Вестник Ивановского государственного университета

*Серия «Биология, Химия, Физика, Математика»*

Вып. 3 / 2007 С. 94 – 103

**С. И. Хашин**

# АЛЬТЕРНАТИВНАЯ ФОРМА УРАВНЕНИЙ БУТЧЕРА

Предложена альтернативная форма уравнений Бутчера для нахождения методов Рунге — Кутта. Эта форма дает возможность перейти к рассмотрению каждого такого метода как некоторого алгебраического объекта. Такой подход должен позволить существенно сократить размеры системы уравнений и найти новые, более эффективные методы Рунге — Кутта.

The alternative form of Butcher equations for a finding of Runge-Kutta methods is offered. This form allows to pass to consideration of each such method as some algebraic object. Such approach should allow reduce essentially the sizes of system of the equations and presumes to find new, more effective Runge-Kutta methods.

УДК 513.6.

## 1. Введение

Методы Рунге — Кутта (РК) описываются некоторой действительной нижнетреугольной матрицей размера $(k+1)*(k+1)$ с нулевой диагональю, всего $k(k+1)/2$ коэффициентов ($k$-стадий). Они должны удовлетворять некоторой системе полиномиальных уравнений, называемых уравнениями Бутчера.

В начале 60-х гг., главным образом в работах Дж. Бутчера [5, 6, 7, 8], был предложен новый способ записи этих уравнений, которые стали называть уравнениями Бутчера. Оказывается, каждое уравнение соответствует помеченному дереву (помеченное дерево — граф без циклов с отмеченной вершиной, корнем дерева).

Это позволило добиться значительного прогресса в нахождении методов РК высокого порядка. В работах самого Дж. Бутчера и его последователей были описаны методы РК порядка 5, найдены большие семейства методов порядков 6, 7, 8.

Получить решение системы уравнений Бутчера для методов более высоких порядков в приемлемом виде до сих пор не удается. Более того, не известно даже минимальное количество стадий для методов порядка 9, 10. Как ни странно, но даже нынешние довольно мощные системы компьютерной алгебры не так много дали для нахождения решений систем уравнений Бутчера [3].

Уравнения Бутчера обладают достаточно сложной и глубокой алгебраической структурой. В исходной их форме эту структуру увидеть



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 07–07–00178).

довольно сложно. В работе предлагается иная форма тех же уравнений, позволяющая перейти к рассмотрению каждого метода РК как некоторого алгебраического объекта. Такой подход должен позволить существенно сократить размеры системы уравнений и найти новые, более эффективные методы РК.

## 2. Запись уравнений Бутчера

Каждый $n$-стадийный метод РК порядка $p$ [1, 2] задается нижнетреугольной $n \times n$-матрицей $\tilde{A}$ вида:

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & 0 & \dots & 0 \\ & & \dots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

и вектором $b = (b_1, \dots, b_n)$ длины $n$. Их можно объединить в одну расширенную матрицу $A$ размера $(n+1) \times (n+1)$:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & 0 & \dots & 0 \\ & & \dots & \\ b_1 & b_2 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Согласно теореме Бутчера, чтобы метод РК имел порядок $p$, необходимо и достаточно, чтобы матрица метода $\tilde{A}$ (размера $n * n$) и вектор $b$ удовлетворяли уравнениям Бутчера [2, 4]:

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

для всех деревьев $t$ веса меньшего $p$.

Запишем уравнения Бутчера в несколько ином виде, через расширенную матрицу. Для этого нам понадобится вектор $d = e_{n+1}$, у которого последняя ($(n+1)$-я) координата равна 1, а все остальные 0: $d = (0, \dots, 0, 1)^t$. Тогда последнюю координату произвольного вектора $v$ можно записать в виде скалярного произведения $(d, v)$.

**Теорема 2.1.** *Расширенная матрица $A$ задает метод РК порядка $p$ тогда и только тогда, когда для каждого дерева $t$ веса $\leqslant p$ выполнено равенство*

$$(d, \Phi_t(A)) = \frac{1}{\delta(t)}.$$

**Доказательство.** Так как

$$(b * \Phi_t(\tilde{A})) = (d, A \cdot \Phi_t(A)),$$

то уравнения Бутчера можно записать в виде

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

для всех деревьев веса $< p$.

