

Алгебраический подход к нахождению методов  
Рунге-Кутта  
Семинар «Компьютерная алгебра»  
факультета ВМК МГУ и ВЦ РАН

Хашин С.И.

<http://math.ivanovo.ac.ru/dalgebra/Khashin/index.html>

ИвГУ, Иваново  
25 сентября 2013 г.

# План

1. Обзор текущего состояния исследований в области методов РК.
2. Верхняя и нижняя алгебры Бутчера.
3. Реализация методов РК на Maple.
4. Методы порядка 7.
5. Оценка погрешности для классических методов и автоматический выбор шага.
6. Оптимальные методы порядка 5.

## Введение

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

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

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

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

$c_2$	$a_{21}$			
$c_3$	$a_{31}$	$a_{32}$		
$c_4$	$a_{41}$	$a_{42}$	$a_{43}$	
	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4$

при этом будут выполнены соотношения:

$$c_2 = a_{21} ,$$

$$c_3 = a_{31} + a_{32} ,$$

$$c_4 = a_{41} + a_{42} + a_{43} ,$$

$$1 = b_1 + b_2 + b_3 + b_4 .$$

В общем виде оказывается удобно собрать все коэффициенты в нижнетреугольную квадратную матрицу с нулевой диагональю:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & & & & & \\ a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{s,s-1} & 0 & 0 \\ b_1 & b_2 & \dots & b_{s-1} & b_n & 0 \end{pmatrix}$$

при этом будем полагать:

$$a_{21} = c_2,$$

$$a_{31} = c_3 - a_{32},$$

$$a_{41} = c_4 - a_{42} - a_{43},$$

$\dots,$

$$b_1 = 1 - b_2 - b_3 - \dots - b_s.$$

## 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)

Долгое время не только решение, но и нахождение условий порядка в общем виде (уравнений на коэффициенты матрицы) оставалось большой проблемой. Новые подходы понемногу накапливались и прорыв произошел в двух статьях:

J.C. Butcher. Coefficients for the study of runge-kutta integration processes. *J. Austral. Math. Soc.*, 3:185–201, 1963.

J.C. Butcher. On Runge-Kutta processes of high order *J. Austral. Math. Soc.*, 4:179–194, 1964.

В них выписаны условия порядка в общем виде: по одному уравнению на каждой отмеченное дерево.

## Деревья и оператор $\Phi$

Рассмотрим пространство  $\mathbb{R}^n$  с векторами-столбцами и пусть  $e = (1, \dots, 1)^t$  – вектор из одних единиц.

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

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

Для произвольного помеченного дерева  $t$  через  $\rho(t)$  обозначим количество ребер, через  $\delta(t)$  – произведение  $(\rho + 1)$  по всем собственным поддеревьям.



Определим вектора  $\Phi_\tau(A) \in \mathbb{R}^n$  следующим образом:

$N$	$t$	$\Phi_t$	$\rho$	$\delta$
$t_1$	$\bullet$	$e$	0	1
$t_2$	$\begin{array}{c} \circ \\   \\ \bullet \end{array}$	$Ae$	1	1
$t_3$	$\begin{array}{c} \circ \\   \\ \circ \\   \\ \bullet \end{array}$	$A^2e$	2	2
$t_4$	$\begin{array}{c} \circ \quad \circ \\ \diagdown \quad / \\ \bullet \end{array}$	$Ae * Ae$	2	1
$t_5$	$*$	$A^3e$	3	6
$t_6$	$\begin{array}{c} \circ \\   \\ \circ \quad \circ \\ \diagdown \quad / \\ \bullet \end{array}$	$A^2e * Ae$	3	2
$t_7$	$\begin{array}{c} \circ \quad \circ \quad \circ \\ \diagdown \quad   \quad / \\ \bullet \end{array}$	$Ae * Ae * Ae$	3	1
$t_8$	$\begin{array}{c} \circ \quad \circ \\ \diagdown \quad / \\ \circ \\   \\ \bullet \end{array}$	$A(Ae * Ae)$	3	3

Рис.: Оператор  $\Phi$

Коэффициенты таблицы таблицы Бутчера (или расширенной матрицы) должны удовлетворять полиномиальным уравнениям (условиям порядка или уравнениям Бутчера)

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

для каждого дерева  $t$  веса  $\leq p$ . 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	$\leq 17$

## 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. Кассити показал, что семейство Бутчера является лишь подмножеством 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.

