УДК 519.6

О. А. ДМИТРИЕВА, Я. А. КУПРИЙ

Донецкий национальный технический университет, г. Донецк

ФОРМИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ ПОРЯДКА МЕТОДОВ РУНГЕ-КУТТЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ПОМЕЧЕННЫХ ДЕРЕВЬЕВ

Анотація. Теорія диференційних рівнянь відіграє істотну роль в процесі вивчення особливостей багатьох явищ та процесів. Створення ефективних алгоритмів розв'язання диференційних рівнянь є важливим питанням теорії динамічного моделювання та прикладного програмування. Використання методів високого порядку для розв'язання диференційних рівнянь є одним з методів підвищення точності та стійкості розв'язку.

У статті запропонований простий алгоритм, що дозволяє автоматизувати генерацію умов для визначення метода Рунге-Кутти довільного порядку. Алгоритм базується на використанні «помічених дерев» та ефективний для конструювання методів високого порядку.

Ключові слова: звичайне диференціальне рівняння, метод Рунге-Кутта, генерація методів, помічені дерева, методи високих порядків.

Аннотация. Теория дифференциальных уравнений играет существенную роль в процессе изучения особенностей многих явлений и процессов. Создание эффективных алгоритмов решения дифференциальных уравнений – важная задача теории динамического моделирования и прикладного программирования. Использование методов высоких порядков для решения дифференциальных уравнений является одним из способов повышения точности и устойчивости получаемого решения.

В данной статье предложен простой алгоритм, позволяющий автоматизировать генерацию определяющих условий для метода Рунге-Кутты произвольного порядка. Алгоритм основан на использовании «помеченных деревьев» и эффективен при конструировании методов Рунге-Кутты высоких порядков.

Ключевые слова: обыкновенное дифференциальное уравнение, метод Рунге-Кутта, генерация методов, помеченные деревья, методы высоких порядков.

Abstract. The theory of differential equation plays essential role in study of many processes and effects. Creation of effective algorithms of differential equations solving is important problem in theory of dynamic modeling and application programming. Using methods of high order for differential equation solving is a one way to increase precision and stability of solution.

At this article a method of 'rooted trees' for creating differential equation solvers of high order is considered as a way aiming at rising computational precision of differential equations.

Key words: ordinary differential equations, Runge-Kutta method, method designing, rooted trees, methods of high order.

Вступление

Использование методов высоких порядков для решения дифференциальных уравнений является одним из способов повышения точности и устойчивости получаемого решения. Однако конструирование методов Рунге-Кутты высоких порядков сопряжено со значительным объемом вычислений. Метод «помеченных деревьев» [1-4] упрощает формирование условий порядка метода. Поскольку с увеличением порядка метода число уравнений значительно возрастает, для эффективного конструирования методов Рунге-Кутты необходимо автоматическое формирование условий, определяющих метод.

В данной статье предложен простой алгоритм, позволяющий автоматизировать генерацию определяющих условий для метода Рунге-Кутты произвольного порядка. Алгоритм основан на использовании «помеченных деревьев» и эффективен при конструировании методов Рунге-Кутты высоких порядков. Особое внимание в статье уделяется способу представления деревьев в компьютерной программе.

Актуальность

Реальные динамические системы характеризуются большим числом параметров, что в значительной степени ограничивает точность их моделирования. Как правило, динамические модели, описывающие поведение реальных систем, учитывают только небольшое число наиболее существенных факторов.

С развитием информационных технологий, появлением и распространением параллельных компьютерных систем появилась возможность существенно ускорить вычисление математических задач, а значит, создавать более сложные модели. Необходимость разработки высокоточных алгоритмов решения дифференциальных уравнений обусловила актуальность задачи автоматической генерации методов решения дифференциальных уравнений высоких порядков.

Цель исследования

Целью данной статьи является изложение разработанного алгоритма автоматической генерации определяющих условий для метода Рунге-Кутты произвольного порядка.

Задачи исследования

1. Постановка задачи формирования определяющих условий для метода Рунге-Кутты с использованием метода «помеченных деревьев»;
2. Описание формы представления «помеченных деревьев» в программе;
3. Описание алгоритма автоматического формирования определяющих условий для метода Рунге-Кутты.

Постановка задачи

Рассмотрим обыкновенное дифференциальное уравнение (ОДУ) вида (1):

$$f\left(t, y, y', ..., y^{(m)}\right) = 0, \tag{1}$$

с начальными условиями (2):

$$\begin{gathered} y(t_0) = y_0, \\ y'(t_0) = y'_0, \\ ... \\ y^{(m-1)}(t_0) = y_0^{(m-1)}, \end{gathered} \tag{2}$$

где f – некоторая функция, связывающая независимую переменную t, искомую функцию y(t) и ее производные до m-го порядка включительно. Пусть u_t – приближенное решение задачи (1) в момент времени t.

