Методы Рунге-Кутта порядка 7

Хашин С.И.
http://math.ivanovo.ac.ru/dalgebra/Khashin/index.html

ИвГУ, Иваново

16-й Семинар по компьютерной алгебре
Дубна, 21-22 Мая 2013

Оглавление

Введение

9-стадийные методы Рунге-Кутта (РК) порядка 7 задаются действительной матрицей (таблицей Бутчера)

$$
\begin{array}{c|ccccccccc}
c_2 & a_{21} \\
c_3 & a_{31} & a_{32} \\
c_4 & a_{41} & a_{42} & a_{43} \\
c_5 & a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} \\
c_6 & a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} \\
c_7 & a_{71} & a_{72} & a_{73} & a_{74} & a_{75} & a_{76} \\
c_8 & a_{81} & a_{82} & a_{83} & a_{84} & a_{85} & a_{86} & a_{87} \\
c_9 & a_{91} & a_{92} & a_{93} & a_{94} & a_{95} & a_{96} & a_{97} & a_{98} \\
\hline
 & b_1 & b_2 & b_3 & b_4 & b_5 & b_6 & b_7 & b_8 & b_9
\end{array}
$$

Коэффициенты этой таблицы должны удовлетворять некоторым полиномиальным уравнениям (условиям порядка или уравнениям Бутчера)

$$(b, \Phi_t(A)) = 1/\gamma(t)$$

для каждого дерева t веса $\leq p = 7$. Количество уравнений быстро растет с ростом p:

порядок	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
кол-во уравн.	1	2	4	8	17	37	85	200	486	1205
min. кол-во стадий				4	6	7	9	11	13	≤ 17

Уравнения Бутчера для RK(4,4)

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

(Рунге, Кутта, конец XIX-го века)

Методы порядка 5

В 1964 г. Д.Бутчер нашел 5-мерное семейство 6-стадийных методов порядка 5.
J. C. Butcher, *On Runge-Kutta processes of high order*, J. Austral. Math. Soc. **4** (1964), 179–194.
В 1969 г. Касситu показал, что семейство Бутчера является лишь подмногообразием большего, 6-мерного семейства.
C. R. Cassity, *The complete solution of the fifth order Runge-Kutta equations*, SIAM J. Numer. Anal. **6** (1969), 432–436.

Методы порядка 6

Д. Бутчером в 1966 г. было найдено 4-мерное семейство 7-стадийных методов порядка 6.
Мною было численно найдено большое количество отдельных методов `RK(6,7)` и определена локальная размерность многообразия в этих точках. Оказалось, что многие из найденных методов не содержатся в семействе Бутчера.
Явные аналитические выражения в виде Maple-функций были найдены Д.Вернером и мною.
http://math.ivanovo.ac.ru/dalgebra/Khashin/rk/sh_rk.html
Кроме основного 4-х мерного семейства (Бутчера), здесь же предлагаются формулы для двух трехмерных семейств, не входящих в основное.

Методы порядка 7

В литературе описано (Д.Бутчер) 2-мерное семейство 9-стадийных методов порядка 7.

Несколько лет назад мною были численно найдены большое количество отдельных методов `RK(7,9)` и определена локальная размерность многообразия в этих точках. Она оказалась равной 6.

Найти эти многообразия аналитически до сих пор не удавалось из-за большой сложности системы уравнений.

Методы порядка 7

В работах

- S.I. Khashin. A Symbolic-Numeric Approach to the Solution of the Butcher Equations. *Canadian Applied Mathematics Quarterly*, 17(1):555–569, 2009.
- S.I. Khashin. Butcher algebras for Butcher systems. *Numerical Algorithms*, 61(2):1–11, 2012.
- Хашин С.И., Три упрощающих предположения для методов Рунге-Кутта, *Вестник ИвГУ*, Иваново, 2012, вып. 2. с.142-150.

был предложен новый, алгебраический подход к изучению уравнений Бутчера, введено новый тип упрощающих предположений.

