



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 23 за 2019 г.](#)



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

[Конев С.А.](#)

Расширение теории
корневых деревьев Бутчера
для упрощённого
(m, k)-метода

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Конев С.А. Расширение теории корневых деревьев Бутчера для упрощённого (m, k)-метода // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 23. 27 с. doi:[10.20948/prepr-2019-23](https://doi.org/10.20948/prepr-2019-23)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-23>

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В. Келдыша
Российской академии наук

С.А. Конев

Расширение теории корневых деревьев Бутчера
для упрощённого (m, k) -метода

Москва — 2019

Конев С.А.

Расширение теории корневых деревьев Бутчера для упрощённого (m, k) -метода

Представлено расширение теории корневых деревьев Бутчера для упрощённого (m, k) -метода. Введено понятие цвета для стадий (m, k) -метода, на основе которого получены общие правила вывода условий порядка с помощью корневых деревьев Бутчера. Полученные теоретические результаты согласуются с известными частными результатами других авторов.

Ключевые слова: жёсткие системы, деревья Бутчера, методы Розенброка, (m, k) -методы, условия порядка.

Stanislav Andreevich Konev

The development of Butcher rooted trees theory for reduced (m, k) -method

The extension of the Butcher rooted trees theory for reduced (m, k) -methods is proposed. The new concept of "color" for the stages of the (m, k) -method is introduced. Based on this concept the general rules are formulated on how to obtain order conditions. Obtained theoretical results are in good compliance with known particular results from other researchers.

Key words: stiff systems, Butcher trees, Rosenbrock methods, (m, k) -methods, order conditions.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 18-01-00252, № 18-31-20020 и № 19-01-00602).

Введение

Рассмотрим задачу Коши для автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) вида:

$$u' = f(u), \quad 0 < t \leq T, \quad (0.1a)$$

$$u(0) = u_0, \quad (0.1b)$$

где $u = u(t) = (u^1(t), \dots, u^d(t))^T$ — точное решение задачи, $u_0 = (u_0^1, \dots, u_0^d)^T$ — вектор начальных условий, $f = (f^1(u), \dots, f^d(u))$ — вектор-функция правой части, d — размерность задачи (как и в работе [1], для нумерации компонент вектор-функции используются верхние индексы).

Считаем, что задача (0.1) является жёсткой ([2, §IV.1], [3, §5.4]), т.е. величина S , задаваемая формулой

$$S = \sup_{t \in (0, T]} \left(\max_{1 \leq i \leq d} |\operatorname{Re} \lambda_i(t)| / \min_{1 \leq i \leq d} |\operatorname{Re} \lambda_i(t)| \right), \quad (0.2)$$

велика. Здесь $\{\lambda_i(t)\}_{i=1}^d$ — собственные значения матрицы Якоби $J(t)$ правой части $f(u)$ по переменной u на точном решении $u(t)$ задачи (0.1): $J(t) = f_u(u(t))$.

Классические явные методы не используются для решения подобных задач в силу сильных ограничений на шаг численного интегрирования. Поэтому для решения жёстких задач используются специально разработанные методы (например, неявные методы Рунге–Кутты [4] или явные методы Рунге–Кутты с расширенными областями устойчивости [5], [6, §3.11], в последнее время набирают популярность экспоненциальные методы интегрирования жёстких задач [7]).

Во второй половине XX века в результате упрощений диагонально-неявных методов Рунге–Кутты возникли методы Розенброка [8] и методы Розенброка–Ваннера [2, §IV.7]. Традиционно один шаг метода Розенброка записывают в следующем виде:

$$y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad (0.3a)$$

$$k_i = h f\left(y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} k_j\right) + h J \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} k_j, \quad i = \overline{1, s}, \quad (0.3b)$$

где $J = f'_u(y_0)$ — матрица Якоби на решении y_0 . Коэффициенты $\{\alpha_{ij}\}_{i=1, j=1}^{s, s}$, $\{b_i\}_{i=1}^s$ и $\{\gamma_{ij}\}_{i=1, j=1}^{s, s}$ задают конкретный метод.

Несмотря на то что методы Розенброка возникли во второй половине прошлого века, они до сих пор используются при решении многих задач [9]. Более того, продолжаются исследования по поиску методов, оптимальных для решения тех или иных задач [10].

В работе [11] предложена модификация метода Розенброка (0.3) — т.н. (m, k) -метод решения жёстких задач. Основная цель, преследуемая авторами — уменьшение количества вычислений функции правой части. Общая формулировка (m, k) -методов представлена в [11], ниже выписаны расчётные формулы метода в виде, близком к традиционному:

$$y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^m b_i k_i, \quad (0.4a)$$

$$k_i = hf\left(y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} k_j\right) + \sum_{j \in R_i} r_{ij} k_j + hJ \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} k_j, \quad i \in M_{m,k}^{(0)}, \quad (0.4b)$$

$$k_i = k_{i-1} + \sum_{j \in R_i} r_{ij} k_j + hJ \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} k_j, \quad i \in M_{m,k}^{(1)}. \quad (0.4c)$$

Здесь $\{\alpha_{ij}\}_{i=1, j=1}^{m,m}$, $\{b_i\}_{i=1}^m$, $\{\gamma_{ij}\}_{i=1, j=1}^{m,m}$ и $\{r_{ij}\}_{i=1, j=1}^{m,m}$ — коэффициенты, определяющие метод, а $M_{m,k}^{(0)}$, $M_{m,k}^{(1)}$ и R_i — наборы индексов, определяемые по следующим правилам:

$$M_m = \{1, 2, \dots, m\} \subset \mathbb{N}$$

— номера всех стадий метода,

$$M_{m,k}^{(0)} = \{m_i \in \mathbb{N} : m_1 = 1, m_{i-1} < m_i, 2 \leq i \leq k, m_k \leq m\},$$

— номера стадий, на которых происходит вычисление функции f правой части,

$$M_{m,k}^{(1)} = M_m \setminus M_{m,k}^{(0)}$$

— номера остальных стадий, на которых вычисления функции f не происходит.

Множества индексов

$$R_i = \{m_{j-1} \in M_m : j > 1, m_j \in M_{m,k}^{(0)}, m_j \leq i\}$$

содержат индексы таких стадий, за которыми следует стадия из $M_{m,k}^{(0)}$ (с номером не больше i), т.е. на следующей стадии обязательно происходит вычисление функции правой части.

Поскольку описанные множества индексов могут иметь произвольную (но фиксированную для каждого конкретного метода) структуру, возникают существенные сложности при выводе условий порядка для (m, k) -методов в общем случае.

В работах [11–18] при выводе условий порядка реализован следующий подход: множества $M_{m,k}^{(0)}$ и $M_{m,k}^{(1)}$ фиксируются, после чего выполняется непосредственное разложение численного решения (как функции шага h) по формуле

Тейлора. В то же время для методов Розенброка разработана теория порядка, опирающаяся на теорию корневых деревьев Бутчера [2, §IV.7], что делает процесс вывода условий порядка для них простым, легко алгоритмизируемым и не требующим непосредственного применения формулы Тейлора.

В данной работе предложено расширение и применение инструментария теории деревьев Бутчера на случай *упрощённого* (m, k) -метода, в котором часть коэффициентов равна нулю, что существенно упрощает математические выкладки. Представляется, что развитый в данной работе подход позволит в дальнейшем разработать теорию порядка для *полного* (m, k) -метода с полным набором коэффициентов.

Работа состоит из следующих частей: в разделе 1 введена необходимая для дальнейшего изложения терминология, в разделе 2 представлено определение упрощённого (m, k) -метода и получены выражения для производных численного решения $(m, 1)$ -метода. Раздел 3 посвящён выводу утверждения о производных численного решения в двухполосном случае, аналогично раздел 4 содержит результаты для трёхполосной таблицы. В разделе 5 представлена формулировка теоремы о производных численного решения упрощённого (m, k) -метода общего вида и её применение к выводу условий порядка $(7, 2)$ -метода, в заключении подведены итоги работы.

1. Основные определения

В данном разделе представлены формулы общего (m, k) -метода, введена вся необходимая для дальнейшего изложения терминология.