Общий вид s-этапного метода Рунге-Кутты можно представить в виде матрицы коэффициентов (4) [5]:

$$\begin{aligned} & u_{n+1} = u_n + h \cdot \varphi_s(u_n, t_n, h) \\ & \varphi_s(u_n, t_n, h) = b_1 k_1 + b_2 k_2 + ... + b_s k_s \\ & k_s = f\left(t_n + c_s h, \quad u_n + a_{s,1} k_1 h + a_{s,2} k_2 h + ... + a_{s,s-1} k_{s-1} h\right), \end{aligned} \tag{3}$$

где a_{ij}, b_i, c_i – вещественные константы, определяющие метод.

Метод (3) также можно представить в виде матрицы коэффициентов (4):

$$\begin{array}{c|ccccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & ... & a_{1,s-1} & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & ... & a_{2,s-1} & a_{2s} \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & ... & a_{3,s-1} & a_{3s} \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & ... & a_{s,s-1} & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & ... & b_{s-1} & b_s \end{array} \tag{4}$$

При этом справедливо условие (5):

$$c_i = \sum_j a_{ij} \tag{5}$$

В случае если a_{ij}=0 для всех i≥j, то метод является явным, если a_{ij}=0 для всех i>j или хотя бы один элемент a_{ii}≠0, то метод – диагонально-неявный, во всех остальных случаях метод является неявным [2].

Условия порядка, позволяющие вычислить определяющие метод константы, формируются путем сопоставления рядов Тейлора для приближенного решения, определяемого формулой (3) и точного решения. Для этого необходимо вычислять производные u_{n+1} и k_i по h при h=0. С ростом порядка метода такие вычисления становятся все более трудоемкими. Метод «помеченных деревьев» представляет альтернативный вариант формирования определяющих условий.

Для определения метода порядка q необходимо сформировать все абстрактные (непомеченные) деревья порядка ≤ q. Каждое из таких деревьев tr определяет одно условие метода вида (6):

$$\Phi(tr) = \frac{1}{\gamma(tr)}, \tag{6}$$

где Φ(tr) – некоторая комбинация коэффициентов дерева tr;
γ(tr) – коэффициент, определяемый как произведение весовых коэффициентов вершин дерева.

Для определения коэффициента γ(tr) необходимо поставить в соответствие каждой вершине, являющейся «листом» дерева, весовой коэффициент, равный 1, а всем остальным вершинам – весовой коэффициент, равный сумме весов исходящих вершин плюс один. Тогда γ(tr) будет определяемый как произведение весовых коэффициентов вершин дерева.

Корню дерева в соответствие ставится весовой коэффициент b, листьям – коэффициенты c, а промежуточным вершинам – коэффициенты a. Количество узлов называется порядком дерева. Пример дерева изображен на рисунке 1.

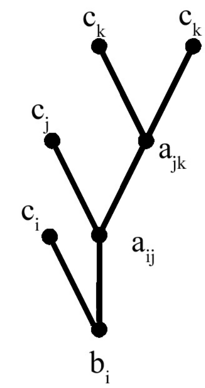


Рисунок 1. – Помеченное дерево порядка 7

Хотя использование метода «помеченных деревьев» значительно упрощает формирование условий порядка метода, его использование для генерации методов высоких порядков возможно только при условии автоматического формирования деревьев.

Представление деревьев в программе

Автоматическая генерация условий, определяющих порядок метода, предполагает разработку формы представления деревьев в программе. В статье [3] для представления деревьев порядка ≤10 используется последовательность цифр, каждая из которых соответствует вершине графа. Причем первая цифра соответствует корню дерева. Каждая вершина кодируется цифрой, соответствующей числу исходящих из нее ветвей. Для того чтобы обеспечить условие единственности всех деревьев, ветви в цифровом коде должны быть определенным образом упорядочены. А именно, первой ветвью выбирается та, у которой первая цифра ее кода наибольшая. При равенстве первых цифр сравниваются вторые, третьи и т.д.

Форма представления графов в данной статье не требует упорядочивания ветвей и подходит для генерации метода произвольного порядка.

Для генерации набора абстрактных деревьев произвольного порядка перейдем от индексов i, j, k, l,… к индексам i_1, i_2, i_3, i_4 и т.д., как на рисунке 2.

