УДК 517.958, 519.6

## Условие явности и диагональной неявности при композиции метода Рунге–Кутты со своим присоединенным

**М. Н. Геворкян**

*Кафедра систем телекоммуникаций*
*Российский университет дружбы народов*
*ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Москва, Россия, 117198*

В статье затрагиваются три темы: присоединенные методы Рунге–Кутты, композиция нескольких методов Рунге–Кутты и симплектические раздельные методы Рунге–Кутты. Устанавливается связь между явностью или диагональной неявностью присоединённого метода Рунге–Кутты и условиями симплектичности раздельного метода Рунге–Кутты.

**Ключевые слова:** композиция численных методов, присоединённый численный метод, методы Рунге–Кутты, симплектические численные методы.

## Введение

Известно, что чем выше порядок точности методов Рунге–Кутты, тем сложнее условия порядка. Можно избежать решения громоздких нелинейных алгебраических уравнений, используя понятия композиции и присоединения. Композиция метода Рунге–Кутты со своим присоединённым позволяет повысить порядок точности исходного метода без решения громоздких условий порядка, но за счёт увеличения стадийности метода.

Возникает задача сохранения явности или диагональной неявности при использовании композиции. Конкретнее: пусть дан явный метод $\Phi_h$ и найден присоединённый к нему метод $\Phi^*_h$. Необходимо найти такие условия, налагаемые на коэффициенты метода, при которых композиция $\Phi_{h/2} \circ \Phi^*_{h/2}$ даст явный метод. Аналогично для диагонально-неявного метода.

Указанный способ повышения порядка точности метода особенно важен в случае симплектических методов (в частности, раздельного метода Рунге–Кутты), так как композиция симплектических методов[1] вновь даёт симплектический метод. Можно показать, что существует связь между условиями явности/ диагональной неявности присоединенного метода Рунге–Кутты.

Приведём в начале основные определения и теоремы, необходимые для дальнейшего изложения.

## 1. Основные определения

Будем рассматривать численные методы для решения задачи Коши на отрезке $[x_0, X]$. Здесь и далее предполагается, что $f(x, y(x))$ — достаточно гладкая функция на всей области определения. Всё изложение будет вестись для одномерного случая, так как многомерный случай тривиально получается заменой $f$ и $y$ на вектор–функции $\mathbf{f}$ и $\mathbf{y}$ соответственно [1, раздел II.2]:

$$\begin{cases} y'(x) = f(y(x)), \\ y(x_0) = y_0. \end{cases} \tag{1}$$

Статья поступила в редакцию 22 марта 2012 г.

[1]Присоедиенный симплектического метода также является симплектическим.

Любой неавтономный случай (когда $f(x,y)$ явно зависит от $x$) можно свести к автономному введением дополнительной переменной:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ f(x,y(x)) \end{pmatrix}, \text{ где } \mathbf{y} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{y}) = \begin{pmatrix} 1 \\ f(x,y(x)) \end{pmatrix}.$$

**Определение 1.** Пусть $s \in \mathbb{N}$ — число *стадий*, а $b^1, \ldots, b^s$; $[a_i^j]$, $i,j = 1,\ldots,s$ — вещественные параметры. Тогда схема:

$$\begin{cases} k_i = f(y_0 + h a_i^j k_j), \\ y_1 = y_0 + h b^i k_i, \\ i,j = 1,\ldots,s \end{cases}$$

называется $s$-стадийным методом Рунге–Кутты. Если $a_i^j = 0$ при $i \leqslant j$, то имеет место явный метод Рунге–Кутты. Если $a_i^j = 0$ при $i > j$ и хотя бы одно $a_i^i \neq 0$, то говорят о *диагонально-неявном методе Рунге–Кутты*. Если в диагонально-неявном методе все диагональные коэффициенты $a_i^i = \gamma \neq 0$, то говорят об *однократно диагонально-неявном методе Рунге–Кутты*. Во всех остальных случаях говорят о *неявных методах Рунге–Кутты* [1, раздел II.7].

### 1.1. Присоединенные численные методы

Здесь следуем изложенному в [1, раздел II.8]. Рассмотрим некоторый одношаговый метод, с помощью которого при заданных начальных условиях $(x_0, y_0)$ и длине шага $h$ определяется численное решение $y_1$, аппроксимирующее точное решение $y(x_0 + h)$. Введем обозначение для этого процесса:

$$y_1 = y_0 + hF(x_0, y_0, h),$$

где $F$ — *функция приращения* для данного метода. Для $k$-го шага можно записать:

$$y_{k+1} = y_k + hF(x_k, y_k, h_k).$$

Введём понятие метода, присоединённого к данному.

