УДК 519.68

С. И. Хашин

Три упрощающих предположения для методов Рунге — Кутта

Предложен новый подход к упрощающим предположениям в системе полиномиальных уравнений Бутчера, используемых для нахождения методов Рунге — Кутта. Доказаны условия применимости как классических, так и новых упрощающих предположений.

Рассмотрен результат применения сразу трех упрощающих предположений. Часть переменных выражена через остальные. Найдено, какие из уравнений Бутчера в этом случае будут следствием остальных уравнений и упрощающих предположений.

Ключевые слова: Методы Рунге — Кутта, уравнения Бутчера.

A new approach to simplifying assumptions in the system of polynomial Butcher's equations used to find the Runge — Kutta methods. Conditions of applicability both classical, and new simplifying assumptions are proved.

The result of application of three simplifying assumptions is considered. The part of variables is expressed through the others. It is found, what of Butcher's equations in this case will be a consequence of other equations and simplifying assumptions.

Key words: Runge — Kutta methods, Butcher's equations.

1. Введение

Как известно, n-стадийный метод Рунге — Кутта определяется *таблицей Бутчера*:

$$\begin{array}{cccccc} c_2 & a_{21} & & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & & \\ & \dots & & & & \\ c_n & a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{n,n-1} & \\ & b_1 & b_2 & \dots & b_{n-1} & b_n \end{array} \tag{1}$$

Тогда уравнениями порядка (*уравнения Бутчера*) для метода Рунге — Кутта [2, 4] порядка p будут

$$\sum_{j=1}^{n} b_j \Phi_{tj}(A) = (b, \Phi_t(A)) = 1/\gamma(t), \tag{2}$$

где t — произвольное дерево веса $\leqslant p$ (через $(b, \Phi_t(A))$ здесь обозначено обычное скалярное произведение векторов b и $\Phi_t(A)$).

В работах [1, 3] было предложено объединять вектор b и матрицу A в одну расширенную матрицу $\widetilde{A}$. В работе [3] было доказано, что уравнения Бутчера в терминах расширенной матрицы можно записать следующим образом.

Теорема 1.1. *Расширенная матрица $\widetilde{A}$ задает метод Рунге — Кутта порядка p тогда и только тогда, когда уравнение*

$$(d, \Phi_t(\widetilde{A})) = \frac{1}{\delta(t)} \tag{3}$$

выполнено для всех деревьев t веса меньше или равного p. Здесь $d = (0, \ldots, 0, 1)^t$ — вектор, у которого последняя координата равна 1, а все остальные — 0.

Замечание 1.2. В такой формулировке уравнения для неодноногих деревьев будут следствием уравнений для одноногих. Поэтому достаточно рассматривать только одноногие деревья.

В тех же работах были введены пространства $L_k(A)$, $M_k(A)$, $L'_k(A)$ и $M'_k(A)$.

Определим несколько деревьев, которые потребуются нам в дальнейшем.

Определение 1.3. Пусть t_0 — дерево, состоящее из одной вершины, $t_1 = \alpha t_0$ — две вершины и одно ребро, $t_2 = \alpha^2 t_0$, $t_3 = \alpha^3 t_0$ — цепочки из двух и трех ребер соответственно, $t_4 = \alpha(t_1 \cdot t_1)$. При этом

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

2. Первое (классическое) упрощающее предположение

Упрощающие предположения широко используются при нахождении методов Рунге — Кутта. Несмотря на этоб до сегодняшнего дня нет точного описания границ их применимости. Приведем поэтому их точную формулировку в терминах расширенной матрицы $\widetilde{A}$ и доказательство теоремы.

Теорема 2.1. (Классическое упрощающее предположение, C_2 в терминах книги [2].) *Пусть A — расширенная матрица n-стадийного метода Рунге — Кутта порядка p, причем подпространство M_{p-1} совпадает со всем $\mathbb{R}^{n+1}$. Тогда*

$$Bd = B^2 d + Ae{*}Bd,$$

где $B = A^t$ — транспонированная матрица.