Что значит “нашел”? Это означает, что дан некоторый алгоритм, по которому несвободные переменные выражаются через свободные. На каждом шаге какие-то переменные находятся из линейной системы уравнений, иногда из квадратного уравнения.

## 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](http://math.ivanovo.ac.ru/dalgebra/Khashin/rk/sh_rk.html)

Поиск (Яндекс, Google): “Хашин Иваново”.

Кроме основного 4-х мерного семейства (Бутчера), здесь же предлагаются формулы для двух трехмерных семейств, не входящих в основное.

## Методы порядка $\geq 7$

Дж. Бутчером описано 2-мерное семейство 9-стадийных методов порядка 7.

В работах Кертиса, Вернера, Купера и некоторых других авторов найдены отдельные семейства методов порядков 7, 8 и даже 10.

J.H. Verner. *Refuge for Runge-Kutta Pairs*,

<http://people.math.sfu.ca/~jverner/>

P. Stone. *Peter Stone's Maple Worksheets*.

<http://www.peterstone.name/Maplepgs>

Sharp P.W., Verner J.H., *Generation of high-order interpolants for explicit Runge-Kutta pairs*, TOMS, 24, 1, 13-29. 1998.

## Вложенные методы (RK pairs)

Стадии правила 3/8:

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(t_0, y_0), \\k_2 &= hf(t_0 + \frac{1}{3}h, y_0 + \frac{1}{3}k_1), \\k_3 &= hf(t_0 + \frac{2}{3}h, y_0 - \frac{1}{3}k_1 + k_2), \\k_4 &= hf(t_0 + h, y_0 + k_1 - k_2 + k_3), \\y_1 &= y_0 + (k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4)/8\end{aligned}$$

Следующий шаг начинается с:

$$k'_1 = hf(t_0 + h, y_1),$$

Вычисление  $k'_1$  можно рассматривать как еще одну стадию на предыдущем шаге, то есть как вычисление  $k_5$ .

Нельзя ли получить новое, более точное значение  $y_1$  в виде

$$y'_1 = y_0 + \beta_1 k_1 + \beta_2 k_2 + \beta_3 k_3 + \beta_4 k_4 + \beta_5 k_5$$

Оказывается можно, но очень редко. Чаще можно получить не более, а менее точное значение и использовать разность в качестве оценки погрешности. Но и таких пар, буквально, считанные единицы. Реально используются две такие пары Дормана-Принса и еще одна пара Фельберга.

Дорман-Принс 1: 6-стадийные 5 порядка, проверка порядка 4.

Дорман-Принс 2: 13-стадийные 8 порядка, проверка порядка 7.

Фельберг: 13-стадийные 7 порядка, проверка порядка 8.

## Многошаговые методы

Переходя к очередному шагу метода РК мы полностью забываем информацию, полученную на предыдущих шагах. А нельзя ли ее использовать?

Получается промежуточный вариант между методами РК и многошаговыми методами (типа Адамса, Милна и др.).

TSRK – двухшаговые методы.

Сегодня TSRK одно из наиболее активно изучаемых направлений численного решения ОДУ.



# Алгебры Бутчера

## 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-Кутты, *Вестник ИВГУ, Иваново*, 2012, вып. 2. с.142-150.

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

Рассмотрим подпространства, порожденные векторами  $\Phi_t(A)$  для всех деревьев веса  $k$ :

$$L_k = \langle \Phi_t(A) \mid \rho(t) = k \rangle \subset \mathbb{R}^{s+1}.$$

Например,

$$L_0 = \langle e \rangle,$$

$$L_1 = \langle Ae \rangle,$$

$$L_2 = \langle A^2e, Ae * Ae \rangle,$$

$$L_3 = \langle A^3e, A(Ae * Ae), A^2e * Ae, Ae * Ae * Ae \rangle,$$

Рассмотрим фильтрацию в  $\mathbb{R}^{s+1}$ : цепочку подпространств  $0 \subset M_0 \subset M_1 \subset M_2 \dots$ :

$$M_0 = L_0,$$

$$M_1 = L_0 + L_1,$$

$$M_2 = L_0 + L_1 + L_2,$$

$$M_3 = L_0 + L_1 + L_2 + L_3, \dots$$

**Теорема.** Эта фильтрация согласована с умножением, то есть

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

## Верхняя алгебра Бутчера

**Определение.** Назовем алгебру, присоединенную к фильтрации  $0 \subset M_0 \subset M_1 \subset M_2 \dots$ :

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

**верхней алгеброй Бутчера** матрицы  $A$ .

**Теорема.**  $B(A)$  является конечномерной, коммутативной, ассоциативной градуированной алгеброй над полем действительных чисел. Оператор  $A$  действует на ней.