Численное решение в точке $x = x_0 + kh$ обозначим как $y_h(x) \neq y_k$. Следовательно, численное решение $y_{k+1}$ будет записываться как $y_h(x+h)$. Запишем некоторый одношаговый метод:

$$y_h(x+h) = y_h(x) + hF(x, y_h(x), h),$$

и заменим $h$ на $-h$, а затем $x$ на $x+h$, следовательно:

$$y_{-h}(x) = y_{-h}(x+h) - hF(x, y_{-h}(x+h), -h).$$

Если это уравнение удастся разрешить относительно $y_{-h}(x+h)$, то получим:

$$y_{-h}(x+h) = y_{-h}(x) + F^*(x, y_{-h}(x), h).$$

**Определение 2 (см. [1]).** Пусть $F(x,y,h)$ — функция приращения некоторого метода. Определим тогда функцию приращения $F^*(x,y,h)$ *присоединённого метода* с помощью следующей пары формул:

$$B = A - hF(x+h, A, -h),$$
$$A = B + hF^*(x, B, h).$$

В качестве примера найдём метод, присоединённый к методу Эйлера:

$$\begin{cases} y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k), \\ y_0 = y(x_0). \end{cases}$$

Для этого следует выполнить следующие действия:

- заменить $y_k$ на $y_{k+1}$ (и наоборот);
- заменить $h$ на $-h$;
- заменить $x_k$ на $x_{k+1}$ (и наоборот).

В результате для метода Эйлера получим неявный метод Эйлера в качестве присоединенного:

$$y_k = y_{k+1} - hf(x_{k+1}, y_{k+1}) \;\Rightarrow\; y_{k+1} = y_k + hf(x_{k+1}, y_{k+1}).$$

Укажем два важных свойства операции «$*$» (см. [1]) — первое из них дало повод к названию «присоединенный»:

1. $F^{**} = F$.
2. Присоединённый метод имеет тот же порядок, что и исходный.

### 1.2. Композиция численных методов

Впервые теорию композиции численных методов стали последовательно изучать и развивать Судзуки [2] и Ёшида [3]. Дальнейшее изложение следует книге [4, раздел II.4].

Рассмотрим одношаговый численный метод, записав его в операторном виде:

$$y_1 = \Phi_h y_0.$$

**Определение 3.** Пусть $\Phi_h$ — базовый метод, $\gamma_1, \gamma_2, ..., \gamma_s$ — набор действительных чисел. Тогда композиция:

$$\Psi_h = \Phi_{\gamma_s h} \circ \Phi_{\gamma_{s-1} h} \circ \ldots \circ \Phi_{\gamma_2 h} \circ \Phi_{\gamma_1 h}$$

называется *составным методом* (composition methode).

**Теорема 1 (см. [4]).** *Пусть $\Phi_h$ — однашаговый метод порядка $p \in \mathbb{N}$. Если*

$$\gamma_1 + \gamma_2 + \ldots + \gamma_s = 1,$$
$$\gamma_1^{p+1} + \gamma_2^{p+1} + \ldots, +\gamma_s^{p+1} = 0,$$

*то составной метод $\Psi$ имеет порядок $p + 1$.*

Очевидно, что для чётных $p+1$ уравнение $\gamma_1^{p+1} + \gamma_2^{p+1} + \ldots, +\gamma_s^{p+1} = 0$ решений не имеет, так как все $\gamma_1, \gamma_2, ..., \gamma_s$ — действительные числа. Кроме того, при $s = 2$ решений также не существует. Это легко показать, учитывая, что $p+1$ — нечётное число:

$$\begin{cases} \gamma_1^{p+1} + \gamma_2^{p+1} = 0, \\ \gamma_1 + \gamma_2 = 1, \end{cases} \Rightarrow (1 - \gamma_1)^2 + \gamma_1^{2k+1} = 0 \Rightarrow 1/\gamma_1 = 0.$$

Таким образом, минимальное значение — $s = 3$ (рис. 1).