Доказательство. Пусть $v \in L_k$ для некоторого $k \leqslant p-1$. Тогда векторы Av и $Ae{*}v$ лежат в пространстве L_{k+1} и

$$\begin{aligned}
(d, Av) &= (d, v)/(k+1), \\
(d, A^2 v) &= (d, v)/(k+1)(k+2), \\
(d, A(Ae{*}v)) &= (d, v)/(k+2)
\end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}(Bd, v) &= (d, v)/(k+1),\\ (B^2 d, v) &= (d, v)/(k+1)(k+2),\\ (Ae{*}Bd, v)) &= (d, v)/(k+2).\end{aligned}$$

Отсюда получаем

$$(v, Bd - B^2 d - Ae{*}Bd) = 0$$

для всех векторов v из L_k при $k = 0, \ldots, p-1$, т. е. вектор $Bd - B^2 d - Ae{*}Bd$ ортогонален всем векторам v из пространства M_{p-1}, следовательно, он равен 0.

Замечание 2.2. Более подробно, в развернутом виде это упрощающее предположение можно записать так:

$$\begin{array}{cccc} 1) & b_n a_{n1} + b_{n-1} a_{n-1,1} + \cdots + b_2 a_{21} & = & b_1 \\ 2) & b_n a_{n2} + b_{n-1} a_{n-1,2} + \cdots + b_3 a_{32} & = & (1-c_2) b_2 \\ 3) & b_n a_{n3} + b_{n-1} a_{n-1,3} + \cdots + b_4 a_{43} & = & (1-c_3) b_3 \\ 4) & b_n a_{n4} + b_{n-1} a_{n-1,4} + \cdots + b_5 a_{54} & = & (1-c_4) b_4 \\ & & \cdots & \\ n-2) & b_n a_{n,n-2} + b_{n-1} a_{n-1,n-2} & = & (1-c_{n-2}) b_{n-2} \\ n-1) & b_n a_{n,n-1} & = & (1-c_{n-1}) b_{n-1} \\ n) & 0 & = & (1-c_n) b_n \\ n+1) & 0 & = & 0 \quad . \end{array} \tag{4}$$

Замечание 2.3. Система уравнений, выписанная выше, позволяет выразить элементы последней строки матрицы a_{ni} через остальные. При этом выражение для a_{n1} будет совпадать с $c_n - a_{n2} - \cdots - a_{n,n-1}$ при условии $b_2 c_2 + \cdots + b_n c_n = 1/2$.smallskip

Следствие 2.4. *Пусть подпространство M_{p-1} совпадает со всем пространством $\mathbb{R}^{n+1}$. Тогда уравнения, соответствующие деревьям вида $\alpha^2 t$ для произвольного дерева t, будут следствием остальных. В терминах теоремы* 1.1 *это можно сформулировать так: уравнения, соответствующие одноногим деревьям, будут следовать из остальных.*

3. Второе упрощающие предположение

Теорема 3.1. (Второе упрощающее предположение, D_1 в терминах книги [2].) *Пусть A — расширенная матрица n-стадийного метода Рунге — Кутта порядка p, причем подпространство M_{p-2} совпадает со всем пространством $\mathbb{R}^{n+1}$. Тогда*

$$(Ae{*}Ae - 2A^2 e){*}Bd = 0.$$

Доказательство. Пусть $v \in L_k$ для некоторого $k \leqslant p-2$. Тогда векторы $Ae * Ae * v, A^2 e * v$ принадлежат L_{k+2} и

$$\begin{aligned}(d, A(Ae{*}Ae{*}v)) &= (d, v)/(k+3),\\ (d, A(A^2 e{*}v)) &= (d, v)/(2(k+3))\end{aligned}$$

или

$$(Ae{*}Ae{*}Bd, v)) = (d, v)/(k+3),$$
$$(A^2e{*}Bd, v)) = (d, v)/(2(k+3)).$$

Отсюда

$$((Ae{*}Ae - 2A^2e){*}Bd, v) = 0$$

для всех векторов v из L_k при $k = 0, \ldots, p-2$. Следовательно, вектор $(Ae{*}Ae - 2A^2e){*}Bd$ равен 0.

Замечание 3.2. Условие теоремы 3.1 не является необходимым. Его можно ослабить. А именно заметим, что у вектора $Ae{*}Ae - 2A^2e$ первая координата всегда равна 0, а у вектора $Bd = (b_1, \ldots, b_n, 0)$ — последняя. Поэтому в произведении $(Ae{*}Ae - 2A^2e){*}Bd$ и первая и последняя координата всегда равны 0. А значит, вместо требования $M_{p-2} = \mathbb{R}^{n+1}$ можно потребовать лишь, чтобы пространство M_{p-2} содержало все векторы, у которых первая и последняя координата равны 0.