Методы порядка 7

На основе предложенной алгебраической конструкции, с учетом новых упрощающих предположений, была построена система из 40 уравнений от 46 переменных.
Мощности систем компьютерной алгебры недостаточно для ее решения. Однако, оказывается, можно при заданных рациональных значениях свободных переменных найти значения других.

Рациональная интерполяция

```
> RK79_c6( c3,c4,c5,a52);
```

$$
\begin{aligned}
&(-192\,a52^{2}\,c3^{5}\,c4+54\,c5^{2}\,c3^{3}\,c4^{2}+216\,c5^{5}\,c3^{2}\,c4-648\,c5^{3}\,c3^{3}\,c4^{2}-36\,c4\,c5^{5}\,c3+112\,a52^{2}\,c3^{5}\,c4^{2}+1080\,c5^{4}\,c3^{2}\,c4^{2}-36\,c4^{2}\,c5^{4}\,c3+189\,c5^{5}\,c3^{3}\,c4\\
&\quad-324\,c5^{4}\,c3^{3}\,c4-378\,c5^{5}\,c3^{2}\,c4^{2}+18\,c5^{4}\,c3^{2}\,c4+27\,c5^{3}\,c3^{3}\,c4+16\,c3^{4}\,a52^{2}\,c4+252\,c4^{2}\,c5^{6}\,c3+567\,c3^{4}\,c4^{2}\,c5^{3}-12\,c3^{4}\,a52\,c5^{2}-54\,c5^{3}\,c3^{2}\,c4^{2}-378\,c5^{4}\,c3^{3}\,c4^{2}\\
&\quad-12\,c5^{3}\,c3^{3}\,a52-126\,c5^{6}\,c3^{2}\,c4+112\,a52^{2}\,c4\,c3^{6}-432\,c4^{2}\,c5^{5}\,c3+24\,c5^{3}\,c3^{2}\,a52\,c4+24\,c5^{2}\,c3^{2}\,a52\,c4^{2}+12\,c5^{2}\,c3^{3}\,a52\,c4-288\,c5^{3}\,c3^{3}\,a52\,c4\\
&\quad-288\,c5^{2}\,c3^{3}\,a52\,c4^{2}+336\,c5^{3}\,c3^{3}\,a52\,c4^{2}-24\,c5\,c3^{3}\,a52\,c4^{2}-252\,c3^{4}\,a52\,c5^{2}\,c4^{2}-60\,c3^{4}\,a52\,c5\,c4+288\,c3^{4}\,a52\,c5\,c4^{2}+84\,c3^{4}\,a52\,c5^{3}\,c4+576\,c3^{4}\,a52\,c5^{2}\,c4\\
&\quad-252\,a52\,c3^{5}\,c4\,c5^{2}-252\,a52\,c3^{5}\,c4^{2}\,c5+36\,c5^{5}\,c4^{2}+9\,c5^{5}\,c3^{2}+16\,a52^{2}\,c3^{5})\Big/(832\,a52^{2}\,c3^{5}\,c4+1134\,c3^{4}\,c4^{2}\,c5^{2}+1680\,a52^{2}\,c3^{6}\,c4^{2}+108\,c5^{2}\,c3^{2}\,c4^{2}\\