Замечание 1. Формулы (0.4), определяющие (m, k) -методы, записаны в виде, близком к традиционному [11], но в них один и тот же знак k используется для обозначения углов наклона k_i в промежуточных точках и для обозначения количества элементов во множестве $M_{m,k}^{(1)}$. Чтобы избежать такого повтора, далее будем обозначать количество стадий, на которых происходит вычисление функции правой части, буквой p . Количество всех стадий метода будем обозначать буквой s , чтобы достигнуть единообразия с формулами (0.3) метода Розенброка, тогда формулы (0.4) переписываются в виде:

$$y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad (1.1a)$$

$$k_i = hf(y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} k_j) + \sum_{j \in R_i} r_{ij} k_j + hJ \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} k_j, \quad i \in M_{s,p}^{(0)}, \quad (1.1b)$$

$$k_i = k_{i-1} + \sum_{j \in R_i} r_{ij} k_j + hJ \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} k_j, \quad i \in M_{s,p}^{(1)}. \quad (1.1c)$$

Замечание 2. Для дальнейшего анализа удобно считать, что коэффициенты $\gamma_{ij} = 0$ при $j > i$. Также условимся считать, что $\alpha_{ij} = 0$, если $i \in M_{s,p}^{(1)}$, поскольку на стадиях из множества $M_{s,p}^{(1)}$ вычислений значений функции f правой части не происходит.

Определение 1. Назовём стадии (s, p) -метода (1.1), номера которых находятся во множестве $M_{s,p}^{(0)}$, **чёрными стадиями**, а стадии метода, номера которых находятся во множестве $M_{s,p}^{(1)}$, — **белыми стадиями**.

Представленное определение призвано упростить изложение и формулировку последующих результатов. Сложность анализа метода (1.1) объясняется тем, что множество индексов M_s разбивается на два подмножества, поэтому использование понятия *цвета* для стадий представляется наиболее наглядным. Коэффициенты α_{ij} , γ_{ij} и r_{ij} обычно записываются в виде таблицы, поэтому для них также удобно введение «цветных» обозначений.

Определение 2. Будем говорить, что коэффициенты α_{ij} , γ_{ij} и r_{ij} (s, p) -метода образуют в соответствующей таблице **чёрную строку**, если $i \in M_{s,p}^{(0)}$, или **белую строку**, если $i \in M_{s,p}^{(1)}$.

Считаем, что n последовательных чёрных строк с номерами $i, i + 1, \dots, i + n - 1$ образуют **чёрную полосу ширины n** если

$$(i - 1) \notin M_{s,p}^{(0)}, \{i, i + 1, \dots, i + n - 1\} \subset M_{s,p}^{(0)}, (i + n) \notin M_{s,p}^{(0)},$$

т.е. не существует более широкой чёрной полосы, содержащей тот же набор индексов.

Аналогично вводится понятие **белой полосы ширины w** , включающей строки с номерами $i, i + 1, \dots, i + w - 1$:

$$(i - 1) \notin M_{s,p}^{(1)}, \{i, i + 1, \dots, i + w - 1\} \subset M_{s,p}^{(1)}, (i + w) \notin M_{s,p}^{(1)}.$$

Таким образом, введённое определение позволяет поставить в соответствие каждому разбиению множества M_s на два непересекающихся подмножества двухцветную раскраску таблиц коэффициентов. Для дальнейшего изложения удобно ввести следующее

Определение 3. Допустим, в таблице коэффициентов имеется q чёрных и q белых полос, тогда будем говорить, что вектор $(n_1, w_1, \dots, n_q, w_q)$ задаёт **формулу раскрашивания** таблицы коэффициентов метода, если первая чёрная полоса содержит n_1 строк, следующая за ней белая — w_1 строк, и т.д.

Если же в таблице имеется q чёрных и $q - 1$ белых полос, то **формула раскрашивания** задаётся вектором $(n_1, w_1, \dots, w_{q-1}, n_q)$, содержащим $2q - 1$ элементов.

Пример 1. Рассмотрим (s, p) -метод с $s = 10$, $p = 6$. Множества $M_{s,p}^{(0)}$ и $M_{s,p}^{(1)}$ (чёрных и белых стадий соответственно) определены следующим образом:

$$\begin{aligned} M_{s,p}^{(0)} &= \{1, 2\} \cup \{5\} \cup \{8, 9, 10\}, \\ M_{s,p}^{(1)} &= \{3, 4\} \cup \{6, 7\}. \end{aligned}$$

Тогда, в соответствии с определением 3, вектор $(2, 2, 1, 2, 3)$ определяет формулу раскрашивания таблицы коэффициентов.

2. Упрощённый метод

Рассмотрим (s, p) -метод, задаваемый формулами (1.1), у которого при всех $i \in M_s$ множества R_i пусты. Тогда формулы (1.1) существенно упрощаются:

$$y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad (2.1a)$$

$$k_i = hf\left(y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} k_j\right) + hJ \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} k_j, \quad i \in M_{s,p}^{(0)}, \quad (2.1b)$$

$$k_i = k_{i-1} + hJ \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} k_j, \quad i \in M_{s,p}^{(1)}. \quad (2.1c)$$

Определение 4. Назовём метод, задаваемый формулами (2.1), **упрощённым (s, p) -методом**, а формулами (1.1) — **полным (s, p) -методом**.

Самыми простыми методами в классе упрощённых (s, p) -методов являются методы с $p = 1$, в которых осуществляется только одно вычисление функции правой части на шаге. Данные методы рассмотрены в работах [14, 16], что позволяет верифицировать приведённые ниже результаты.

Из определения множества $M_{s,p}^{(0)}$ следует, что первая строка в таблицах коэффициентов обязательно является чёрной, поэтому в контексте введённых обозначений $M_{s,1}^{(0)} = \{1\}$, $M_{s,1}^{(1)} = \{2, \dots, s\}$, вектор $v = (1, s - 1)$ определяет раскраску таблиц коэффициентов.

Будем вычислять производные численного решения как функции шага h , используя технику [2, §IV.7], но в бескоординатной форме ([19, §III.1], [20, глава 31]). Также для разложения потребуется формула Лейбница [1, §II.2] вида:

$$\frac{d^q}{dh^q} [h\psi(h)] \Big|_{h=0} = q \frac{d^{q-1}}{dh^{q-1}} \psi(h) \Big|_{h=0}, \quad (2.2)$$

где $\psi(h)$ — достаточное число раз дифференцируемая функция.

Согласно формулам (2.1), для единственной чёрной стадии имеем:

$$k_1 = hf(y_0) + \gamma_{11}hJk_1, \quad (2.3)$$

где k_1 определяется неявно, а для белых стадий:

$$k_j = k_{j-1} + hJ \sum_{k=1}^j \gamma_{jk}k_k, \quad j = \overline{2, s}.$$

По формуле Лейбница (2.2) для белых стадий верно

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = k_{j-1}^{(q)} \Big|_{h=0} + qf'(y_0) \sum_{k=1}^j \gamma_{jk}k_k^{(q-1)} \Big|_{h=0}, \quad j \in M_{s,1}^{(1)}, \quad (2.4)$$

где $f'(y_0) = J$ — матрица Якоби, вычисленная в точке y_0 . Если $(j-1)$ также является индексом белой стадии, то можно снова воспользоваться формулой (2.4), чтобы выписать представление для k_{j-1} . Продолжая эту рекурсивную подстановку, получим:

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = k_1^{(q)} \Big|_{h=0} + qf'(y_0) \sum_{k=1}^j \sum_{\xi=2}^j \gamma_{\xi,k}k_k^{(q-1)} \Big|_{h=0}, \quad (2.5)$$

где учтено, что $\gamma_{jk} = 0$ при $k > j$. Удобно ввести следующие коэффициенты:

$$\varphi_{jk} = \sum_{\xi=2}^j \gamma_{\xi,k}, \quad (2.6)$$

равные суммам коэффициентов γ_{ij} по белым столбцам соответствующей таблицы, причём $\varphi_{jk} = 0$ при $k > j$ в силу $\gamma_{\xi,k} = 0$ при $k > \xi$.

Тогда для белых стадий верно:

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = k_1^{(q)} \Big|_{h=0} + qf'(y_0) \sum_{k=1}^j \varphi_{jk}k_k^{(q-1)} \Big|_{h=0}, \quad (2.7)$$

производную любого порядка для k_1 можно получить из (2.3):

$$k_1^{(q)} \Big|_{h=0} = \left(f(y_0) \right)^{(q-1)} \Big|_{h=0} + qf'(y_0)\gamma_{11}k_1^{(q-1)} \Big|_{h=0}, \quad (2.8)$$

где $f(y_0)$ не зависит от h . Подставим это в (2.7), получим:

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = \left(f(y_0) \right)^{(q-1)} \Big|_{h=0} + qf'(y_0)(\gamma_{11} + \varphi_{j,1})k_1^{(q-1)} \Big|_{h=0} + \\ + qf'(y_0) \sum_{k=2}^j \varphi_{jk}k_k^{(q-1)} \Big|_{h=0}, \quad j \in M_{s,1}^{(1)}. \quad (2.9)$$

Полученные формулы не позволяют вывести аналогичный результат при $q = 0$, но из расчётных формул (2.1) легко видеть, что $k_j = 0$ при $j \geq 1$ и $h = 0$.

