3) &= 2, & \Phi_{t_3}(A) &= Ae{*}A^2 e,\\
\rho(t_4) &= 3, & \delta(t_4) &= 3, & \Phi_{t_4}(A) &= A(Ae{*}Ae)
\end{aligned}
$$

Условия порядка (уравнения Бутчера)

Последнюю координату вектора v будем задавать как скалярное произведение (v, d), где $d = (0, \ldots, 0, 1)^t$.
Теорема. Матрица A задает метод РК порядка $p \Leftrightarrow$

$$(d, \Phi_t(A)) = 1/\delta(t)$$

для всех деревьев веса $\leq p$.
Замечание. И правая, и левая части равенства мультипликативны относительно умножения деревьев. Поэтому условия порядка достаточно проверять только для «одноногих» деревьев, или даже для всех деревьев вида αt, где t – произвольное дерево веса $< p$.

Подпространства L_k

Для произвольной квадратной матрицы A размера $n \times n$ рассмотрим подпространства порожденные векторами $\Phi_t(A)$ для всех деревьев веса k:

$$L_k =< \Phi_t(A) | \rho(t) = k > \subset \mathbb{R}^n .$$

То есть

$$\begin{aligned} L_0 &=< e > , \\ L_1 &=< Ae > , \\ L_2 &=< A^2 e, \; Ae * Ae > , \\ L_3 &=< A^3 e, \; A(Ae * Ae), \; A^2 e * Ae, \; Ae * Ae * Ae > , \\ \ldots \end{aligned}$$

Пространства L_k можно определить и рекуррентным способом:

$$L_k = (Ae * L_{k-1}) + A(L_{k-1}) + \sum_{i+j=k} L_i * L_j .$$

Условия порядка в терминах L_k

Прежняя форма:

$$(d, \Phi_t(A)) = 1/\delta(t)$$

для всех деревьев веса $\leq p$.

Теорема. Матрица A задает метод РК порядка $p \Leftrightarrow$

$$(d, Av) = \frac{(d, v)}{k+1}$$

для всех $v \in L_k(A)$ и для $k = 0, \ldots p - 1$.

Отметим, что уравнения линейны по вектору v, то есть их достаточно проверить для векторов, порождающих пространство $L_k(A)$.

Подпространства M_k

Для данной матрицы A рассмотрим фильтрацию в $\mathbb{R}^n$: цепочку подпространств $0 \subset M_0 \subset M_1 \subset M_2 \ldots$:

$$\begin{aligned} M_0 &= L_0 \ , \\ M_1 &= L_0 + L_1 \ , \\ M_2 &= L_0 + L_1 + L_2 \ , \\ M_3 &= L_0 + L_1 + L_2 + L_3 \ , \\ \ldots \end{aligned}$$

Эта фильтрация совместима с умножением, то есть

$$M_i * M_j \subset M_{i+j}, \quad A(M_i) \subset M_{i+1} \ .$$

Алгебра $B(A)$

Определение. Присоединенную алгебру соответствующую фильтрации $0 \subset M_0 \subset M_1 \subset M_2 \ldots$:

$$B(A) = \bigoplus_{k=0}^{n} \underbrace{M_k / M_{k-1}}_{B_k(A)}$$

будем называть верхней алгеброй Бутчера матрицы A.
Таким образом мы получаем конечномерную ($\dim = \dim A = n$) ассоциативную коммутативную градуированную алгебру, на которой действует оператор A, повышающий степень на 1.

Свободная алгебра с оператором

Итак, $\mathbb{R}^n$ – кольцо с покоординатным умножением и оператором A. Мы получаем гомоморфизм из свободной $\mathbb{R}$-алгебры $\mathcal{R}$ с оператором A в кольцо $\mathbb{R}^n$.

$$\mathcal{R} \to \mathbb{R}^n$$

Алгебра $\mathcal{R}$ – градуирована, а кольцо $\mathbb{R}^n$ – нет. Переход к верхней алгебре Бутчера дает гомоморфизм градуированных алгебр:

$$\mathcal{R} \to B(A) = \bigoplus_{k=0}^{n} B_k(A)$$

Пример: “правило 3/8“

Рассмотрим матрицу

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1/3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1/8 & 3/8 & 3/8 & 1/8 & 0 \end{pmatrix}.$$

Получаем:

$$L_0 : \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad L_1 : \begin{pmatrix} 0 \\ 1/3 \\ 2/3 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad L_2 : \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1/9 \\ 1/3 & 4/9 \\ 1/3 & 1 \\ 1/2 & 1 \end{pmatrix},$$