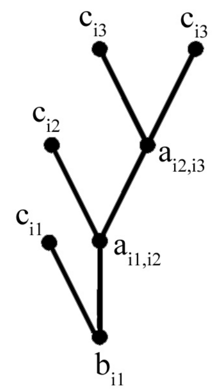


Рисунок 2. – Помеченное дерево порядка 7

Представим каждую вершину дерева в виде вектора (7):

$$v = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix}, \tag{7}$$

где v_1 – код типа узла: 1 – для корня b, 2 – для промежуточных вершин a, 3 – для листьев c;
v_2 – значение первого индекса узла;
v_3 – значение второго индекса узла ($v_3 = 0$ для вершин типа 1 и 3).

Таким образом, для представления дерева порядка q, будет использоваться матрица, размерностью 3 на q. Дерево, представленное на рисунках 1 и 2, будет задаваться матрицей (8):

$$tr = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 2 & 3 & 2 & 3 & 3 \\ 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 3 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \qquad (8)$$

Автоматическое формирование условий порядка

Генерация определяющих условий для метода порядка q состоит из следующих этапов:

Шаг 1. Задать начальное условие порядка $\Phi(tr_{1,1}) = \sum_i b_{i_1}$

Шаг 2. В цикле i = 2 до q выполнить следующие шаги:

Шаг 2.1. Используя все уже сформированные деревья порядка j от 1 до i-1. сформировать все возможные наборы абстрактных деревья с общим порядком (количеством узлов), равным j-1.

Шаг 2.2. Деревья внутри каждого набора объединить путем добавления общего корня.

Для формирования функции Φ(tr) нового дерева порядка j, формируемого из m деревьев условие (6) будет определяться соотношением (9):

$$\sum b_{i_1} \prod_{j=1}^{m} \tilde{\Phi}(tr_j) = \frac{1}{q \prod_{j=1}^{m} \gamma(tr_j)}, \qquad (9)$$

где $\tilde{\Phi}(tr)$ – это преобразование функции Φ(tr) по правилу (10):

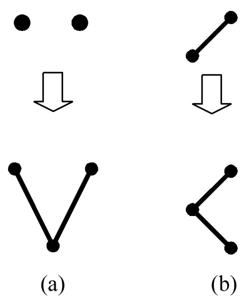
$$\begin{cases} b_{i_n} \to a_{i_n, i_{n+1}} \\ a_{i_n, i_{n+1}} \to a_{i_{n+1}, i_{n+2}} \\ c_{i_n} \to c_{i_{n+1}} \end{cases} \qquad (10)$$

Для представления дерева в виде (7), преобразование (10) будет иметь следующую форму (11):

$$\begin{bmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 2 \\ i \\ i+1 \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} 2 \\ i \\ i+1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 2 \\ i+1 \\ i+2 \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} 3 \\ i \\ 0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 3 \\ i+1 \\ 0 \end{bmatrix}. \qquad (11)$$

Объединение вершин путем добавление общего корня означает объединение векторов и добавление нового вектора $(1, 1, 0)^T$.

Рассмотрим формирование деревьев порядка 3, показанное на рисунке 3.



(a) (b)

Рисунок 3. – Формирование деревьев порядка 3.

Преобразование будет происходить по схеме (12) для случая а, и по схеме (13) для случая б.

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}, \text{ что соответствует } b_{i_1} a_{i_1 i_2}^2 \qquad (12)$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 2 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}, \text{ что соответствует } b_{i_1} c_{i_1}^2 \quad (13)$$

Таким же образом формируются условия для метода произвольного порядка.

Выводы

Использование метода помеченных деревьев позволяет формировать методы Рунге-Кутты высоких порядков. И, не смотря на то, что с ростом порядка число уравнений значительно возрастает, использование вычислительной техники позволяет автоматизировать вывод условий и снизить затраты времени на генерацию методов.

Список литературы

1. John Butcher. Numerical Method for Ordinary Differential Equations. – John Willey & Sons Ltd, 2008. – 482 p.
2. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. – М.: Мир, 1990. – 512 с.
3. А.В. Тыглиян, С.С.Филиппов. Элементарные дифференциалы, их графы и коды // Математическое моделирование, т.21, №8, 2009. – с. 37-43.
4. Famelis I. Th., Papakostas S. N., Tsitouras Ch., "Symbolic derivation of Runge–Kutta order conditions", J. Symbol. Comput., 37 (2004), 311–327.
5. Чисельні методи в інформатиці : підручник для ВНЗ / Л.П. Фельдман, А.І. Петренко, О.А. Дмитрієва . — К. : Вид. група BHV, 2006.

Сведения об авторах

Дмитриева Ольга Анатольевна – к.т.н., доцент кафедры прикладной математики и информатики Донецкого национального технического университета, e-mail: dmitriv@r5.dgtu.donetsk.ua.

Куприй Яна Александровна – аспирант кафедры прикладной математики и информатики Донецкого национального технического университета, тел. (062) 257 46 46, e-mail: k_yana@list.ru.