## Подпространства $L'_k$

Изменим немного нашу конструкцию.

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

$$\Phi'_t(A) = \delta(t)\Phi_t(A) - \underbrace{Ae * \dots * Ae}_d,$$

где  $d = \rho(t)$  – вес дерева.

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

$$L'_0 = L'_1 = 0, \quad L'_2 = \langle 2A^2e - Ae * Ae \rangle$$

$$L'_3 = \langle 6A^3e - Ae * Ae * Ae, \quad 3A(Ae * Ae) - Ae * Ae * Ae, \\ 2A^2e * Ae - Ae * Ae * Ae \rangle$$

## Подпространства $M'_k$

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

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

Эта фильтрация совместима с умножением, то есть

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

## Алгебра $B'$

**Определение.** Будем называть алгебру, присоединенную к фильтрации  $0 \subset M'_2 \subset M'_3 \subset \dots$ :

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

нижней алгеброй Бутчера матрицы  $A$ .

**Замечание.** Конструкции  $B(A)$ ,  $B'(A)$  применимы к любой квадратной матрице  $A$ .

## Упрощающие предположения

**Экспериментальный факт:** Для всех известных методов РК порядка 5 и выше размерность подпространств  $B'_i$  такова:

$$\begin{array}{l} i : \quad \quad \quad 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad \dots \\ \dim(B'_i) : \quad 0 \quad 0 \quad 1 \quad 1 \quad 2 \quad \dots \end{array}$$

Так как  $B'_i = M'_i / M'_{i-1}$ , то

$$\begin{array}{l} i : \quad \quad \quad \quad \quad 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad \dots \\ \dim(M'_i) : \quad \quad \quad 0 \quad 0 \quad 1 \quad 2 \quad 4 \quad \dots \\ \# \text{ порождающих} : \quad 0 \quad 0 \quad 1 \quad 4 \quad 11 \quad \dots \end{array}$$

**Замечание:** Порождающих векторов больше, чем размерность порожденного ими пространства, то они линейно зависимы.

**Новые упрощающие предположения:** будем считать, что это выполнено и для всех остальных методов.

## Методы порядка 7

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

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



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.

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

В частности, выяснилось, что  $s_6$  является рациональной функцией от  $s_3, s_4, s_5, a_{52}$ , но коэффициенты ее найти напрямую не удастся. 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 для определения коэффициентов функции получается линейная система уравнений с рациональными коэффициентами, 1252 переменных от  $k > 1252$  уравнений.

Через 150 – 200 шагов числители и знаменатели элементов матрицы имеют длину по несколько тысяч десятичных цифр.

## Интерполяция $\text{mod } p$

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

Приводим матрицу  $\text{mod } p$  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.

> RK79\_c6( c3,c4,c5,a52);