Формулы (2.8)–(2.9) вместе определяют производные величин k_j для всех значений индексов $j \in M_s$. Чтобы перейти к однородной записи, введём следующие величины:

$$\psi_{jk} = \begin{cases} \gamma_{11}, & j = 1, \quad k = 1, \\ \gamma_{11} + \varphi_{j1}, & j \in M_{s,p}^{(1)}, \quad k = 1, \\ \varphi_{jk}, & j \in M_{s,p}^{(1)}, \quad k \in M_{s,p}^{(1)}, \end{cases}$$

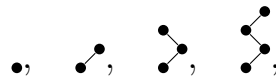
тогда единая форма записи для всех стадий $(s, 1)$ -метода имеет вид:

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = \left(f(y_0) \right)^{(q-1)} \Big|_{h=0} + q f'(y_0) \sum_{k=1}^j \psi_{jk} k_k^{(q-1)} \Big|_{h=0}, \quad j \in M_s. \quad (2.10)$$

Последовательно подставляя $q = \overline{1, 4}$ в формулу (2.10), получим выражения для производных наклонов промежуточных стадий:

$$\begin{aligned} k_j^{(1)} \Big|_{h=0} &= f(y_0), \\ k_j^{(2)} \Big|_{h=0} &= 2f'(y_0)f(y_0) \sum_{k=1}^j \psi_{jk}, \\ k_j^{(3)} \Big|_{h=0} &= 6f'(y_0)f'(y_0)f(y_0) \sum_{k,l} \psi_{jk}\psi_{kl}, \\ k_j^{(4)} \Big|_{h=0} &= 24f'(y_0)f'(y_0)f'(y_0)f(y_0) \sum_{k,l,m} \psi_{jk}\psi_{kl}\psi_{lm}. \end{aligned}$$

Видно, что представленные выражения соответствуют стандартным «высоким» корневым деревьям



поэтому, продолжая этот процесс далее, получим выражения для наклонов $k_j^{(q)}$ белых стадий, содержащие элементарные дифференциалы [1, §II.2], соответствующие только «высоким» деревьям вида

$$\hat{\tau}_q = \underbrace{[\dots [\bullet] \dots]}_{(q-1) \text{ пар скобок}},$$

где $[]$ — стандартное произведение деревьев Бутчера ([1, §II.2], [19, §III.1], [20, глава 30]).

Таким образом, доказано

Утверждение 1. Производные k_j промежуточных стадий $(s, 1)$ -метода удовлетворяют равенству

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = \gamma(\hat{\tau}_q) \Psi_j(\hat{\tau}_q) \mathcal{F}(\hat{\tau}_q)(y_0), \quad (2.11)$$

и для численного решения справедлива формула

$$y_1^{(q)} \Big|_{h=0} = \gamma(\hat{\tau}_q) \sum_{j=1}^s b_j \Psi_j(\hat{\tau}_q) \mathcal{F}(\hat{\tau}_q)(y_0), \quad (2.12)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma(\hat{\tau}_q) &= q!, \\ \Psi_j(\hat{\tau}_q) &= \begin{cases} \sum_{k=1}^j \psi_{jk} \Psi_k(\hat{\tau}_{q-1}), & \text{если } \hat{\tau}_q = [\hat{\tau}_{q-1}], \\ 1, & \text{если } \hat{\tau}_q = \bullet, \end{cases} \\ \mathcal{F}(\hat{\tau}_q)(y_0) &= \underbrace{f'(y_0) \cdot \dots \cdot f'(y_0)}_{(q-1) \text{ сомножителей}} f(y_0). \end{aligned}$$

Из полученного результата сразу вытекают условия порядка в традиционной форме [1, §II.2], а также известный результат [16], состоящий в том, что $(s, 1)$ -методы не могут иметь порядок аппроксимации выше второго, поскольку разложение (2.12) содержит в себе элементарные дифференциалы, соответствующие только «высоким» корневым деревьям. При этом в разложении точного решения присутствуют элементарные дифференциалы, соответствующие всевозможным корневым деревьям.

Пример 2. Применим полученное утверждение для вывода условий второго порядка для $(2, 1)$ -метода. Из [1, §II.2] известно, что условия порядка q имеют вид:

$$\sum_{j=1}^s b_j \Phi_j(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)},$$

для всех деревьев τ порядка не выше q . Здесь $\Phi_j(\tau)$ — элементарный вес, а $\gamma(\tau)$ — функция факториала, обобщённая на класс корневых деревьев (см. [1, §II.2]). Заметим, что функция $\Psi_j(\tau)$ из утверждения 1 как раз и является элементарным весом.

Свободными коэффициентами $(2, 1)$ -метода являются $\gamma_{11}, \gamma_{21}, \gamma_{22}$ и b_1, b_2 . Согласно формулировке утверждения 1 необходимо вычислить коэффициенты $\psi_{11}, \psi_{21}, \psi_{22}$:

$$\begin{aligned} \psi_{11} &= \gamma_{11}, \\ \psi_{21} &= \gamma_{11} + \gamma_{21}, \\ \psi_{22} &= \gamma_{22}. \end{aligned}$$

Выпишем условия порядка для деревьев $\hat{\tau}_1 = \bullet$ и $\hat{\tau}_2 = \bullet \circ$:

$$\begin{aligned}\hat{\tau}_1 : \sum_{j=1}^2 b_j \Psi_j(\hat{\tau}_1) &= b_1 + b_2 = 1, \\ \hat{\tau}_2 : \sum_{j=1}^2 b_j \Psi_j(\hat{\tau}_2) &= b_1 \psi_{11} + b_2(\psi_{21} + \psi_{22}) = 1/2.\end{aligned}$$

Расписывая ψ_{jk} через коэффициенты γ_{jk} , получим систему

$$b_1 + b_2 = 1, \quad (2.13a)$$

$$b_1 \gamma_{11} + b_2(\gamma_{11} + \gamma_{21} + \gamma_{22}) = 1/2, \quad (2.13b)$$

которая при $\gamma_{11} = \gamma_{22} = \gamma$ и $\gamma_{21} = 0$ совпадает с условиями, полученными в работе [16], а в общем случае расширяет их.

3. Двухполосный случай

В предыдущем разделе получены условия порядка для $(s, 1)$ -метода, в котором только одна — первая — стадия является чёрной, а все последующие — белые. Рассмотрим более общий случай: пусть в (s, p) -методе чёрными являются первые n_1 стадий, а последующие w_1 стадий — белые, поэтому в таблицах коэффициентов, согласно терминологии раздела 1, имеется только две различимых полосы: чёрная и следующая за ней белая. Вектор, задающий раскраску таблиц коэффициентов, есть (n_1, w_1) . Рассмотрим вывод условий порядка для данного двухполосного случая.

Предварительные рассуждения. Согласно формулам (2.1), определяющим упрощённый (s, p) -метод, первые n_1 стадий метода являются стадиями классического метода Розенброка, для которых известен следующий результат [2, §IV.7]:

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = \sum_{\tau \in T_q} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \Phi_j^{(0)}(\tau) \mathcal{F}(\tau)(y_0), \quad j \in M_{s,p}^{(0)}, \quad (3.1)$$

где T_q — множество всех корневых деревьев порядка q , $\alpha(\tau)$ — количество всех монотонных индексаций дерева τ , $\gamma(\tau)$ — обобщение факториала для корневых деревьев, $\mathcal{F}(\tau)(y_0)$ — соответствующий дереву τ элементарный дифференциал, вычисленный на значении y_0 .