Если $t$ — произвольное дерево веса $< p$, то $t_1 = \alpha t$ — произвольное одноногое дерево веса $\leqslant p$. Учитывая, что $(d, A \cdot \Phi_t(A)) = (d, \Phi_{\alpha t}(A))$ и $\delta(\alpha t) = \gamma(t)$, последнее уравнение можно переписать в виде

$$(d, \Phi_{t_1}(A)) = 1/\delta(t_1)$$

для всех одноногих деревьев $t_1$ веса $\leqslant p$. Так как

$$\Phi_{t_1 * t_2}(A) = \Phi_{t_1}(A) * \Phi_{t_2}(A)$$

и

$$\delta_{t_1 * t_2} = \delta_{t_1}\delta_{t_2},$$

то уравнения для неодноногих деревьев являются следствиями уравнений для одноногих.

Для примера: восемь уравнений для 4-стадийных методов 4-го порядка будут выглядеть так (выписаны уравнения только для одноногих деревьев):

$$\begin{array}{rcrl}
1) & (d, Ae) & = & 1, \\
2) & (d, A^2e) & = & 1/2, \\
3) & (d, A^3e) & = & 1/6, \\
4) & (d, A(Ae * Ae)) & = & 1/3, \\
5) & (d, A^4e) & = & 1/24, \\
6) & (d, A(A^2e * Ae)) & = & 1/8, \\
7) & (d, A(Ae * Ae * Ae)) & = & 1/4, \\
8) & (d, A^2(Ae * Ae)) & = & 1/12.
\end{array}$$

Отметим, что уравнению для дерева $t$ в классической форме соответствует уравнение для дерева $\alpha t$ в альтернативной форме.

Важной особенностью новой формы уравнений Бутчера, уже использованной в доказательстве теоремы, является их мультипликативность: если уравнения выполнены для деревьев $t_1$ и $t_2$, то они выполнены и для произведения деревьев $t_1 \cdot t_2$. Таким образом, достаточно проверять выполнимость уравнений только для одноногих деревьев, для всех остальных она будет следовать из мультипликативности.

## 2.1. Подпространства $L_k$

Обозначим через $K_n$ пространство нижнетреугольных матриц $A$ размера $(n+1) * (n+1)$ с нулевой диагональю, у которых элементы под главной диагональю отличны от 0.

**Определение 2.2.** Пусть $A$ — матрица из $K_n$. Будем отождествлять ее с соответствующим нильпотентным оператором в пространстве $\boldsymbol{R}^{n+1}$. Через $L_k = L_k(A)$ обозначим подпространство в $\boldsymbol{R}^{n+1}$, порожденное векторами $\Phi_t(A)$ для всех деревьев веса $k$. Через $L'_k$ обозначим векторы из $L_k$ с нулевой последней координатой:

$$L'_k = \{v \in L_k : (d, v) = 0\}.$$

Подробнее, пространства $L_i$ для малых $i$ порождаются следующими векторами:

$$L_0 =< e >,$$

$$L_1 =< Ae >,$$
$$L_2 =< A^2e, Ae * Ae >,$$
$$L_3 =< A^3e, A(Ae * Ae), A^2e * Ae, Ae * Ae * Ae > .$$

В общем случае пространство $L_4$ порождается восемью векторами, соответствующими восьми деревьям веса 4. Однако эти векторы могут быть линейно зависимы, так что размерность пространств $L_i$ может оказаться меньше количества векторов.

Пространства $L'_i$ при $i = 0, 1$ нулевые: $L'_0 = L'_1 = 0$. При $i \geqslant 2$ порождающие векторы для пространства $L'_i$ можно легко указать, если матрица $A$ задает метод РК порядка $\geqslant i$. Например, пространство $L'_2$ будет порождаться одним вектором:

$$L'_2 =< 2 * A^2e - Ae * Ae/2 > .$$

Пространство $L'_3$ будет порождаться уже тремя векторами:

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

Любое дерево $t$ веса $k$ можно представить либо в виде $\alpha t_1$, либо в виде $t_1t_2$ для некоторых деревьев $t_1$, $t_2$, поэтому

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

где звездочкой, как и раньше, обозначается покоординатное умножение векторов.