&\quad-648\,c5^{2}\,c3^{3}\,c4^{2}-72\,c5^{2}\,c3^{3}\,a52+8505\,c3^{4}\,c5^{4}\,c4^{2}-432\,c5^{5}\,c3^{2}\,c4+1296\,c5^{3}\,c3^{3}\,c4^{2}+432\,c4\,c5^{5}\,c3+224\,c3^{4}\,a52^{2}\,c4^{2}-504\,c4\,c5^{6}\,c3-1120\,a52^{2}\,c3^{5}\,c4^{2}\\
&\quad-108\,c4\,c5^{4}\,c3-3672\,c5^{4}\,c3^{2}\,c4^{2}-11340\,c5^{5}\,c3^{3}\,c4^{2}+432\,c4^{2}\,c5^{4}\,c3-1890\,c5^{5}\,c3^{3}\,c4+1404\,c5^{4}\,c3^{3}\,c4+3780\,c5^{5}\,c3^{2}\,c4^{2}-216\,c5^{4}\,c3^{2}\,c4-336\,c3^{4}\,a52\,c5^{3}\\
&\quad-324\,c5^{3}\,c3^{3}\,c4-192\,c3^{4}\,a52^{2}\,c4-2520\,c4^{2}\,c5^{6}\,c3-216\,c4^{2}\,c5^{3}\,c3-5670\,c3^{4}\,c4^{2}\,c5^{3}+144\,c3^{4}\,a52\,c5^{2}+648\,c5^{3}\,c3^{2}\,c4^{2}+3780\,c5^{4}\,c3^{3}\,c4^{2}+144\,c5^{3}\,c3^{3}\,a52\\
&\quad+1260\,c5^{6}\,c3^{2}\,c4-1120\,a52^{2}\,c4\,c3^{6}+108\,c5^{3}\,c3^{2}\,c4+3780\,c5^{6}\,c3^{2}\,c4^{2}+864\,c4^{2}\,c5^{5}\,c3-288\,c5^{3}\,c3^{2}\,a52\,c4-288\,c5^{2}\,c3^{2}\,a52\,c4^{2}-144\,c5^{2}\,c3^{3}\,a52\,c4\\
&\quad+912\,c5^{3}\,c3^{3}\,a52\,c4+576\,c5^{2}\,c3^{3}\,a52\,c4^{2}-3360\,c5^{3}\,c3^{3}\,a52\,c4^{2}+288\,c5\,c3^{3}\,a52\,c4^{2}+2520\,c3^{4}\,a52\,c5^{2}\,c4^{2}+720\,c3^{4}\,a52\,c5\,c4-1584\,c3^{4}\,a52\,c5\,c4^{2}\\
&\quad-840\,c3^{4}\,a52\,c5^{3}\,c4-1152\,c3^{4}\,a52\,c5^{2}\,c4+2520\,a52\,c3^{5}\,c4\,c5^{2}+2520\,a52\,c3^{5}\,c4^{2}\,c5+672\,c5^{3}\,c3^{2}\,a52\,c4^{2}+144\,c5^{2}\,c3^{2}\,a52\,c4-144\,c5\,c3^{3}\,a52\,c4\\
&\quad+5040\,c3^{4}\,a52\,c5^{3}\,c4^{2}-1008\,a52\,c3^{5}\,c4\,c5-7560\,a52\,c3^{5}\,c4^{2}\,c5^{2}-432\,c5^{5}\,c4^{2}-108\,c5^{5}\,c3^{2}-192\,a52^{2}\,c3^{5}+108\,c5^{4}\,c4^{2}+224\,a52^{2}\,c3^{6}+504\,c5^{6}\,c4^{2}+27\,c5^{4}\,c3^{2}\\
&\quad+126\,c5^{6}\,c3^{2}+48\,c3^{4}\,a52^{2})
\end{aligned}
$$