Здесь

$$\Phi_j^{(0)}(\tau) = \begin{cases} \sum_{k_1, \dots, k_m} \alpha_{jk_1} \Phi_{k_1}^{(0)}(\tau_1) \cdot \dots \cdot \alpha_{jk_m} \Phi_{k_m}^{(0)}(\tau_m), & \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m], m \geq 2, \\ \sum_k \beta_{jk} \Phi_k^{(0)}(\tau_1), & \tau = [\tau_1], \end{cases}$$

— элементарный вес, где $\beta_{jk} = \alpha_{jk} + \gamma_{jk}$, определённый на множестве T всевозможных корневых деревьев:

$$T = \bigcup_{q=1}^{\infty} T_q.$$

Для единичного дерева вес определяется естественным образом:

$$\Phi_j^{(0)}(\bullet) = 1.$$

Представленные формулы определяют значения производных k_j и элементарного веса $\Phi_j^{(0)}$ для всех чёрных стадий (т.е. только при $j \in M_{s,p}^{(0)}$). Чтобы получить аналогичные результаты для белых стадий (т.е. при $j \in M_{s,p}^{(1)}$), вернёмся к формуле Лейбница (2.4):

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = k_{j-1}^{(q)} \Big|_{h=0} + qf'(y_0) \sum_{k=1}^j \gamma_{jk} k_k^{(q-1)} \Big|_{h=0}, \quad j \in M_{s,p}^{(1)}. \quad (2.4)$$

Повторяя, как и в предыдущем разделе при выводе формулы (2.5), спуск до первой чёрной стадии, получим:

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = k_{\eta(j)}^{(q)} \Big|_{h=0} + qf'(y_0) \sum_{k=1}^j \sum_{\xi=\eta(j)+1}^j \gamma_{\xi,k} k_k^{(q-1)} \Big|_{h=0}, \quad j \in M_{s,p}^{(1)},$$

где $\eta(j)$ — функция, определённая только на индексах из $M_{s,p}^{(1)}$, которая возвращает номер последней чёрной стадии, выполненной до текущей белой с индексом j :

$$\eta(j) = \max\{i \in M_{s,p}^{(0)} : i < j\}. \quad (3.2)$$

Тогда допустимо обобщить определение (2.6) на двухполосный случай:

$$\varphi_{jk} = \sum_{\xi=\eta(j)+1}^j \gamma_{\xi,k}, \quad (3.3)$$

которое совпадает с (2.6) при $M_{s,p}^{(0)} = \{1\}$. Получим выражение для производных белых стадий в привычной форме:

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = k_{\eta(j)}^{(q)} \Big|_{h=0} + qf'(y_0) \sum_{k=1}^j \varphi_{jk} k_k^{(q-1)} \Big|_{h=0}, \quad j \in M_{s,p}^{(1)}. \quad (3.4)$$

В формуле (3.4) выразим $k_{\eta(j)}^{(q)}$ с помощью (3.1):

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = \sum_{\tau \in T_q} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau) \mathcal{F}(\tau)(y_0) + qf'(y_0) \sum_{k=1}^j \varphi_{jk} k_k^{(q-1)} \Big|_{h=0}, \quad j \in M_{s,p}^{(1)}. \quad (3.5)$$

Исследуем полученную формулу: для этого последовательно подставим в (3.5) $q = 0, 1, 2, 3$ и проведём некоторые алгебраические преобразования, чтобы вывести общее определение элементарного веса $\Phi_j^{(1)}(\tau)$ на множестве индексов белых стадий ($j \in M_{s,p}^{(1)}$).

Случай $q = 0$. Как и для $(s, 1)$ -метода при $q = 0$, величины $k_j = 0$ при $h = 0$.

Случай $q = 1$. В силу равенства $k_j|_{h=0} = 0$ формула (3.5) при $q = 1$ приобретает вид:

$$\begin{aligned} k_j^{(1)}|_{h=0} &= \sum_{\tau \in T_1} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau) \mathcal{F}(\tau)(y_0) = \\ &= \alpha(\bullet) \gamma(\bullet) \Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\bullet) \mathcal{F}(\bullet)(y_0) = f(y_0), \quad j \in M_{s,p}^{(1)}, \end{aligned}$$

— на основе полученного результата естественно положить $\Phi_j^{(1)}(\bullet) = 1$.

Случай $q = 2$. В данном случае сумма с коэффициентами φ_{jk} отлична от нуля:

$$\begin{aligned} k_j^{(2)}|_{h=0} &= \sum_{\tau \in T_2} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau) \mathcal{F}(y_0) + 2f'(y_0) \sum_{k=1}^j \varphi_{jk} k_k^{(1)}|_{h=0} = \\ &= 2f'(y_0) f(y_0) \left(\sum_{k=1}^{\eta(j)} \beta_{\eta(j),k} + \sum_{k=1}^j \varphi_{jk} \right) = \\ &= 2f'(y_0) f(y_0) \left(\sum_{k=1}^{\eta(j)} \beta_{\eta(j),k} + \sum_{k=1}^{\eta(j)} \varphi_{jk} + \sum_{k=\eta(j)+1}^j \varphi_{jk} \right) = \\ &= 2f'(y_0) f(y_0) \left(\sum_{k=1}^{\eta(j)} (\beta_{\eta(j),k} + \varphi_{jk}) + \sum_{k=\eta(j)+1}^j \varphi_{jk} \right) = \\ &= 2f'(y_0) f(y_0) \left(\sum_{k=1}^{\eta(j)} (\beta_{\eta(j),k} + \varphi_{jk}) \Phi_k^{(0)}(\bullet) + \sum_{k=\eta(j)+1}^j (\beta_{\eta(j),k} + \varphi_{jk}) \Phi_k^{(1)}(\bullet) \right), \end{aligned}$$

где в последнем равенстве использовано $\beta_{jk} = 0$ при $k > j$. Поскольку в последнем выражении $j \in M_{s,p}^{(1)}$, определим значение элементарного веса

$$\Phi_j^{(1)}(\bullet) = \sum_{k=1}^{\eta(j)} (\beta_{\eta(j),k} + \varphi_{jk}) \Phi_k^{(0)}(\bullet) + \sum_{k=\eta(j)+1}^j (\beta_{\eta(j),k} + \varphi_{jk}) \Phi_k^{(1)}(\bullet), \quad j \in M_{s,p}^{(1)},$$

из чего вытекает равенство

$$k_j^{(2)}|_{h=0} = \alpha(\bullet) \gamma(\bullet) \Phi_j^{(1)}(\bullet) \mathcal{F}(\bullet)(y_0), \quad j \in M_{s,p}^{(1)}.$$

Случай $q = 3$. По сравнению с двумя предыдущими случаями, при $q = 3$ во множестве T_q содержится больше одного элемента (в выражении ниже у всех элементарных дифференциалов опущен аргумент y_0):

$$\begin{aligned}
k_j^{(3)} \Big|_{h=0} &= \sum_{\tau \in T_3} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau) \mathcal{F}(\tau)(y_0) + 3f'(y_0) \sum_{k=1}^j \varphi_{jk} k_k^{(2)} \Big|_{h=0} = \\
&= 3\Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\mathcal{V}) f''(f, f) + 6\Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\mathcal{L}) f' f' f + 3 \sum_{k=1}^j \varphi_{jk} f' k_k^{(2)} \Big|_{h=0} = \\
&= 3\Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\mathcal{V}) f''(f, f) + 6 \sum_{k=1}^{\eta(j)} \beta_{\eta(j),k} \Phi_k^{(0)}(\mathcal{L}) f' f' f + \\
&+ 6 \sum_{k=1}^{\eta(j)} \varphi_{jk} \Phi_k^{(0)}(\mathcal{L}) f' f' f + 6 \sum_{k=\eta(j)+1}^j \varphi_{jk} \Phi_k^{(1)}(\mathcal{L}) f' f' f = \\
&= 3\Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\mathcal{V}) f''(f, f) + \\
&+ 6f' f' f \left(\sum_{k=1}^{\eta(j)} (\beta_{\eta(j),k} + \varphi_{jk}) \Phi_k^{(0)}(\mathcal{L}) + \sum_{k=\eta(j)+1}^j (\beta_{\eta(j),k} + \varphi_{jk}) \Phi_k^{(1)}(\mathcal{L}) \right).
\end{aligned}$$

Замечание 3. В полученном представлении для $k_j^{(3)} \Big|_{h=0}$ видно, что по сравнению с представлением (3.1), член, соответствующий «одноногому» корневому дереву \mathcal{L} , имеет иные элементарные веса. В то же время член, соответствующий дереву \mathcal{V} , имеет тот же элементарный вес, что и чёрная стадия перед ним. Это позволяет сформулировать следующее

Утверждение 2. В случае двухполосной раскраски таблиц коэффициентов упрощённого (s, p) -метода (2.1) для численного решения верно

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = \sum_{\tau \in T_q} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \Phi_j(\tau) \mathcal{F}(\tau)(y_0), \quad (3.6)$$

где элементарный вес $\Phi_j(\tau)$ определяется не только видом дерева τ , но и множеством, в котором находится индекс j :

$$\Phi_j(\tau) = \begin{cases} \Phi_j^{(0)}(\tau), & \text{если } j \in M_{s,p}^{(0)}, \\ \Phi_j^{(1)}(\tau), & \text{если } j \in M_{s,p}^{(1)}. \end{cases} \quad (3.7)$$

Веса $\Phi_j^{(i)}(\tau)$, $i = 0, 1$ определяются по формулам:

$$\Phi_j^{(0)}(\tau) = \begin{cases} \sum_{k_1, \dots, k_m} \alpha_{jk_1} \Phi_{k_1}^{(0)}(\tau_1) \cdot \dots \cdot \alpha_{jk_m} \Phi_{k_m}^{(0)}(\tau_m), & \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m], m \geq 2, \\ \sum_k \beta_{jk} \Phi_k^{(0)}(\tau_1), & \tau = [\tau_1], \end{cases} \quad (3.8)$$

— известный вес из разложения численного решения метода Розенброка;

$$\Phi_j^{(1)}(\tau) = \begin{cases} \Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau), & \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m], m \geq 2, \\ \sum_k (\beta_{\eta(j),k} + \varphi_{jk}) \Phi_k(\tau_1), & \tau = [\tau_1], \end{cases} \quad (3.9)$$

— отдельный вид веса, принимающий новые значения только на деревьях вида $\tau = [\tau_1]$, где функция $\eta(j)$ и коэффициенты φ_{jk} определяются по формулам (3.2) и (3.3) соответственно.