*Замечание 2.3.* Если матрица $A$ задает метод РК порядка $p$, то для всех $k \leqslant p$

$$L_k =< A^ke > \oplus L'_k.$$

**Теорема 2.4.** *Матрица $A$ задает метод РК порядка $p \Leftrightarrow$ для всех $k < p$:*

$$\forall v \in L_k : (d, Av) = \frac{(d, v)}{k+1}. \qquad (*)$$

**Доказательство.** Пусть матрица $A$ задает метод РК порядка $p$, т. е. выполнены соотношения

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

Для доказательства требуемого теоремой равенства достаточно проверить, что для каждого дерева $t$ веса $k$ выполнено

$$(d, A \cdot \Phi_t(A)) = (d, \Phi_t(A))/(k + 1),$$

что следует из $\delta(\alpha t) = \delta(t)(w(t) + 1)$.

Обратно, пусть выполнены равенства из условия теоремы. При $k$=0 получим: $(d, Ae) = (d, e) = 1$, т. е. условия (*) выполнены для деревьев веса 0. Если для некоторого дерева $t$

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

то из условия (*) получаем

$$(d, A \cdot \Phi_t(A)) = (d, \Phi_t(A))/(k + 1),$$

что и дает нам индуктивное доказательство теоремы.

**Теорема 2.5.** *Матрица $A$ задает метод РК порядка $p \Leftrightarrow$*

$$\begin{array}{lll} 1) \quad (d, A^k e) = 1/k!, & \text{при} & k = 0, \ldots, p, \\ 2) \quad \forall v \in L'_k : Av \in L'_{k+1}, & \text{при} & k < p. \end{array} \qquad (**)$$

**Доказательство.** Проверим эквивалентность условий теоремы условиям предыдущей теоремы. Пусть матрица $A$ задает метод РК порядка $p$, т. е.

$$\forall v \in L_k : (d, Av) = (d, v)/(k+1)$$

при $k < p$. Так как $e \in L_0$ и $(d, e) = 1$, то последовательно получаем:

$$\begin{array}{ccccc} (d, Ae) & = & (d, e)/1 & = & 1, \\ (d, A^2 e) & = & (d, Ae)/2 & = & 1/2 \\ & & \cdots & & \\ (d, A^p e) & = & (d, A^{p-1} e)/p & = & 1/p!. \end{array}$$

Если $v \in L'_k$, т. е. $v \in L_k$ и $(d, v) = 0$, то из условий (*) получаем: $(d, Av) = (d, v)/(k+1) = 0$, т. е. $Av \in L'_{k+1}$, что и требовалось доказать.

В обратную сторону, пусть выполнены соотношения (**) и $v \in L_k$. Так как $(d, A^k e) = 1/k!$, то

$$v = k! \cdot (d, v) \cdot A^k e + w$$

для некоторого вектора $w \in L'_k$. Поэтому

$$(d, Av) = (d, A(k!(d, v) \cdot A^k e)) + (d, Aw) = k!(d, v)(d, A^{k+1} e) = (d, v)/(k+1),$$

что и требовалось доказать.

## 2.2. Рекуррентные формулы для $L_i$, $L'_i$

Рекуррентная формула для нахождения пространств $L_i$ была получена выше:

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

Аналогичную формулу можно привести и для пространств $L'_i$:

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

## 2.3. Алгебры Бутчера

**Определение 2.6.** Пусть $A$ — матрица из $K_n$. Через $M_k = M_k(A)$ обозначим сумму подпространств

$$M_k = L_0 + \cdots + L_k.$$

Через $M'_k = M'_k(A)$ обозначим сумму подпространств

$$M'_k = L'_0 + \cdots + L'_k.$$

Пространства $M_k$ и $M'_k$ образуют фильтрации в $\boldsymbol{R}^{n+1}$, согласованные со $*$-умножением и действием оператора $A$:

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

**Определение 2.7.** Присоединенную к фильтрации $M_k$ алгебру

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

назовем *алгеброй Бутчера* матрицы $A$.

Алгебру же, присоединенную к фильтрации $M'_k$,

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

назовем *нижней алгеброй Бутчера* матрицы $A$.

