УДК 513.6

С. И. Хашин

ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ВЕРХНЕЙ И НИЖНЕЙ АЛГЕБР БУТЧЕРА

Для каждого метода Рунге — Кутта строятся две градуированные конечномерные коммутативные алгебры с единицей — верхняя и нижняя алгебры Бутчера. Их свойства и объясняют алгебраический смысл уравнений Бутчера.

Ключевые слова: методы Рунге — Кутта, уравнения Бутчера.

For each Runge — Kutta method, we construct two graduated finite-dimensional commutative algebra with identity — the upper and lower Butcher's algebras. Their properties explain the algebraic meaning of Butcher equations.

Key words: Runge — Kutta methods, Butcher equations.

В начале 1960-х гг. Дж. Бутчером [2, 3, 5] был предложен удобный метод для записи системы (полиномиальных) уравнений, задающих методы Рунге — Кутта. Эти уравнения трудны для решения, но имеют глубокий алгебраический смысл. Его выявлению и посвящена работа.

1. Верхняя алгебра Бутчера

Пусть R — действительная коммутативная алгебра с единицей (e) и A — некоторый линейный оператор на ней. Умножение будем обозначать ($*$). Базовый для нас пример: $R = \mathbb{R}^{n+1}$ с покоординатным умножением (e — вектор из единиц), A — нижнетреугольная матрица:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & 0 & \dots & 0 \\ & & \dots & \\ b_1 & b_2 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

т. е. в базовом примере алгебра конечномерна, а оператор нильпотентен.

В алгебре с оператором единица порождает следующие элементы:

$$e,\ Ae,\ \mathrm{Ae{*}Ae},\ A^2e,$$
$$Ae * Ae * Ae,\ A^2e * Ae,\ A(Ae * Ae),\ A^3e,\ \dots$$

Каждому *помеченному* дереву t соответствует некоторый элемент $\Phi_t(A)$ алгебры R (подробнее см. [4, 6]): тривиальному дереву t_0, состоящему из одной вершины, — $\Phi_{t_0}(A) = e$, дереву t_1, состоящему из двух вершин и соединяющего их ребра, — $\Phi_{t_1}(A) = Ae$ и т. д.

Напомним, что ***весом*** дерева t называется количество его ребер $w(t)$.

Пространства L_k. Для данной алгебры с оператором определим пространства L_k через их порождающие элементы: $L_k =< \Phi_t(A) >$ из R, где t — дерево веса k, т. е.

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

Согласно построению, $A(L_k) \subset L_{k+1}$ и $L_i * L_j \subset L_{i+j}$.

Пространства M_k. Определим теперь пространства M_k как суммы:

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

При этом $A(M_k) \subset M_{k+1}$ и $M_i * M_j \subset M_{i+j}$. Поэтому

$$0 \subset M_0 \subset M_1 \dots \subset M_k \subset \dots$$

— возрастающая фильтрация алгебры R, совместимая с умножением и оператором A.

Назовем *алгеброй Бутчера* градуированную алгебру, присоединенную к этой фильтрации:

$$B = B(R, A) = \bigoplus_k B_k = \bigoplus_k M_k/M_{k-1} \ .$$

Порождающие векторы для каждой компоненты этой алгебры в малых размерностях можно выписать явно:

$$\begin{aligned}
&B_0 =< e >,\ B_1 =< Ae >, \\
&B_2 =< Ae * Ae,\ A^2e > \ .
\end{aligned}$$

2. Примеры

Пусть алгебра R является действительным 5-мерным пространством $R = \mathbb{R}^5$ с покоординатным умножением и A — матрица стандартного 4-стадийного метода Рунге — Кутта:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1/6 & 2/6 & 2/6 & 1/6 & 0 \end{pmatrix} .$$

Тогда

$$L_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad L_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1/4 & 0 \\ 1/4 & 1/4 \\ 1 & 1/2 \\ 1 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Пространства же L_3 и все последующие имеют размерность 4 и состоят из всех векторов с нулевой первой координатой.