Более подробно, в развернутом виде это упрощающее предположение можно записать так:

$$\begin{array}{lcl}
(1) & 0 & = 0 \\
(2) & b_2(-c_2^2/2) & = 0 \\
(3) & b_3(a_{32}c_2 - c_3^2/2) & = 0 \\
(4) & b_4(a_{42}c_2 + a_{43}c_3 - c_4^2/2) & = 0 \\
 & \cdots & \\
(n-1) & b_{n-1}(a_{n-1,2}c_2 + \cdots + a_{n-1,n-2}c_{n-2} - c_{n-1}^2/2) & = 0 \\
(n) & b_n\ (a_{n,2}c_2 + a_{n,3}c_3 + \cdots + a_{n,n-1}c_{n-1} - c_n^2/2) & = 0 \\
(n+1) & b_{n+1}(b_2c_2 + b_3c_3 + \cdots + b_nc_n - c_{n+1}^2/2) & = 0.
\end{array} \qquad (5)$$

Следствие 3.3. *Пусть подпространство M_{p-2} совпадает со всем $\mathbb{R}^{n+1}$. Тогда в терминах теоремы* 1.1 *уравнения, соответствующие деревьям вида $t \cdot t_2$, будут следствиями остальных.*

Использование этих упрощающих предположений является основой, на которой построены все современные методы Рунге — Кутта. Используя соотношения (4), (5) можно сократить набор искомых коэффициентов, а следствия (2.4), (3.3) позволяют избавиться от многих уравнений.

Первое предположение выполнено практически для всех известных на сегодняшний день методов Рунге — Кутта. Но второе выполнено не всегда. Оно не выполнено для (практически всех) методов порядка 4. Среди 6-мерного многообразия 6-стадийных методов порядка 5 второе упрощающее предположение выполнено лишь для 5-мерного подмногообразия (методы Бутчера). Среди 7-стадийных методов порядка 6 оно выполнено уже почти всегда, по крайней мере для основного, 4-мерного многообразия решений. Но существуют не менее трех других неприводимых компонент (3-мерных) многообразия решений, для которых это упрощающее предположение не выполнено. Для всех известных методов порядка больше 6, выполнены оба упрощающих предположения.

Конечно, в этом направлении можно было бы двигаться и дальше, т. е. доказать, что если M_{p-3} совпадает со всем пространством $\mathbb{R}^{n+1}$, то определенные векторы равняются 0. Однако приведенные выше примеры показывают, что для уже известных методов Рунге — Кутта даже второе упрощающее предположение выполнено не всегда. Поэтому дальнейшее продвижение в этом направлении вряд ли имеет смысл.

4. Новое упрощающее предположение

В работах [1, 3] было предложено новое упрощающее предположение. Оно формулируется в терминах размерностей компонент алгебры Бутчера B_i', введенных в тех же работах: $\dim B_3' = 1$. Сформулируем основные свойства этого предположения в виде теоремы.

Теорема 4.1. *Пусть A — нижнетреугольная матрица с нулевой диагональю, у которой $dim\, B_3' = 1$. Тогда*

а) коэффициенты a_{i2} и a_{i3} при $i \geqslant 4$ могут быть явно выражены через остальные коэффициенты матрицы и c_i (напомним, что a_{i1} уже заранее выражены через них же);

б) уравнения из теоремы (1.1), соответствующие деревьям, содержащим поддеревья t_3 или t_4, следуют из остальных уравнений.

Доказательство. а). Определим векторы $w_k \in L_k'$ при $k \geqslant 2$ как

$$w_k = k! A^k e - \underbrace{Ae * \cdots * Ae}_{k}.$$

Согласно определению, пространства L_0' и L_1' нулевые, пространство L_2' порождено одним вектором

$$L_2' = < 2A^2 e - Ae{*}Ae = w_2 > ,$$

а пространство L_3' порождается тремя векторами:

$$L_3' = < 6A^3 e - Ae{*}Ae{*}Ae,\ 2A^2 e{*}Ae - Ae{*}Ae{*}Ae,\ 3A(Ae{*}Ae) - Ae{*}Ae{*}Ae > .$$

Первый из этих векторов равен w_3, второй — $Ae{*}w_2$, третий — $(w_3 - 3Aw_2)$.