$$\begin{aligned}
 & (-192 a52^2 c3^5 c4 + 54 c5^2 c3^3 c4^2 + 216 c5^3 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 \\
 & - 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 c5^4 a52^2 c4 + 252 c4^2 c5^6 c3 + 367 c5^4 c4^2 c3^3 - 12 c5^4 a52 c5^2 - 54 c5^3 c3^2 c4^2 - 378 c5^4 c3^3 c4^2 \\
 & - 12 c5^3 c3^3 a52 - 126 c5^6 c3^2 c4 + 112 a52^2 c4 c5^6 - 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 \\
 & - 288 c5^2 c3^3 a52 c4^2 + 336 c5^3 c3^3 a52 c4^2 - 24 c5 c3^3 a52 c4^2 - 252 c5^4 a52 c3^2 c4^2 - 60 c5^4 a52 c5 c4 + 288 c5^4 a52 c5 c4^2 + 84 c5^4 a52 c3^3 c4 + 576 c5^4 a52 c3^2 c4 \\
 & - 252 a52 c3^5 c4 c3^2 - 252 a52 c3^5 c4^2 c5 + 36 c5^5 c4^2 + 9 c5^5 c3^2 + 16 a52^2 c3^5) / (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 \\
 & - 648 c5^2 c3^3 c4^2 - 72 c5^2 c3^3 a52 + 8505 c5^4 c5^4 c4^2 - 432 c5^5 c3^2 c4 + 1296 c5^3 c3^3 c4^2 + 432 c4 c5^5 c3 + 224 c5^4 a52^2 c4^2 - 504 c4 c5^6 c3 - 1120 a52^2 c3^5 c4^2 \\
 & - 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 c5^4 a52 c3^3 \\
 & - 324 c5^3 c3^3 c4 - 192 c5^4 a52^2 c4 - 2520 c4^2 c5^6 c3 - 216 c4^2 c5^3 c3 - 5670 c5^4 c4^2 c3^3 + 144 c5^4 a52 c3^2 c4^2 + 648 c5^3 c3^2 c4^2 + 3780 c5^4 c3^3 c4^2 + 144 c5^3 c3^3 a52 \\
 & + 1260 c5^6 c3^2 c4 - 1120 a52^2 c4 c5^6 + 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 \\
 & + 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 c5^4 a52 c3^2 c4^2 + 720 c5^4 a52 c5 c4 - 1584 c5^4 a52 c5 c4^2 \\
 & - 840 c5^4 a52 c3^3 c4 - 1152 c5^4 a52 c3^2 c4 + 2520 a52 c5^5 c4 c5^2 + 2520 a52 c5^5 c4^2 c5 + 672 c5^3 c3^2 a52 c4^2 + 144 c5^2 c3^2 a52 c4 - 144 c5 c3^3 a52 c4 \\
 & + 5040 c5^4 a52 c3^3 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 \\
 & + 126 c5^6 c3^2 + 48 c5^4 a52^2)
 \end{aligned}$$

Рис.: c6(c3, c4, c5, a52)

## RK(7, 9) с рациональными коэффициентами

В получающихся выражениях переменная  $c_8$  выражается через  $c_7$  с помощью квадратичных радикалов. Для многих целей очень желательно иметь методы РК с полностью рациональными коэффициентами. Можно подобрать  $c_7$  так, чтобы  $c_8$  тоже оказалось рациональным, но это оказывается совсем нетривиальной задачей.

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

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

Это биквадратичное уравнение, кривая получается эллиптической. На множестве ее точек имеется групповой закон.

## Рациональные точки на эллиптических кривых

Пару рациональных точек получить можно, взяв  $c_7 = 1$  или  $c_8 = 1$ . Но для методов РК и  $c_7$ , и  $c_8 = 1$  должны быть меньше 1. С помощью группового закона из имеющихся точек получим новые:

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

Через группу точек эллиптической кривой:

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

## Вложенные методы

Формулы для расчета:

$$k_1 = f(x_0, y_0) ,$$

$$k_2 = f(x_0 + c_2 h, y_0 + h a_{21} k_1) ,$$

$$k_3 = f(x_0 + c_3 h, y_0 + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2)) ,$$

$$k_4 = f(x_0 + c_4 h, y_0 + h(a_{41} k_1 + a_{42} k_2 + a_{43} k_3)) ,$$

$$y_1 = y_0 + h(b_1 k_1 + b_2 k_2 + b_3 k_3 + b_4 k_4) ,$$

$$k_5 = f(x_0 + c_5 h, y_1) ,$$

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

Вложенные методы:

$c_2$	$a_{21}$					
$c_3$	$a_{31}$	$a_{32}$				
$c_4$	$a_{41}$	$a_{42}$	$a_{43}$			
$c_5$	$a_{51}$	$a_{52}$	$a_{53}$	$a_{54}$		
		$\dots$				
	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$\dots$	$b_s$	
	$\tilde{b}_1$	$\tilde{b}_2$	$\tilde{b}_3$	$\dots$	$\tilde{b}_s$	$\tilde{b}_{s+1}$

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 12 векторов

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

с подходящими коэффициентами мы можем получить оценку погрешности с точностью до  $O(h^6)$ .

$$\begin{aligned} err \approx \frac{h}{80} & (12k_{01} - 28k_{02} - 20k_{03} - 4k_{04} + 101k_{11} - 49k_{12} - \\ & - 65k_{13} - 27k_{14} + 97k_{21} - 13k_{22} - 5k_{23} + k_{24}). \end{aligned}$$

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.