При этом, конечно,

$$\sum_{k=0}^{n} \dim(B_k(A)) = n+1 \quad \text{и} \quad \sum_{k=0}^{n} \dim(B'_k(A)) = n,$$

а значит, начиная с некоторого $k \geqslant k_0$, $B_k = 0$ и с некоторого $k' \geqslant k'_0$, $B'_{k'} = 0$. Алгебры Бутчера $B(A)$ и $B'(A)$ являются коммутативными ассоциативными градуированными алгебрами, причем $B(A)$ — алгебра с 1.

Для случайно выбранной матрицы $A$ размерности пространств быстро растут, для небольших $k$ они просто равны количеству различных деревьев веса $k$. Поэтому максимальное значение $k$, при котором $B_k \neq 0$, невысоко (подробнее см. далее). Но если матрица $A$ является матрицей некоторого метода РК порядка $p$, то $B_{p-3} \neq 0$.

**Свойство 2.8.** *При умножении матрицы на ненулевую константу алгебра Бутчера не изменяется. Точнее говоря, алгебры $B(A)$ и $B(\lambda A)$ изоморфны.*

**Свойство 2.9.** *Для любых $K, d$ множество матриц $A$ таких, что $\dim(B_k(A)) \leqslant d_k$, является проективным подмногообразием в пространстве всех матриц.*

Аналогичными свойствами обладают и нижние алгебры $B'$.

**Определение 2.10.** Пространства вложенные: $M'_0 \subset M'_1 \cdots \subset M'_k \ldots$ . Определим пространство $\delta_k$ как ортогональное дополнение в $M'_k$ к подпространству $M'_{k-1}$:

$$M'_k = M'_{k-1} \oplus \delta_k = \sum_{i=0}^{k} \delta_i.$$

При этом, конечно, $dim(\delta_i) = dim(B'_k)$.

Пространства $\delta_k$ удобно вычислять, для них имеется рекуррентное соотношение

$$\delta_k = Ae * \delta_{k-1} + A(\delta_{k-1}) + \sum_{i+j=k} \delta_i * \delta_j + (Ae * \cdots * Ae - k! A^k e).$$

Подробнее:

$$\delta_0 = \delta_1 = 0,$$

$$\delta_2 =< w_2 >,$$

$$\begin{aligned} \delta_3 = Ae * \delta_2 + A(\delta_2) + < Ae * Ae * Ae - 6A^3 e > \\ = Ae * w + Aw + < Ae * Ae * Ae - 6A^3 e >, \end{aligned}$$

$$\delta_4 = Ae * \delta_3 + A(\delta_3) + \delta_2 * \delta_2 + < Ae * Ae * Ae * Ae - 24A^4 e >,$$

$$\delta_5 = Ae * \delta_4 + A(\delta_4) + \delta_2 * \delta_3 + < Ae * Ae * Ae * Ae * Ae - 120A^5 e > .$$

## 2.4. Примеры

В следующих примерах указываем расширенную матрицу метода и таблицу с размерностями пространств $M_k, B_k, M'_k, B'_k$.

**Пример 2.11.** Методы 3-го порядка:

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 \\ 1/6 & 4/6 & 1/6 & 0 \end{pmatrix}.$$

Размерности пространств:

$$\begin{array}{cccccc} i: & & 0 & 1 & 2 & 3 \\ dim(M_i) & : & 1 & 2 & 4 & 4 \\ dim(B_i) & : & 1 & 1 & 2 & 0 \\ dim(M'_i) & : & 0 & 0 & 1 & 2 \\ dim(B'_i) & : & 0 & 0 & 1 & 1. \end{array}$$

**Пример 2.12.** Методы 4-го порядка:

$$A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_1 = 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_2 = 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & c_3 = 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & c_4 = 1 \\ 1/6 & 2/6 & 2/6 & 1/6 & 0 & c_5 = 1 \end{pmatrix},$$

$$A_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_1 = 0 \\ 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_2 = 1/3 \\ -1/3 & 1 & 0 & 0 & 0 & c_3 = 2/3 \\ 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & c_4 = 1 \\ 1/8 & 3/8 & 3/8 & 1/8 & 0 & c_5 = 1 \end{pmatrix}.$$