Очевидно, что полученные выше представления для $k_j^{(q)}$ при $q = 0, 1, 2, 3$ полностью соответствуют сформулированному утверждению. Легко показать, что при $q = 4$ утверждение также остаётся в силе.

Поскольку первые чёрные стадии упрощённого (s, p) -метода фактически являются стадиями метода Розенброка, доказательство формулы (3.8) для них не требуется (см. [2, §IV.7]). Поэтому остаётся провести доказательство формулы (3.9) для белых стадий.

Доказательство. Докажем утверждение индукцией по порядку ρ дерева. Допустим, что утверждение выполнено для всех деревьев порядка $q \leq \rho - 1$, тогда, используя формулу Лейбница (3.4) при $q = \rho$, получим:

$$\begin{aligned} k_j^{(\rho)} \Big|_{h=0} &= k_{\eta(j)}^{(\rho)} \Big|_{h=0} + \rho f'(y_0) \sum_{k=1}^j \varphi_{jk} k_k^{(\rho-1)} \Big|_{h=0} = \\ &= \sum_{\tau \in T_\rho} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \Phi_{\eta(j)}(\tau) \mathcal{F}(\tau)(y_0) + \rho \sum_{k=1}^j \varphi_{jk} f'(y_0) k_k^{(\rho-1)} \Big|_{h=0} = \\ &= \sum_{\tau \in T_\rho} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau) \mathcal{F}(\tau)(y_0) + \\ &\quad + \rho \sum_{\tau_1 \in T_{\rho-1}} \alpha(\tau_1) \gamma(\tau_1) \sum_{k=1}^j \varphi_{jk} \Phi_k(\tau_1) f'(y_0) \mathcal{F}(\tau_1)(y_0), \end{aligned}$$

где в последнем равенстве учтено, что $\eta(j) \in M_{s,p}^{(0)}$ и что утверждение верно при $q \leq \rho - 1$.

Заметим, что для дерева τ_1 порядка $\rho - 1$

$$\begin{aligned}\rho\gamma(\tau_1) &= \gamma([\tau_1]), \\ f'(y_0)\mathcal{F}(\tau_1)(y_0) &= \mathcal{F}([\tau_1])(y_0), \\ \alpha(\tau_1) &= \alpha([\tau_1]),\end{aligned}$$

последнее равенство имеет место в силу того, что «прививка» существующего дерева τ_1 к новому корню не меняет количества монотонных индексаций дерева. Тогда

$$\begin{aligned}k_j^{(\rho)}\Big|_{h=0} &= \sum_{\tau \in T_\rho} \alpha(\tau)\gamma(\tau)\Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau)\mathcal{F}(\tau)(y_0) + \\ &+ \sum_{\tau_1 \in T_{\rho-1}} \alpha([\tau_1])\gamma([\tau_1]) \sum_{k=1}^j \varphi_{jk}\Phi_k(\tau_1)\mathcal{F}([\tau_1])(y_0).\end{aligned}$$

Для дальнейших выкладок удобно ввести следующее обозначение

$$P_\rho = \{\tau \in T_\rho : \tau = [\tau_1], \tau_1 \in T_{\rho-1}\},$$

т.е. P_ρ — это множество всех одноногих деревьев порядка ρ . Тогда множество T_ρ всех корневых деревьев порядка ρ можно разбить на два непересекающихся подмножества:

$$\begin{aligned}k_j^{(\rho)}\Big|_{h=0} &= \sum_{\tau \in T_\rho \setminus P_\rho} \alpha(\tau)\gamma(\tau)\Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau)\mathcal{F}(\tau)(y_0) + \sum_{\tau \in P_\rho} \alpha(\tau)\gamma(\tau)\Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau)\mathcal{F}(\tau)(y_0) + \\ &+ \sum_{\tau_1 \in T_{\rho-1}} \alpha([\tau_1])\gamma([\tau_1]) \sum_{k=1}^j \varphi_{jk}\Phi_k(\tau_1)\mathcal{F}([\tau_1])(y_0) = \\ &= \sum_{\tau \in T_\rho \setminus P_\rho} \alpha(\tau)\gamma(\tau)\Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau)\mathcal{F}(\tau)(y_0) + \\ &+ \sum_{\tau_1 \in T_{\rho-1}} \alpha([\tau_1])\gamma([\tau_1]) \sum_{k=1}^{\eta(j)} \beta_{\eta(j),k}\Phi_j^{(0)}(\tau_1)\mathcal{F}([\tau_1])(y_0) + \\ &+ \sum_{\tau_1 \in T_{\rho-1}} \alpha([\tau_1])\gamma([\tau_1]) \sum_{k=1}^j \varphi_{jk}\Phi_k(\tau_1)\mathcal{F}([\tau_1])(y_0) = \\ &= \sum_{\tau \in T_\rho \setminus P_\rho} \alpha(\tau)\gamma(\tau)\Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau)\mathcal{F}(\tau)(y_0) + \\ &+ \sum_{\tau_1 \in T_{\rho-1}} \alpha([\tau_1])\gamma([\tau_1]) \sum_{k=1}^j (\beta_{\eta(j),k} + \varphi_{jk})\Phi_k(\tau_1)\mathcal{F}([\tau_1])(y_0),\end{aligned}$$

в последнем равенстве использовано свойство коэффициентов β_{jk} и уже описанный приём по разделению суммы по k на суммы по чёрным и белым стадиям. Согласно (3.9)

$$\Phi_j([\tau_1]) = \sum_{k=1}^j (\beta_{\eta(j),k} + \varphi_{jk}) \Phi_k(\tau_1),$$

поэтому, если перейти в последней сумме от множества $T_{\rho-1}$ обратно ко множеству P_ρ , получим, что утверждение выполнено при $q = \rho$. Утверждение доказано. \square

Замечание 4. Согласно (3.9), элементарный вес $\Phi_j^{(1)}(\tau)$ для деревьев с ветвлением у корня является *точно таким же*, как и вес $\Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau)$ на последней до них чёрной стадии. В случае же одноногих деревьев вида $\tau = [\tau_1]$ элементарный вес $\Phi_j^{(1)}$ зависит от коэффициентов φ_{jk} .

Таким образом, на основе (3.8) можно заключить, что необходимым условием для достижения упрощённым (s, p) -методом порядка аппроксимации выше второго (в двухполосном случае) является наличие не менее двух чёрных стадий. Поэтому, например, $(s, 1)$ -методы, как показано выше, имеют порядок не выше второго, т.к. в них $\alpha_{jk} = 0$, и поэтому элементарные веса $\Phi_j^{(0)}(\tau)$ на деревьях с ветвлениями у корня равны нулю.

4. Трёхполосный случай

В предыдущем разделе рассмотрена ситуация, когда в соответствующих таблицах коэффициентов имеется ровно две различных по цвету полосы. Идейно доказательство утверждения 2 можно интерпретировать как «переход из чёрного в белое». Следующий шаг — это рассмотрение «перехода из белого в чёрное», что приводит к варианту трёхполосного упрощённого (s, p) -метода.