Таким образом,

$$M_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1/2 \\ 1 & 1/2 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad M_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1/2 & 1/4 & 0 \\ 1 & 1/2 & 1/4 & 1/4 \\ 1 & 1 & 1 & 1/2 \\ 1 & 1 & 1 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Нетрудно заметить, что пространство M_2 состоит из всех векторов, ортогональных $(0,0,0,1,-1)^t$. Пространства же M_3 и все следующие совпадают с $R = \mathbb{R}^5$.

Выпишем размерности пространств L_i, M_i и компонент (верхней) алгебры Бутчера $B = B(R,A) = \bigoplus_k B_k$ для указанной алгебры с оператором (R,A):

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

Более подробно, компонента B_0 порождается элементом e, который является единицей в алгебре B, компонента B_1 порождается элементом Ae, компонента B_2 порождается двумя элементами $Ae * Ae$ и A^2e, компонента B_3 порождается элементом A^3e, все остальные компоненты равны нулю. Умножение в этой алгебре задается соотношениями

$$\begin{aligned} Ae * (Ae * Ae) &= 0\ , \\ Ae * A^2 e &= 0\ , \end{aligned}$$

а действие оператора A соотношением

$$A(Ae * Ae) \quad = -3A^3 e$$

(все остальные произведения и действия оператора A либо очевидны по определению, либо равны нулю по соображениям размерности).

Для каждого конкретного метода Рунге — Кутта могут быть проделаны аналогичные вычисления, хотя их сложность и быстро растет с ростом порядка метода. Ограничимся здесь тем, что для 9-стадийного метода РК порядка 7 ($\dim R = 10$) приведем размерности компонент алгебры Бутчера:

$$
\begin{array}{rcrrrrrrrr}
i: & & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\
dim(M_i) & : & 1 & 2 & 4 & 6 & 9 & 10 & 10 & 10 \\
dim(B_i) & : & 1 & 1 & 2 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0.
\end{array}
$$

3. Классическое упрощающее предположение

Важнейшим инструментом, используемым при разработке методов Рунге — Кутта являются *упрощающие предположения* [4, 6]. В целом они выглядят так: мы предполагаем, что дополнительно к исходным уравнениям Бутчера выполнены те или иные соотношения между коэффициентами матрицы. При этом значительное количество уравнений оказывается следствием остальных. Однако их эффективность до сих пор под вопросом. Не все известные методы удовлетворяют даже основному упрощающему предположению. Непонятно, много ли мы отсекаем методов, предполагая то или иное упрощающее предположение. Введя понятие *алгебры Бутчера*, мы можем понять суть этих предположений. Приведем (без доказательства) следующую теорему.

Теорема. *Пусть A — (расширенная) матрица n-стадийного метода Рунге — Кутта порядка p (вида* (1)*). Тогда*

а) *метод A удовлетворяет основному упрощающему предположению ('C' в [4, с. 158]) тогда и только тогда, когда* $\dim M_i = n + 1$ *при* $i \geqslant p - 1$ *(другими словами,* $\dim B_i = 0$ *при $i \geqslant p$)*;

б) *метод A удовлетворяет двум упрощающим предположениям ('C' и 'D' в [4, с. 159]) тогда и только тогда, когда* $\dim M_i = n + 1$ *при $i \geqslant p - 2$ (другими словами,* $\dim B_i = 0$ *при $i \geqslant p - 1$).*

Иначе это можно сформулировать так: метод A удовлетворяет двум упрощающим предположениям тогда и только тогда, когда векторы $\Phi_t(A)$ для всех деревьев веса $\leqslant p - 2$ порождают все пространство $\mathbb{R}^{n+1}$.

Много раз предпринимались попытки продолжить построение упрощающих предположений, однако в целом особых успехов в этом направлении достигнуто не было. Это связано с тем, что пространство M_{p-3} уже не совпадает со всем пространством $\mathbb{R}^{n+1}$ практически ни для одного из известных методов. Поэтому для построения новых упрощающих предположений требуется искать другие подходы. Некоторые из них и рассматриваются ниже.

4. Нижняя алгебра Бутчера

Уравнения Бутчера выглядят так: для каждого дерева t у вектора $\Phi_t(A)$ последняя координата равна $1/\delta(t)$, где $\delta(t)$ — некоторое натуральное число, зависящее только от дерева [1].