Пример: “правило 3/8“

$$M_0 : \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad M_1 : \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1/3 \\ 1 & 2/3 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad M_2 : \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1/3 & 0 & 1/9 \\ 1 & 2/3 & 1/3 & 4/9 \\ 1 & 1 & 1/3 & 1 \\ 1 & 1 & 1/2 & 1 \end{pmatrix},$$

$M_3 = \mathbb{R}^5$. So:

$$\begin{aligned}
B_0 &= M_0, & \dim &= 1, & B_0 &=< e > \ , \\
B_1 &= M_1/M_0, & \dim &= 1, & B_1 &=< Ae > \ , \\
B_2 &= M_2/M_1, & \dim &= 2, & B_2 &=< A^2e, Ae * Ae > \ , \\
B_3 &= M_3/M_2, & \dim &= 1, & B_3 &=< R = Ae * Ae * Ae > \ ,
\end{aligned}$$

$$A^2e * Ae = 3/2R, \ A^3e = 15/4R, \ A(Ae * Ae) = 0.$$

Подпространства L'_k

Уравнения Бутчера неоднородны. Давайте разделим из на однородную и неоднородную части.

Определение. Для произвольного дерева t обозначим через $\Phi'(t)(A)$ вектор

$$\Phi'_t(A) = \delta(t)\Phi_t(A) - \underbrace{Ae * \cdots * Ae}_{k} \ ,$$

где $k = \rho(t)$ – вес дерева.

Определение. Для матрицы A рассмотрим подпространства L'_k, $k = 0, 1, \ldots$ порожденные векторами $\Phi'_t(A)$ для всех деревьев t веса k.

$$L'_0 = L'_1 = 0 \ ,$$

$$L'_2 =< 2A^2e - Ae{*}Ae > \ ,$$

$$L'_3 =< 6A^3e - Ae{*}Ae{*}Ae, \ 3A(Ae{*}Ae) - Ae{*}Ae{*}Ae,$$
$$2A^2e{*}Ae - Ae{*}Ae{*}Ae >$$

Условия порядка через L'_k

Теорема. Матрица A задает метод РК порядка $p \Leftrightarrow$

$$(d, Av) = \frac{(d, v)}{k+1}$$

для всех $v \in L_k(A)$ и для $k = 0, \dots p-1$.
Теорема. Матрица A задает метод РК порядка $p \Leftrightarrow$

$$\begin{array}{ll} 1) & (d, Ae)) = 1 \ , \\ 2) & \forall v \in L'_k : (d, v) = 0, \quad \text{for} \quad k \quad = 0, \dots, p \ . \end{array}$$

Уравнение (1) имеет вид:

$$c_{s+1} = 1$$

а уравнения (2) однородны.

Рекуррентная формула для L'_k

Определение. Для $k \geq 2$ обозначим через w_k вектор

$$w_k = kA(\underbrace{Ae * \cdots * Ae}_{k-1}) - \underbrace{Ae * \cdots * Ae}_{k} \in L'_k.$$

То есть

$$\begin{aligned} w_2 &= 2A^2 e - Ae * Ae, \\ w_3 &= 3A(Ae * Ae) - Ae * Ae * Ae, \\ &\ldots, \end{aligned}$$

Теперь пространства L'_k можно определить рекуррентным способом:

$$L'_k = \left(Ae * L'_{k-1}\right) + A(L'_{k-1}) + (w_k) + \sum_{i+j=k} L'_i * L'_j\,.$$

Подпространства M'_k

Для матрицы A рассмотрим фильтрацию $0 \subset M'_2 \subset M'_3 \ldots$:

$$\begin{aligned} M'_2 &= L'_2 \ , \\ M'_3 &= L'_2 + L'_3 \ , \\ M'_4 &= L'_2 + L'_3 + L'_4 \ , \\ \ldots \end{aligned}$$

Эта фильтрация совместима с умножением:

$$M'_i * M'_j \subset M'_{i+j}, \quad A(M'_i) \subset M'_{i+1} \ .$$

Алгебра B'

Определение. Градуированную алгебру, присоединенную к фильтрации $0 \subset M'_2 \subset M'_3 \subset \ldots$:

$$B'(A) = \bigoplus_{k=0}^{n} B'_k(A) = \bigoplus_{k=0}^{n} M'_k / M'_{k-1}$$

назовем нижней алгеброй Бутчера матрицы A.