Имеет место следующее

Утверждение 3. *Утверждение 2 истинно в трёхполосном случае, если в формуле (3.8) заменить вес $\Phi_j^{(0)}(\tau)$ на $\Phi_j(\tau)$, определяемый формулой (3.7).*

Согласно определению 3, раскраска таблицы коэффициентов задаётся вектором (n_1, w_1, n_2) . Таким образом, множества $M_{s,p}^{(0)}$ и $M_{s,p}^{(1)}$ можно представить в виде $M_{s,p}^{(0)} = M_1 \cup M_3$, $M_{s,p}^{(1)} = M_2$, где

$$\begin{aligned} M_1 &= \{1, \dots, n_1\}, \\ M_2 &= \{n_1 + 1, \dots, n_1 + w_1\}, \\ M_3 &= \{n_1 + w_1 + 1, \dots, n_1 + w_1 + n_2\}. \end{aligned}$$

Видно, что доказательство утверждения для множеств M_1 и M_2 совпадает с доказательством утверждения 2, поэтому остаётся доказать утверждение для множества индексов M_3 , т.е. для всех $j \in M_{s,p}^{(0)}$, попавших во вторую чёрную полосу. Для доказательства потребуется следующая

Лемма 4 (формула Фаа ди Бруно [1, §II.2], [21]). Пусть f — вектор-функция векторного аргумента вида $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, а g — векторная функция скалярного аргумента h вида $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$. Тогда для функции $f \circ g$ верно

$$\left. \frac{d^{k-1}}{dh^{k-1}} f(g(h)) \right|_{h=0} = \sum_{\substack{u \in S_k \\ u = [\hat{\tau}_1, \dots, \hat{\tau}_m]}} \alpha(u) f^{(m)}(g(0)) (g^{(\delta_1)}(0), \dots, g^{(\delta_m)}(0)), \quad (4.1)$$

где S_k — множество всевозможных корневых деревьев порядка k , имеющих ветвление только у корня, а m — натуральное число такое, что

$$u = [\hat{\tau}_1, \dots, \hat{\tau}_m], \quad |\hat{\tau}_i| = \delta_i, \quad |u| = 1 + \sum_{i=1}^m \delta_i,$$

где $|\tau|$ — порядок дерева τ , а $\hat{\tau}_i$, $i = \overline{1, m}$ — высокие деревья порядка δ_i , не имеющие точек ветвления.

Доказательство утверждения 3. Непосредственным вычислением можно показать, что утверждение истинно при $q = 1, 2, 3$. Поэтому докажем утверждение индукцией по порядку q дерева τ при фиксированном $j \in M_3$.

Согласно формулам (2.1) упрощённого (s, p) -метода при $j \in M_3$ имеем:

$$g_j = y_0 + \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{jk} k_k, \quad j \in M_3,$$

$$k_j = hf(g_j) + hJ \sum_{k=1}^j \gamma_{jk} k_k, \quad j \in M_3.$$

Применяя формулу Лейбница (2.2) при $q = \rho$ к выписанным формулам, получим:

$$\begin{aligned} k_j^{(\rho)} \Big|_{h=0} &= \rho \frac{d^{\rho-1}}{dh^{\rho-1}} f(g_j(h)) \Big|_{h=0} + \rho \sum_{k=1}^j \gamma_{jk} f'(y_0) k_j^{(\rho-1)} \Big|_{h=0} = \\ &= \rho \sum_{\substack{u \in S_\rho \\ u = [\hat{\tau}_1, \dots, \hat{\tau}_m]}} \alpha(u) f^{(m)}(g_j|_{h=0}) \left(g_j^{(\delta_1)} \Big|_{h=0}, g_j^{(\delta_2)} \Big|_{h=0}, \dots, g_j^{(\delta_m)} \Big|_{h=0} \right) + \\ &\quad + \rho \sum_{k=1}^j \gamma_{jk} f'(y_0) k_j^{(\rho-1)} \Big|_{h=0}, \end{aligned}$$

что верно в силу формулы Фаа ди Бруно (4.1). Из формул для g_j следует, что

$$g_j^{(\delta)} = \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{jk} k_k^{(\delta)}$$

верно при любых δ и j . Воспользуемся этой формулой и тем, что $g_j(0) = y_0$, получим:

$$\begin{aligned} k_j^{(\rho)} \Big|_{h=0} &= \rho \sum_{\substack{u \in S_\rho \\ u = [\hat{\tau}_1, \dots, \hat{\tau}_m]}} \alpha(u) \sum_{k_1, \dots, k_m} \alpha_{j, k_1} \cdot \dots \cdot \alpha_{j, k_m} \times \\ &\quad \times f^{(m)}(y_0) \left(k_{k_1}^{(\delta_1)} \Big|_{h=0}, k_{k_2}^{(\delta_2)} \Big|_{h=0}, \dots, k_{k_m}^{(\delta_m)} \Big|_{h=0} \right) + \\ &\quad + \rho \sum_{k=1}^j \gamma_{jk} f'(y_0) k_j^{(\rho-1)} \Big|_{h=0}. \end{aligned}$$

Теперь, поскольку $u \in S_\rho$, то $\delta_i \leq |u| - 1 = \rho - 1$, $i = \overline{1, m}$. Поэтому для всех k_i в представленной формуле допустимо воспользоваться предположением индукции:

$$\begin{aligned} k_j^{(\rho)} \Big|_{h=0} &= \rho \sum_{\substack{u \in S_\rho \\ u = [\hat{\tau}_1, \dots, \hat{\tau}_m]}} \alpha(u) \sum_{\tau_1 \in T_{\delta_1}} \dots \sum_{\tau_m \in T_{\delta_m}} \alpha(\tau_1) \cdot \dots \cdot \alpha(\tau_m) \times \\ &\quad \times \gamma(\tau_1) \cdot \dots \cdot \gamma(\tau_m) \sum_{k_1, \dots, k_m} \alpha_{j, k_1} \Phi_{k_1}(\tau_1) \cdot \dots \cdot \alpha_{j, k_m} \Phi_{k_m}(\tau_m) \times \\ &\quad \times f^{(m)}(y_0) (\mathcal{F}(\tau_1)(y_0), \dots, \mathcal{F}(\tau_m)(y_0)) + \\ &\quad + \rho \sum_{k=1}^j \gamma_{jk} f'(y_0) \sum_{\sigma \in T_{\rho-1}} \alpha(\sigma) \gamma(\sigma) \Phi_k(\sigma) \mathcal{F}(\sigma)(y_0). \end{aligned}$$

Необходимо отметить, что в первой из представленных сумм деревья τ_i , $i = \overline{1, m}$ отличны от высоких деревьев $\hat{\tau}_i$, $i = \overline{1, m}$, поскольку находятся в соответствующих классах T_{δ_i} , $i = \overline{1, m}$ произвольных деревьев порядка δ_i .

Затем необходимо использовать свойства функции $\gamma(\tau)$ и элементарных дифференциалов $\mathcal{F}(\tau)(y_0)$:

$$\begin{aligned} \rho \gamma(\tau_1) \cdot \dots \cdot \gamma(\tau_m) &= \gamma([\tau_1, \dots, \tau_m]), \\ f^{(m)}(y_0) (\mathcal{F}(\tau_1)(y_0), \dots, \mathcal{F}(\tau_m)(y_0)) &= \mathcal{F}([\tau_1, \dots, \tau_m])(y_0). \end{aligned}$$

Далее, как и при доказательстве аналогичного результата для численного решения метода Рунге–Кутты в [1, §II.2], каждому набору $(u, \tau_1, \dots, \tau_m)$,

где $u \in S_\rho$, а τ_i — произвольные деревья порядка δ_i , ставится во взаимно-однозначное соответствие дерево $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_m] \in T_\rho$ такое, что

$$\alpha(\tau) = \alpha(u)\alpha(\tau_1) \cdot \dots \cdot \alpha(\tau_m),$$

поэтому

$$\begin{aligned} k_j^{(\rho)} \Big|_{h=0} &= \sum_{\tau \in T_\rho} \alpha(\tau)\gamma(\tau) \sum_{k_1, \dots, k_m} \alpha_{j, k_1} \Phi_{k_1}(\tau_1) \cdot \dots \cdot \alpha_{j, k_m} \Phi_{k_m}(\tau_m) \mathcal{F}(\tau)(y_0) + \\ &+ \rho \sum_{k=1}^j \gamma_{jk} f'(y_0) \sum_{\sigma \in T_{\rho-1}} \alpha(\sigma)\gamma(\sigma) \Phi_k(\sigma) \mathcal{F}(\sigma)(y_0). \end{aligned}$$

Для деревьев с ветвлением у корня утверждение фактически доказано, для одноногих деревьев необходимо повторить выкладки в правой сумме с разделением множества T_ρ на P_ρ и $T_\rho \setminus P_\rho$, из чего также сразу следует истинность утверждения для одноногих деревьев. Утверждение доказано полностью. \square

5. Четырёх- и пятиполосный случай

В предыдущих двух разделах доказаны результаты для таблиц коэффициентов с раскрасками из двух и трёх полос соответственно. Неформально стиль доказательства утверждений 2 и 3 может быть описан как «переход из чёрного в белое» и «переход из белого в чёрное» соответственно. На самом деле, этих результатов достаточно для доказательства аналога утверждения 2 в общем случае.

Действительно, при доказательстве утверждения 2 постулировалось, что разложение $k_j^{(q)}$ для первых чёрных стадий имеет вид (3.1), где вид веса $\Phi_j^{(0)}$ сначала не конкретизировался. Поэтому дополним утверждение 2 утверждением 3, заменим в формуле (3.9) вес $\Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau)$ на $\Phi_{\eta(j)}(\tau)$, определяемый (3.7), и будем считать, что результат доказан для первых трёх полос.