Будем теперь предполагать, что алгебра R совпадает с $\mathbb{R}^{n+1}$ с покоординатным умножением и A — нижнетреугольная матрица:

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

Модифицируем векторы $\Phi_t(A)$ так, чтобы в случае, если A — матрица метода Рунге — Кутта некоторого порядка p, последняя координата у них равнялась нулю. В соответствии с уравнениями Бутчера это можно сделать следующим образом:

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

где $w = w(t)$ — вес дерева (количество ребер).

Рассмотрим пространства L'_k, порожденные векторами $\Phi'_t(A)$ для всех деревьев t веса k, т. е.:

$$\begin{aligned} L'_0 &= 0 , \\ L'_1 &= 0 , \\ L'_2 &= < 2A^2e - Ae * Ae > , \\ L'_3 &= < 6A^3e - Ae * Ae * Ae,\ 3A(Ae * Ae) - Ae * Ae * Ae, \\ &\quad 2A^2e * Ae - Ae * Ae * Ae > , \\ &\dots \end{aligned}$$

Определим теперь пространства M'_k как суммы:

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

Опять

$$0 = M'_0 = M'_1 \subset M'_2 \subset M'_3 \dots \subset M'_k \subset \dots$$

— возрастающая фильтрация алгебры R, совместимая с умножением и оператором A.

Рассмотрим градуированную алгебру, присоединенную к этой фильтрации:

$$B' = B'(R, A) = \bigoplus_k B'_k = \bigoplus_k M'_k / M'_{k-1} .$$

При этом

$$B'_0 = B'_1 = 0 ,$$

$$B'_2 =< A^2e - Ae * Ae > ,$$

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

5. Примеры

Для известных методов Рунге — Кутта алгебры Бутчера можно вычислить точно. Приведем здесь лишь размерности их компонент для некоторых наиболее важных случаев.

Для классических методов порядка 4 ($\dim R = 5$) размерности компонент нижней алгебры Бутчера таковы:

i :		0	1	2	3	4
$dim(M'_i)$	:	0	0	1	2	3
$dim(B'_i)$	:	0	0	1	1	1.

Для методов Бутчера 5-го порядка [4]($\dim R = 7$):

i :		0	1	2	3	4	5
$dim(M'_i)$	:	0	0	1	3	4	5
$dim(B'_i)$	:	0	0	1	2	1	1.

Для 9-стадийного метода РК порядка 7 ($\dim R = 10$) [4]:

i :		0	1	2	3	4	5	6	7
$dim(M'_i)$	:	0	0	1	2	4	6	7	8
$dim(B'_i)$	:	0	0	1	1	2	2	1	1.

Приведем размерности пространств B'_i для различных методов РК:

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.

Итак, для методов порядка больше 5 размерности младших компонент нижней алгебры Бутчера можно считать следующими:

$$\dim B'_0 = \dim B'_1 = 0\ ,$$
$$\dim B'_2 = \dim B'_3 = 1\ ,$$
$$\dim B'_4 = 2.$$

Эти соотношения как раз и можно взять в качестве новых упрощающих предположений при поиске методов Рунге — Кутта высокого порядка.

Библиографический список

1. *Хашин С. И.* Альтернативная форма уравнений Бутчера // Вестн. Иван. гос. ун-та. 2007. Вып. 3. С. 94—103.
2. *Butcher J. C.* Coefficients for the study of Runge — Kutta iteration processes // J. Austral. Math. Soc. 1963. № 3. P. 185—201.
3. *Butcher J. C.* Implicit Runge — Kutta processes // Math. Comp. 1964. № 18. P. 50—64.
4. *Butcher J. C.* Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. Toronto, etc.: John Wiley & Sons, 2003. 439 p.
5. *Butcher J. C.* On Runge — Kutta processes of high order // J. Austral. Math. Soc. 1964. № 4. P. 179—194.
6. *Wanner G., Hairer E., Norsett S. P.* Solving Ordinary Differential Equations. 1. Nonstiff Problems. Berlin, etc. : Springer-Verlag, 2000. 539 p.