Размерности пространств:

$$
\begin{array}{rcccccc}
i: & & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\
dim(M_i) & : & 1 & 2 & 4 & 5 & 5 \\
dim(B_i\,) & : & 1 & 1 & 2 & 1 & 0 \\
dim(M_i') & : & 0 & 0 & 1 & 2 & 3 \\
dim(B_i'\,) & : & 0 & 0 & 1 & 1 & 1.
\end{array}
$$

В литературе описано большое количество методов РК различных порядков. Кроме того, в последнее время стало возможных их численное нахождение [4]. И для аналитически построенных методов, и для найденных численно можно найти соответствующие алгебры Бутчера и размерности их компонент. Соберем воедино размерности наиболее важных для нас пространств — размерности компонент нижней алгебры Бутчера ($B_i'$):

$$
\begin{array}{rcccccccccc}
\text{Метод:} & & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\
RK(p=3,n=3) & : & 0 & 0 & 1 & 1 & - & - & - & - & - \\
RK(p=4,n=4) & : & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & - & - & - & - \\
RK(p=5,n=6) & : & 0 & 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & - & - & - \\
RK(p=6,n=7) & : & 0 & 0 & 1 & 1 & 2 & 1 & 1 & - & - \\
RK(p=7,n=9) & : & 0 & 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 1 & 1 & - \\
RK(p=8,n=11) & : & 0 & 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1.
\end{array}
\tag{2}
$$

### 2.5. Заключение

При исследовании методов РК большую роль играют упрощающие предположения нескольких видов. Полагалось, что все известные методы удовлетворяют одному, а обычно даже двум упрощающим предположениям. Это позволяет значительно сократить как количество уравнений в системе, так и количество переменных.

Однако дальнейший прогресс в этом направлении оказывается невозможным, т. к. более сильные упрощающие предположения уже не выполняются даже для известных методов, т. е. построение упрощающих предположений порядка больше 3, обобщающих классическое упрощающее предположение, невозможно.

Однако такие предположения можно построить, двигаясь в другом направлении. Обратим внимание, что согласно (2) размерности пространств $B_i'$ при малых $i$ следующие:

$$
\begin{array}{rcccccc}
i: & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & \dots \\
dim(B_i'): & 0 & 0 & 1 & 1 & 2 & \dots
\end{array}
$$

Так как $B_i' = M_i'/M_{i-1}'$, где $M_i' = L_0' + \dots + L_i'$, то

$$
\begin{array}{rl}
dim(M_0') & = 0, \\
dim(M_1') - dim(M_0') & = 0, \\
dim(M_2') - dim(M_1') & = 1, \\
dim(M_3') - dim(M_2') & = 1, \\
dim(M_4') - dim(M_3') & = 2 \\
\dots &
\end{array}
$$

или

$$\begin{aligned} dim(M_0') &= 0,\\ dim(M_1') &= 0,\\ dim(M_2') &= 1,\\ dim(M_3') &= 2,\\ dim(M_4') &= 4\\ &\dots \end{aligned}$$

Согласно определению пространств $L_i'$, размерности пространств $M_0', M_1', M_2'$ всегда одинаковы: $0, 0, 1$. Размерности же остальных пространств могут изменяться. Требование фиксированной размерности для этих подпространств и можно рассматривать как новое упрощающее предположение.

## Библиографический список


1. *Березин И. С., Жидков Н. П.* Методы вычислений. М.: Физматгиз, 1962. Т. 2. 640 с.
2. *Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990. 512 с.
3. *Хаммуд Г. М., Хашин С. И.* Шестимерное семейство 6-шаговых методов Рунге — Кутта порядка 5 // Науч. тр. ИвГУ. Математика. Вып. 4 (2001). С. 114—122.
4. *Хашин С. И.* Численное решение уравнений Бутчера // Вестн. Иван. гос. ун-та. 2000. Вып. 3. С. 155—164.
5. *Butcher J. C.* Coefficients for the study of Runge — Kutta Iteration Processes // J. Austral. Math. Soc. 1963. № 3. P. 185—201.
6. *Butcher J. C.* Implicit Runge — Kutta Processes // Math. Comp. 1964. № 18. P. 50—64.
7. *Butcher J. C.* Numerical methods for ordinary differential equations. Toronto, etc.: John Wiley & Sons, 2003. 439 p.
8. *Butcher J. C.* On Runge — Kutta processes of high order // J. Austral. Math. Soc. 1964. № 4. P. 179—194.