Поэтому мы можем сказать, что пространство M_2' порождено одним вектором w_2, а пространство M_3' порождается M_2' и векторами

$$w_3,\ Ae * w_2,\ Aw_2. \tag{6}$$

Условие $\dim B_3' = 1$ означает, что размерность пространства M_3' должна лишь на 1 превышать размерность M_2', т. е. между четырьмя векторами $w_2, w_3,\ Ae * w_2,\ Aw_2$ должно быть два линейных соотношения. Сначала выпишем явно требуемые векторы:

$$w_2 = 2A^2 e - Ae * Ae = \begin{pmatrix} 0 \\ -c_2^2 \\ 2a_{32}c_2 - c_3^2 \\ 2(a_{42}c_2 + a_{43}c_3) - c_4^2 \\ 2(a_{52}c_2 + a_{53}c_3 + a_{54}c_4) - c_5^2 \\ \cdots \end{pmatrix},$$

$$w_3 = 6A^3e - Ae * Ae * Ae = \begin{pmatrix} 0 \\ -c_2^3 \\ -c_3^3 \\ 6a_{43}a_{32}c_2 - c_4^3 \\ \dots \end{pmatrix},$$

$$Ae * w_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -c_2^3 \\ c_3(2a_{32}c_2 - c_3^2) \\ c_4(2(a_{42}c_2 + a_{43}c_3) - c_4^2) \\ c_5(2(a_{52}c_2 + a_{53}c_3 + a_{54}c_4) - c_5^2) \\ \dots \end{pmatrix},$$

$$Aw_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -a_{32}c_2^2 \\ -a_{42}c_2^2 + a_{43}(2a_{32}c_2 - c_3^2) \\ \dots \end{pmatrix}.$$

Так как векторы порождают двумерное пространство, то соотношения между ними можно найти уже по первым трем координатам, точнее говоря, по второй и третьей, поскольку первая у всех векторов равна нулю, а именно:

$$d \cdot Ae * w_2 = (2a_{32}c_2c_3) \cdot w_2 + (c_2 - c_3)(2a_{32}c_2 - c_3^2) \cdot w_3\,, \tag{7}$$

$$d \cdot Aw_2 = (a_{32}c_2^3) \cdot w_2 + (a_{32}c_2^2) \cdot w_3\,, \tag{8}$$

где $d = 2a_{32}c_2^2 - c_3^2(c_2 - c_3)$.

Соотношения (7), (8) являются векторными. При фиксированных первых $k-1$ строках матрицы A они задают два линейных соотношения между элементами следующей, k-й строки. Это позволяет выразить a_{k2}, a_{k3} через элементы предыдущих строк и остальные элементы строки k: $a_{k4}, \dots, a_{k,k-1}$.

Предположим, дополнительно, что матрица A удовлетворяет второму упрощающему предположению, и среди b_i только b_2 равно 0. Это означает, что

$$\begin{array}{ccc} 0 & = & 0 \\ b_2 & = & 0 \\ c_3^2/2 & = & a_{32}c_2 \\ c_4^2/2 & = & a_{42}c_2 + a_{43}c_3 \\ c_5^2/2 & = & a_{52}c_2 + a_{53}c_3 + a_{54}c_4 \\ & \dots & \end{array} \tag{9}$$

и вектор w_2 имеет вид

$$w_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -c_2^2 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}.$$

В этом случае соотношения (7), (8) будут иметь более простой вид:

$$Ae * w_2 = c_2 w_2, \tag{10}$$

$$Aw_2 = -\frac{c_2^2}{2c_3} w_2 + \frac{c_2}{2c_3} w_3 = \frac{c_2}{2c_3}(-c_2 w_2 + w_3)\ . \tag{11}$$

В случае выполнения (9) соотношение (10) является тривиальным и между элементами k-й строки остается только одно соотношение. Но поскольку в этом случае a_{k2} уже выражено через остальные элементы строки, то опять мы получаем, что значения a_{k2}, a_{k3} выражаются через элементы предыдущих строк и остальные элементы строки k: $a_{k4}, \ldots, a_{k,k-1}$.

$$a_{43} = \frac{(c_3 - c_4)c_4^2}{c_3^2}\ ,$$
$$[15pt]a_{53} = \frac{a_{54}(2c_3c_4 - 3c_4^2) - c_5^2(c_3 - c_5)}{c_3^2}\ ,$$
$$\ldots$$

б). Как уже было доказано, если $\dim B_3' = 1$, то между четырьмя векторами $w_2, w_3,\ Ae{*}w_2,\ Aw_2$ имеются два линейных соотношения (7) и (8). Это означает, что среди векторов, порождающих L_3', два могут быть выражены через остальные. Следовательно, векторы $\Phi_{t_3}(A) = A^2e{*}Ae$ и $\Phi_{t_4}(A) = A(Ae{*}Ae)$ являются линейными комбинациями остальных векторов из L_3 и L_2, а значит, вектор $\Phi_t(A)$ для любого дерева t, содержащего поддерево t_3 или t_4, также будет линейной комбинацией остальных векторов. Из теоремы 1.1 следует, что и уравнения, соответствующие этим векторам также будут линейной комбинацией остальных векторов.