Рис.: $c6(c3, c4, c5, a52)$

Рациональная интерполяция

У нас есть рациональная функция $c6(c3, c4, c5, a52)$, коэффициенты которой неизвестны. Но я могу найти ее значение при каждом наборе рациональных параметров. Степень числителя и знаменателя я тоже могу определить, но лишь по каждой переменной в отдельности. В целом получается линейная система уравнений с рациональными коэффициентами.
Типичный пример: 1252 переменных и $k > 1252$ уравнений. Через $150 - 200$ шагов числители и знаменатели элементов матрицы имеют длину по несколько тысяч десятичных цифр.

Интерполяция $\mod p$

Находим простое p, такое, что знаменатели всех элементов начальной матрицы не равны $0 \mod p$, $p = 100\,435\,991$.

Приводим матрицу $\mod p$ и решаем полученную систему.

Из 1252 коэффициентов при мономах ненулевыми оказываются лишь 240.

Для контроля повторяем процедуру при другом значении p.

Возвращаясь к исходной рациональной матрице, получаем уже систему от 240 переменных, которая уже по силам Maple.

Рациональные точки на эллиптических кривых

При $c_3 = 1/3, c_4 = 2/3, c_5 = 3/4, a_{52} = -1$ переменных c_7, c_8 оказываются связаны соотношением

$$61299227554632c_8^2c_7^2 - 60582401976159c_7c_8(c_7 + c_8)+ \\ +10570631548050(c_7^2 + c_8^2) + 59104688960403c_7c_8+ \\ -9014037791850(c_7 + c_8) + 412240185000 = 0.$$

Рациональные точки на кривой:

$$(c_7 = \frac{6}{23}, c_8 = 1), (c_7 = \frac{36459887800}{54528778389}, c_8 = 1).$$

Через группу точек эллиптической кривой:

$$(c_7 = \frac{1628455274517904}{4624450794300537}, c_8 = \frac{7340}{10451}).$$

Вложенные методы

Формулы для расчета:

$$
\begin{aligned}
k_1 &= f(x_0, y_0)\ , \\
k_2 &= f(x_0 + c_2 h, y_0 + h a_{21} k_1)\ , \\
k_3 &= f(x_0 + c_3 h, y_0 + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2))\ , \\
k_4 &= f(x_0 + c_4 h, y_0 + h(a_{41} k_1 + a_{42} k_2 + a_{43} k_3))\ , \\
y_1 &= y_0 + h(b_1 k_1 + b_2 k_2 + b_3 k_3 + b_4 k_4))\ , \\
k_5 &= f(x_0 + c_5 h, y_1)\ ,
\end{aligned}
$$

Нельзя ли использовать следующий шаг (k_5) для оценки погрешности текущего?

Вложенные методы:

$$
\begin{array}{c|cccccc}
c_2 & a_{21} & & & & & \\
c_3 & a_{31} & a_{32} & & & & \\
c_4 & a_{41} & a_{42} & a_{43} & & & \\
c_5 & a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & & \\
 & & \dots & & & & \\
\hline
 & b_1 & b_2 & b_3 & \dots & b_s & \\
 & \widetilde{b}_1 & \widetilde{b}_2 & \widetilde{b}_3 & \dots & \widetilde{b}_s & \widetilde{b}_{s+1}
\end{array}
$$

Методы Дормана-Принса, Фельберга. Но у них на одну стадию больше, чем надо.

Другие способы оценки погрешности

Формула численного дифференцирования

$$y'(0) = \frac{1}{12h}(8(y_1 - y_{-1}) + (y_2 - y_{-2})) + O(h^5).$$

дает способ оценки погрешности метода РК.
Делая несколько шагов метода РК, мы последовательно вычисляем:

$$\begin{array}{c|cccc} y_0 & k_{01} & k_{02} & k_{03} & k_{04} \\ y_1 & k_{11} & k_{12} & k_{13} & k_{14} \\ y_2 & k_{21} & k_{22} & k_{23} & k_{24} \\ & \dots & & & \end{array}$$

Другие способы оценки погрешности

Взяв 13 векторов

$$
\begin{array}{llll}
k_{01} & k_{02} & k_{03} & k_{04} \\
k_{11} & k_{12} & k_{13} & k_{14} \\
k_{21} & k_{22} & k_{23} & k_{24} \\
k_{31} & & &
\end{array}
$$

с подходящими коэффициентами мы можем получить оценку погрешности с точностью до $O(h^6)$.
Более того, эту оценку можно получить и в том случае, если все три шага выполнены с различной длиной:

$$(h, \lambda_2 h, \lambda_3 h).$$

Таким образом, мы получаем эффективный алгоритм контроля величины шага даже для классических методов РК.
Аналогичный прием можно использовать и для других методов РК.

Заключение

1. Предложен новый, алгебраический подход к решению уравнений Бутчера.
2. С его помощью численно найдено много новых методов РК, в том числе ранее совершенно неизвестные методы порядка 9.
3. Аналитически найдено 4-х мерное семейство методов порядка 6.
4. Аналитически найдено 6-х мерное семейство методов порядка 7.
5. Предложен эффективный алгоритм контроля величины шага для произвольных методов РК, не требующий поиска вложенных методов.

Thank you!!!!