Тогда доказательство нового утверждения для четвёртой (т.е. второй белой) полосы будет полностью повторять последовательность рассуждений из доказательства утверждения 2 (с учётом указанных замен). Аналогичные рассуждения о замене $\Phi_j^{(0)}(\tau)$ на $\Phi_j(\tau)$ допустимы и при рассмотрении пятиполосного случая. Таким образом, обобщая утверждения 2 и 3 на случаи произвольного чётного и нечётного числа полос соответственно, получим общую теорему.

Теорема 5 (Производные численного решения упрощённого (s, p) -метода). *В случае двухцветной раскраски таблиц коэффициентов упрощённого (s, p) -метода (2.1) для численного решения верно*

$$k_j^{(q)} \Big|_{h=0} = \sum_{\tau \in T_q} \alpha(\tau)\gamma(\tau) \Phi_j(\tau) \mathcal{F}(\tau)(y_0), \quad (5.1)$$

где элементарный вес $\Phi_j(\tau)$ определяется не только видом дерева τ , но и множеством, в котором находится индекс j :

$$\Phi_j(\tau) = \begin{cases} \Phi_j^{(0)}(\tau), & \text{если } j \in M_{s,p}^{(0)}, \\ \Phi_j^{(1)}(\tau), & \text{если } j \in M_{s,p}^{(1)}. \end{cases} \quad (5.2)$$

Веса $\Phi_j^{(i)}(\tau)$, $i = 0, 1$ определяются по формулам:

$$\Phi_j^{(0)}(\tau) = \begin{cases} \sum_{k_1, \dots, k_m} \alpha_{jk_1} \Phi_{k_1}(\tau_1) \cdot \dots \cdot \alpha_{jk_m} \Phi_{k_m}(\tau_m), & \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m], m \geq 2, \\ \sum_k \beta_{jk} \Phi_k(\tau_1), & \tau = [\tau_1], \end{cases} \quad (5.3)$$

— для чёрных стадий,

$$\Phi_j^{(1)}(\tau) = \begin{cases} \Phi_{\eta(j)}(\tau), & \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m], m \geq 2, \\ \sum_k (\beta_{\eta(j),k} + \varphi_{jk}) \Phi_k(\tau_1), & \tau = [\tau_1], \end{cases} \quad (5.4)$$

— для белых стадий. Функция $\eta(j)$ и коэффициенты φ_{jk} определяются по формулам (3.2) и (3.3) соответственно. Для единичного дерева

$$\Phi_j(\bullet) = 1.$$

Замечание 5. Для непосредственного вывода условий порядка удобен следующий вариант формулы (5.4) для дерева $\tau = [\tau_1]$:

$$\Phi_j^{(1)}(\tau) = \Phi_{\eta(j)}^{(0)}(\tau) + \sum_k \varphi_{jk} \Phi_k(\tau_1).$$

Пример 3. Для иллюстрации полученных теоретических результатов рассмотрим упрощённый (s, p) -метод из [12, формула (24)] и выведем для него условия порядка, пользуясь теоремой 5. В обозначениях (2.1) расчётные формулы метода принимают вид:

$$y_1 = y_0 + \sum_{j=1}^7 b_j k_j, \quad (5.5a)$$

$$k_1 = hf(y_0) + \gamma h J k_1, \quad (5.5b)$$

$$k_i = k_{i-1} + \gamma h J k_i, \quad i = \overline{2, 4}, \quad (5.5c)$$

$$k_5 = hf(y_0 + \alpha k_1) + \gamma h J k_5, \quad (5.5d)$$

$$k_i = k_{i-1} + \gamma h J k_i, \quad i = \overline{6, 7}. \quad (5.5e)$$

Согласно принятой в разделе 1 терминологии, метод (5.5) является упрощённым $(7, 2)$ -методом с четырёхполосными таблицами коэффициентов. Множества $M_{7,2}^{(0)}$ и $M_{7,2}^{(1)}$ имеют вид:

$$M_{7,2}^{(0)} = \{1\} \cup \{5\}, \quad M_{7,2}^{(1)} = \{2, 3, 4\} \cup \{6, 7\}.$$

Из разложения (5.1) следует [1, §II.2], что упрощённый (s, p) -метод имеет порядок аппроксимации q тогда и только тогда, когда для всех деревьев τ вплоть до порядка q выполнено

$$\sum_{j=1}^s b_j \Phi_j(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)}. \quad (5.6)$$

В работе [12] для метода (5.5) получены условия порядка вплоть до четвёртого, поэтому последовательно определим значения веса (5.2) для всех деревьев τ порядка не выше четвёртого.

В таблицах 1–4 представлены коэффициенты α_{ij} , β_{ij} , γ_{ij} и φ_{ij} метода (5.5) соответственно, лежащие не выше диагонали (остальные коэффициенты равны нулю), чёрные строки символически обозначены серым цветом. Индекс i используется для нумерации строк, а j — для столбцов. Коэффициенты φ_{ij} для $i \in M_{7,2}^{(0)}$ в таблице 4 не представлены (используется знак \times), поскольку функция $\eta(i)$ определена только при $i \in M_{s,p}^{(1)}$.

Таблица 1. Таблица коэффициентов α_{ij}

0
0 0
0 0 0
0 0 0 0
α 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0

Таблица 2. Таблица коэффициентов γ_{ij}

γ
0 γ
0 0 γ
0 0 0 γ
0 0 0 0 γ
0 0 0 0 0 γ
0 0 0 0 0 0 γ

Таблица 3. Таблица коэффициентов β_{ij}

γ
0 γ
0 0 γ
0 0 0 γ
α 0 0 0 γ
0 0 0 0 0 γ
0 0 0 0 0 0 γ

Таблица 4. Таблица коэффициентов φ_{ij}

\times
0 γ
0 γ γ
0 γ γ γ
\times \times \times \times \times
0 0 0 0 0 γ
0 0 0 0 0 γ γ

Дерево $\tau_1 = \bullet$. Поскольку для элементарного дерева $\tau_1 = \bullet$ по определению $\Phi_j(\tau_1) = 1$, условие порядка (5.6) приобретает следующий вид:

$$\sum_{j=1}^7 b_j = 1. \quad (5.7)$$

Дерево $\tau_2 = \bullet \circ$. Используя формулы (5.2)–(5.4) и условие $\Phi_j(\bullet) = 1$, получим:

$$\begin{aligned} \Phi_1(\tau_2) &= \gamma, & \Phi_3(\tau_2) &= 3\gamma, & \Phi_4(\tau_2) &= 4\gamma, \\ \Phi_2(\tau_2) &= 2\gamma, & & & & \\ \Phi_5(\tau_2) &= \alpha + \gamma, & & & & \\ \Phi_6(\tau_2) &= \alpha + 2\gamma, & \Phi_7(\tau_2) &= \alpha + 3\gamma. & & \end{aligned}$$

Из этого следует, что условие порядка (5.6) для $\tau_2 = \bullet \circ$ приобретает вид:

$$b_1\gamma + 2b_2\gamma + 3b_3\gamma + 4b_4\gamma + b_5(\alpha + \gamma) + b_6(\alpha + 2\gamma) + b_7(\alpha + 3\gamma) = \frac{1}{2}. \quad (5.8)$$

Дерево $\tau_3 = \bullet \circ \circ$. Благодаря тому, что в таблице 1 первые четыре строки тождественно нулевые, а также тому, что в силу (5.4) элементарный вес для белой стадии совпадает с соответствующим весом предыдущей чёрной стадии, получим:

$$\begin{aligned} \Phi_1(\tau_3) &= 0, & \Phi_3(\tau_3) &= 0, & \Phi_4(\tau_3) &= 0, \\ \Phi_2(\tau_3) &= 0, & & & & \\ \Phi_5(\tau_3) &= \alpha^2, & & & & \\ \Phi_6(\tau_3) &= \alpha^2, & \Phi_7(\tau_3) &= \alpha^2. & & \end{aligned}$$

Условие порядка:

$$\alpha^2(b_5 + b_6 + b_7) = \frac{1}{3}. \quad (5.9)$$

Дерево $\tau_4 = \bullet \circ \circ \circ$. В данном случае необходимо воспользоваться уже известными результатами для τ_2 :

$$\begin{aligned} \Phi_1(\tau_4) &= \gamma^2, & \Phi_3(\tau_4) &= 6\gamma^2, & \Phi_4(\tau_4) &= 10\gamma^2, \\ \Phi_2(\tau_4) &= 3\gamma^2, & & & & \\ \Phi_5(\tau_4) &= (2\alpha + \gamma)\gamma, & & & & \\ \Phi_6(\tau_4) &= 3(\alpha + \gamma)\gamma, & \Phi_7(\tau_4) &= (4\alpha + 6\gamma)\gamma. & & \end{aligned}$$