Статья “Оценка погрешности классических методов Рунге-Кутты” отправлена в “Журнал вычислительной математики и математической физики” в августе 2013 г..

Коэффициенты 4-стадийного метода РК 4-го порядка удовлетворяют 8 условиям порядка. Невозможно найти матрицу того же размера, задающую метод 5 порядка, то есть удовлетворяющую еще и следующим 9 условиям. Но сумму квадратов этих выражений можно использовать для сравнения качества методов.

Для методов Рунге-Кутты 4-го порядка нет большого смысла использовать методы, отличные от стандартного. С методами порядка 5 ситуация другая. Аналогичная погрешность для указанных в литературе и используемых на практике методов различается в сотни раз.

В файле

[http://math.ivanovo.ac.ru/dalgebra/Khashin/rk/sh\\_rk.html](http://math.ivanovo.ac.ru/dalgebra/Khashin/rk/sh_rk.html)

предлагается Maple-программа (в текстовом виде) для нахождения различных методов РК. Методы РК порядка 5 реализованы с помощью двух функций:

$RK_{5b}(c_2, c_3, c_4, c_5, a_43)$  – для случая  $b_2 = 0$

$RK_{5ba}(c_2, c_3, c_4, c_5, b_2, a_43)0$  – для случая  $b_2 \neq 0$

Построенные методы удовлетворяют 17-ти уравнениям порядка. Сумму квадратов следующих 20-ти уравнений ( $S^2$ ) можно использовать в качестве оценки качества метода.

Близкими к оптимальным будут следующие значения

$$c_2 = 2/23, \quad c_3 = 12/37, \quad c_4 = 27/29, \quad c_5 = 199/200, \quad a_{43} = 24/5.$$

При этом  $S^2 \approx 2.18 \cdot 10^{-9}$ .

Вот получающаяся таблица Бутчера:

0.8695	0.8696					
0.3243	-0.2805	0.6048				
0.9310	9.0495	-12.92	4.800			
0.9950	13.9481	-19.93	7.028	-0.0556		
1.0000	14.3154	-20.45	7.192	-0.0525	-0.00557	
	0.0973	0	0.492	2.4720	-20.0866	18.02

Максимальное значение модуля элементов матрицы  $A$  свыше 20. Это довольно много, будет приводить к росту погрешностей округления. Поэтому был найден ещё один метод с несколько большим значением функции  $S$ , но меньшей по модулю ( $\leq 10.5$ ) величиной коэффициентов:

$$c_2 = 1/6, \quad c_3 = 12/37, \quad c_4 = 15/16, \quad c_5 = 74/75, \quad a_{43} = 119/24.$$

При этом  $S^2 \approx 9.54 \cdot 10^{-9}$ .

Для метода Дормана-Принса значение функции  $S^2$  равно  $0.25 \cdot 10^{-6}$ , то есть примерно в 90 раз больше. Для метода, из книги Бутчера значение функции  $S^2$  равно  $4.9 \cdot 10^{-6}$ , то есть в 1750 раз больше. Для метода Фельберга, значение функции  $S^2$  равно  $24 \cdot 10^{-6}$ , то есть в 8500 раз больше.

## Устойчивость

Оба метода достаточно устойчивы. Их область устойчивости (stability region) даже больше, чем у широко распространенного метода Дормана-Принса.

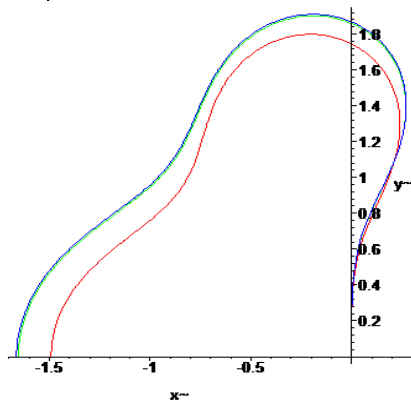


Рис.: Область устойчивости



## Заклучение

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 алгоритм контроля величины шага для произвольных методов РК, не требующий поиска вложенных методов.
6. Найдены существенно более эффективные методы 5 порядка.