Замечание. Все приведенные выше конструкции ($L_k, M_k, B_k, L'_k, M'_k, B'_k$) могут применятся к произвольной квадратной матрице A.

Размерности подпространств

Для случайно выбранной матрицы A размерности пространств $M_k(A)$ растут максимально быстро, то есть

$$\dim M_0 = 1,\ \dim M_1 = 2\ \dim M_2 = 4,\ \dim M_3 = 8,$$

$$\dim M_4 = 17,\ \dim M_5 = 37, \dots$$

Если A – матрица метода РК порядка p, то из условий порядка следует:

$$\dim M_{p-2} = n,\ \dim M_{p-3} < n$$

$$\dim M'_p < n - 1$$

Размерности подпространств

Пусть, например, A – матрица 9-стадийного метода порядка 7. Тогда размерности описанных выше подпространств будут таковы:

k:	0	1	2	3	4	5	6	7	8
$\dim L_k$:	1	1	2	3	5	7	—	—	—
$\dim M_k$:	1	2	4	6	9	10	10	10	10
$\dim B_k$:	1	1	2	2	3	1	0	0	0
$\dim L'_k$:	0	0	1	2	3	5	7	8	9
$\dim M'_k$:	0	0	1	2	4	6	7	8	9
$\dim B'_k$:	0	0	1	1	2	2	1	1	1

В целом, $\dim M_{p-3} \leq s$, $\dim M'_p \leq s-1$.

Размерности B'_k

Выпишем размерности B'_k для методов РК различного типа:

Method, k:	0	1	2	3	4	5	6	7	8
$RK(p = 3, s = 3):$	0	0	1	1	–	–	–	–	–
$RK(p = 4, s = 4):$	0	0	1	1	1	–	–	–	–
$RK(p = 5, s = 6):$	0	0	1	2	1	1	–	–	–
$RK(p = 6, s = 7):$	0	0	1	1	2	1	1	–	–
$RK(p = 7, s = 9):$	0	0	1	1	2	2	1	1	–
$RK(p = 8, s = 11):$	0	0	1	1	2	2	2	1	1

Что сделано

1. Получено полное описание матриц A, для которых $\dim B_3' = 1$.
2. Получено полное (почти) описание матриц A, для которых $\dim B_3' = 1$ и $\dim B_4' = 2$.
3. Близко к получению описание матриц A, для которых $\dim B_3' = 1$, $\dim B_4' = 2$ и $\dim B_5' = 2$.

Хотелось бы:

1. Получить полное описание матриц A для которых

$$\dim M_p' < n - 1.$$

2. Получить полное описание матриц A для которых

$$\dim M_{p-3} < n.$$

Численное решение

Уравнения Бутчера можно попытаться решать численно. Например, для 13-стадийных методов порядка 9 мы получим систему из 486 уравнений от 91 переменной. Я их решаю методом Ньютона со случайным начальным приближением. До этой границы (порядок ≤ 8) численные решения находятся сравнительно легко. Например, за несколько часов можно найти 10 000 методов $RK(7,9)$ или 100 методов $RK(8,11)$. Но метод $RK(9,13)$ я до сих пор нашел только один. **Замечание**. До сих пор было неизвестно даже, существуют ли методы $RK(9,13)$. Было известно, что для получения методов порядка 9 достаточно 17 стадий.

Локальная размерность многообразия решений

Пусть v – численно найденное решение системы уравнений.

$$v \to (v + \text{случайный сдвиг}) \to v + v_i$$

Получаем набор векторов $v_1, \ldots, v_N$ где N порядка сотен.
Рассмотрим неотрицательную квадратичную форму

$$f(x) = \sum (x, v_i)^2,$$

где (x, y) - скалярное произведение векторов. Если вектора v_i содержатся в k-мерном подпространстве, то ранг квадратичной формы f не превышает k.
Пусть $\mu_1 = 1 \geq \mu_2 \cdots \geq \mu_s$ - последовательность собственных значений квадратичной формы $f(x)$ в нормализованном виде.
Если, например, эта последовательность имеет вид

$$1, \quad 0.62, \quad 8 \cdot 10^{-13}, \quad \ldots,$$

то локальная размерность многообразия равна 2.

Заключение

1. Предложен алгебраический подход к решению уравнений Бутчера.
2. С его помощью удалось численно найти метод порядка 13.
3.
4. Найден метод $RK(5,6)$ с локальной погрешностью около7% от погрешности стандартного метода.
5. Найдены формулы для оценки локальной погрешности для методов $RK(4,4)$.

Thank you!!!!