В максимально явной форме это можно сформулировать следующим образом.

Следствие 3.3. Пусть расширенная матрица A удовлетворяет обоим классическим упрощающим предположениям и новому предположению. Пусть также среди $\{b_i\}$ отлично от нуля лишь b_2. Тогда переменные a_{k1}, a_{k2}, a_{k3} можно выразить через остальные a_{ij} и c_i по формулам:

$$a_{k1} = c_k - \sum_{i=2}^{k-1} a_{ki}\ ,$$

$$a_{k2} = \left(c_k^2/2 - \sum_{i=3}^{k-1} a_{ki}c_i\right)/c_2\ ,$$

$$a_{k3} = \left(c_k^2(c_k - c_3) - \sum_{i=4}^{k-1} a_{ki}c_i(3c_i - 2c_3)\right)/c_3^2\ ,$$

5. Достигаемое упрощение системы уравнений

При использовании упрощающих предположений мы предполагаем, что в дополнение к исходной системе уравнений Бутчера 1.1 выполнен тот или иной набор дополнительных соотношений. Конечно, при таком подходе какие-то решения мы можем потерять, но упрощающие предположения подобраны так, что в практически во всех содержательных случаях они выполняются.

При этом все упрощающие предположения устроены так, что позволяют сразу выразить часть переменных через остальные, т. е. на самом деле дополнительные уравнения не появляются, а количество переменных сокращается.

С другой стороны, из каждого упрощающего предположения следует, что часть уравнений системы 1.1 будет следовать из остальных, т. е. количество уравнений также уменьшается.

Более детально. Первое (классическое, C_2) упрощающее предположение позволяет выразить уравнения, соответствующие "одноногим" деревьям, через остальные.

Второе упрощающее предположение позволяет выразить уравнения, содержащие поддерево вида $t_2 \cdot t$, где t — произвольное нетривиальное дерево, через остальные.

Третье упрощающее предположение означает, что уравнения, соответствующие деревьям, содержащим поддеревья t_3 или t_4, следуют из остальных уравнений.

Приведем таблицу, показывающую результат уменьшения количества уравнений для разного набора упрощающих предположений. В первом столбце указан порядок искомого метода Рунге — Кутта (p), во втором (u_0) — количество уравнений в исходной системе Бутчера (2) без применения упрощающих предположений, в третьем (u_1) — количество уравнений при одном упрощающем предположении (теорема 2.1), в четвертом (u_2) — при двух классических упрощающих предположениях (теоремы 2.1, 3.1), в пятом (u_3) — при всех трех (теоремы 2.1, 3.1 и 4.1).

p	u_0	u_1	u_2	u_3
4	8	4	3	3
5	17	9	6	5
6	37	20	13	9
7	85	48	32	19
8	200	115	79	42
9	486	286	202	98
10	1205	719	520	234

Выпишем отдельно наиболее важные частные случаи, которые до сих пор еще не исследованы в полном объеме. Для 9-стадийных методов порядка 7 исходная система состоит из 85 уравнений от 45 переменных. При использовании трех упрощающих предположений мы получим систему из 23 уравнений от 19 переменных. Для 11-стадийных методов порядка 8 исходная система состоит из 200 уравнений от 66 переменных, сокращенная система — 42 уравнения от 38 переменных.

Библиографический список

1. *Хашин С. И.* Альтернативная форма уравнений Бутчера // Вестн. Иван. гос. ун-та. Сер.: Биология. Химия. Физика. Математика. 2007. Вып. 3. С. 94—103.
2. *Butcher J. C.* Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. Toronto, etc.: John Wiley & Sons, 2003. 439 p.
3. *Khashin S. I.* A symbolic-numeric approach to the solution of the Butcher equations // Can. Appl. Math. Quart. 2009. Vol. 17, № 3. P. 555—569.
4. *Wanner G., Hairer E., Norsett S. P.* Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems. Berlin, etc. : Springer-Verlag, 2000. 539 p.