Условие порядка:


$$\begin{aligned} b_1\gamma^2 + 3b_2\gamma^2 + 6b_3\gamma^2 + 10b_4\gamma^2 + \\ + b_5(2\alpha + \gamma)\gamma + 3b_6(\alpha + \gamma)\gamma + b_7(4\alpha + 6\gamma)\gamma = \frac{1}{6}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Дерево $\tau_5 =$ . По аналогии с деревом τ_3 получаем:

$$\begin{aligned}\Phi_1(\tau_5) &= 0, \\ \Phi_2(\tau_5) &= 0, & \Phi_3(\tau_5) &= 0, & \Phi_4(\tau_5) &= 0, \\ \Phi_5(\tau_5) &= \alpha^3, \\ \Phi_6(\tau_5) &= \alpha^3, & \Phi_7(\tau_5) &= \alpha^3.\end{aligned}$$

Условие порядка:


$$\alpha^3(b_5 + b_6 + b_7) = \frac{1}{4}. \quad (5.11)$$

Дерево $\tau_6 =$ . Из-за наличия ветвления у корня результаты схожи с предыдущими:

$$\begin{aligned}\Phi_1(\tau_6) &= 0, \\ \Phi_2(\tau_6) &= 0, & \Phi_3(\tau_6) &= 0, & \Phi_4(\tau_6) &= 0, \\ \Phi_5(\tau_6) &= \alpha^2\gamma, \\ \Phi_6(\tau_6) &= \alpha^2\gamma, & \Phi_7(\tau_6) &= \alpha^2\gamma.\end{aligned}$$

Условие порядка:


$$\alpha^2\gamma(b_5 + b_6 + b_7) = \frac{1}{8}. \quad (5.12)$$

Дерево $\tau_7 =$ . Аналогично:

$$\begin{aligned}\Phi_1(\tau_7) &= 0, \\ \Phi_2(\tau_7) &= 0, & \Phi_3(\tau_7) &= 0, & \Phi_4(\tau_7) &= 0, \\ \Phi_5(\tau_7) &= \alpha^2\gamma, \\ \Phi_6(\tau_7) &= 2\alpha^2\gamma, & \Phi_7(\tau_7) &= 3\alpha^2\gamma.\end{aligned}$$

Условие порядка:

$$\alpha^2\gamma(b_5 + 2b_6 + 3b_7) = \frac{1}{12}. \quad (5.13)$$

Дерево $\tau_8 =$ . Используя результаты для τ_4 , получим:

$$\begin{aligned}\Phi_1(\tau_8) &= \gamma^3, \\ \Phi_2(\tau_8) &= 4\gamma^3, & \Phi_3(\tau_8) &= 10\gamma^3, & \Phi_4(\tau_8) &= 20\gamma^3, \\ \Phi_5(\tau_8) &= (3\alpha + \gamma)\gamma^2, \\ \Phi_6(\tau_8) &= (6\alpha + 4\gamma)\gamma^2, & \Phi_7(\tau_8) &= 10(\alpha + \gamma)\gamma^2.\end{aligned}$$

Условие порядка:

$$\begin{aligned}b_1\gamma^3 + 4b_2\gamma^3 + 10b_3\gamma^3 + 20b_4\gamma^3 + \\ + b_5(3\alpha + \gamma)\gamma^2 + 2b_6(3\alpha + 2\gamma)\gamma^2 + 10b_7(\alpha + \gamma)\gamma^2 = \frac{1}{24}. \quad (5.14)\end{aligned}$$

Полученные условия порядка (5.7)–(5.14) с точностью до обозначений совпадают с условиями, полученными в [12, формула (26)].

Заключение

В работе представлено расширение теории корневых деревьев Бутчера для вывода условий порядка упрощённого (s, p) -метода. Введена новая терминология, согласно которой каждая из стадий метода наделена собственным цветом, что позволило упростить изложение и получить результаты в краткой форме. Показано, что доказательств утверждений 2 и 3 достаточно для доказательства теоремы 5 в общем виде. Полученные общие теоретические результаты согласуются с известными частными результатами, опубликованными ранее другими авторами.

Благодарности. Автор выражает искреннюю благодарность М.П. Галанину за ценные советы, рекомендации и поддержку.

Список литературы

- [1] *Hairer E., Nørsett S.P., Wanner G.* Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems. Berlin. Springer. 1993. 528 p. DOI:10.1007/978-3-540-78862-1
- [2] *Hairer E., Wanner G.* Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Berlin. Springer. 2010. 614 p. DOI:10.1007/978-3-642-05221-7
- [3] *Галанин М.П., Савенков Е.Б.* Методы численного анализа математических моделей. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана. 2010. 591 с.
- [4] *Butcher J.C.* Implicit Runge–Kutta processes //Math. Comp. 1964. V. 18. № 85. pp. 50–64. DOI:10.1090/S0025-5718-1964-0159424-9
- [5] *Новиков Е.А.* Явные методы для жестких систем. Новосибирск. Наука. Сиб. предприятие РАН. 1997. 195 с.
- [6] *Лебедев В.И.* Функциональный анализ и вычислительная математика. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2005. 296 с.
- [7] *Галанин М.П., Конев С.А.* О методе Лоусона и условиях жёсткого порядка для экспоненциальных методов. //Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018. № 261. 26 с. DOI:10.20948/prepr-2018-261
- [8] *Rosenbrock H.H.* Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations //The Comput. J. 1963. V. 5. № 4. pp. 329–330. DOI:10.1093/comjnl/5.4.329

- [9] *Rang J., John V.* Adaptive time step control for the incompressible Navier–Stokes equations // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2010. V. 199. 15 January 2010. pp. 514–524. DOI:10.1016/j.cma.2009.10.005
- [10] *Rang J.* Improved traditional Rosenbrock–Wanner methods for stiff ODEs and DAEs // J. Comput. and Appl. Math. 2015. V. 286. 1 October 2015. pp. 128–144. DOI:10.1016/j.cam.2015.03.010
- [11] *Новиков Е.А., Шитов Ю.А., Шокин Ю.И.* О классе (m, k) -методов решения жёстких систем // ЖВМ и МФ. 1989. Т. 29. № 2. с. 194–201. DOI:10.1016/0041-5553(89)90057-8
- [12] *Новиков Е.А.* Исследование $(m, 2)$ -методов решения жёстких систем // Вычислительные технологии. 2007. Т. 12. № 5. с. 103–113. URL: <http://www.ict.nsc.ru/jct/getfile.php?id=1035>
- [13] *Двинский А.Л., Новиков Е.А.* Аппроксимация матрицы Якоби в $(m, 3)$ -методах решения жёстких систем // Сиб. журн. вычисл. матем. 2008. Т. 11. № 3. с. 283–295. DOI:10.1134/S199542390803004X
- [14] *Новиков Е.А.* Численное моделирование модифицированного орегонатора $(2, 1)$ -методом решения жёстких задач // Выч. мет. программирование. 2010. Т. 11. № 3. с. 281–288. URL: <http://mi.mathnet.ru/vmp320>
- [15] *Новиков Е.А.* L -устойчивый $(4, 2)$ -метод четвертого порядка для решения жёстких задач // Вестн. СамГУ. Естественнонаучн. сер. 2011. Т. 89. № 8. с. 59–68. URL: <http://mi.mathnet.ru/vsgu124>
- [16] *Новиков Е.А.* Максимальный порядок точности $(m, 1)$ -методов решения жёстких задач // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. 2011. Т. 24. № 3. с. 100–107. DOI:10.14498/vsgtu920
- [17] *Новиков Е.А.* Численный метод третьего порядка для решения аддитивных неавтономных жёстких задач // Выч. мет. программирование. 2012. Т. 13. № 4. с. 479–490. URL: <http://mi.mathnet.ru/vmp54>
- [18] *Novikov A.E., Novikov E.A., Rybkov M.V.* An algorithm of variable structure based on three-stage explicit-implicit methods // Сиб. электрон. матем. изв. 2017. Т. 14. с. 433–442. DOI:10.17377/semi.2017.14.036
- [19] *Hairer E., Lubich C., Wanner G.* Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. Berlin, Heidelberg. Springer-Verlag. 2006. xvi+644 p. DOI:10.1007/3-540-30666-8
- [20] *Butcher J.C.* Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. Chichester. John Wiley & Sons, Ltd. 2016. xxiv+519 p. DOI:10.1002/9781119121534

[21] *Johnson W.P.* The Curious History of Faà di Bruno's Formula // Amer. Math. Month. 2002. V. 109. № 3. pp. 217–234. DOI:10.2307/2695352

Содержание

Введение	3
1. Основные определения	5
2. Упрощённый метод	7
3. Двухполосный случай	11
4. Трёхполосный случай	17
5. Четырёх- и пятиполосный случай	20
Заключение	25