Однако если рассмотреть композицию метода со своим присоединённым:

$$\Psi_h = \Phi_{\alpha_s h} \circ \Phi^*_{\beta_s h} \circ \ldots \circ \Phi_{\alpha_2 h} \circ \Phi^*_{\beta_2 h} \circ \Phi_{\alpha_1 h} \circ \Phi^*_{\beta_1 h},$$

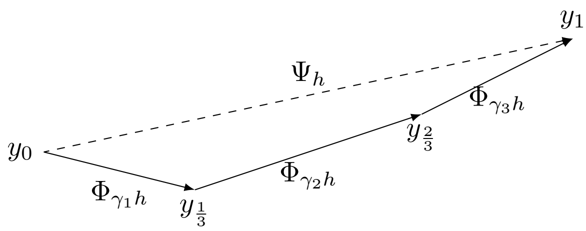


**Рис. 1. Составной метод** $\Psi_h = \Phi_{\gamma_1 h} \circ \Phi_{\gamma_2 h} \circ \Phi_{\gamma_3 h}$

то согласно теореме 1 условия на коэффициенты $\alpha_1, \ldots, \alpha_s$ и $\beta_1, \ldots, \beta_s$ имеют вид:

$$\begin{cases} \beta_1 + \alpha_1 + \beta_2 + \alpha_2 + \ldots + \beta_{s-1} + \alpha_{s-1} + \beta_s + \alpha_s = 1, \\ -(-\beta_1)^{p+1} - (-\beta_2)^{p+1} - \ldots - (-\beta_s)^{p+1} + \alpha_1^{p+1} + \ldots + \alpha_s^{p+1} = 0. \end{cases}$$

При $s = 1$ и нечётном $p$ существует решение $\alpha_1 = \beta_1 = \frac{1}{2}$. Составной метод $\Psi_h = \Phi_{h/2} \circ \Phi^*_{h/2}$ имеет порядок $p + 1$.

## 2. Композиция метода Рунге–Кутты со своим присоединённым

### 2.1. Присоединённый метод Рунге–Кутты

Найдём присоединённый метод для метода Рунге–Кутты:

$$\begin{cases} k_i = f(x_k + c_i h, y_k + h a_i^j k_j), \\ y_{k+1} = y_k + h b^j k_j, \\ i, j = 1, \ldots, s \end{cases}$$

Действуя по вышеуказанной схеме, заменим $y_k$ на $y_{k+1}$ (и наоборот), $h$ на $-h$ и $x_k$ на $x_{k+1}$ (и наоборот):

$$\begin{cases} k_i = f(x_{k+1} - c_i h, y_{k+1} - h a_i^j k_j), \\ y_k = y_{k+1} - h b^j k_j, \\ i, j = 1, \ldots, s \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} k_i = f(x_k + (1 - c_i) h, y_k + h(b^j - a_i^j) k_j), \\ y_{k+1} = y_k + h b^j k_j, \\ i, j = 1, \ldots, s. \end{cases}$$

Сделаем, как указано в [1, раздел II.8], перестановку значений $k_i$, для чего заменим $i$ на $s+1-i$ Итак, коэффициенты присоединённого метода Рунге–Кутты выражаются через коэффициенты прямого метода следующим образом:

$$(a_i^j)^* = b^{s+1-j} - a_{s+1-i}^{s+1-j}, \ \ (b^j)^* = b^{s+1-j}, \ i, j = 1, \ldots, s.$$

**Теорема 2.** *Присоединённый метод* $\Phi_h^*$ *явного метода Рунге–Кутты* $\Phi_h$ *является диагонально-неявным, если выполняется условие*

$$b^j = a_i^j, \ \forall i > j.$$

**Теорема 3.** *Присоединённый метод* $\Phi_h^{d*}$ *диагонально-неявного метода Рунге–Кутты* $\Phi_h^d$ *является явным, если выполняется условие*

$$b^j = a_i^j, \ \forall i \geqslant j.$$

**Доказательство.** Запишем таблицу Батчера для присоединённых к явному $\Phi_h$ и диагонально-неявному $\Phi_h^d$ методу Рунге–Кутты:

$$
\Phi_h^*\colon\quad
\begin{array}{c|cccccc}
 & b^s & b^{s-1}-a_s^{s-1} & b^{s-2}-a_s^{s-2} & \dots & b^2-a_s^2 & b^1-a_s^1 \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2}-a_{s-1}^{s-2} & \dots & b^2-a_{s-1}^2 & b^1-a_{s-1}^1 \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2-a_{s-2}^2 & b^1-a_{s-2}^1 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & b^1-a_2^1 \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & b^1 \\
\hline
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-3} & \dots & b^2 & b^1
\end{array},
$$

$$
\Phi_h^{d*}\colon\quad
\begin{array}{c|cccccc}
 & b^s-a_s^s & b^{s-1}-a_s^{s-1} & b^{s-2}-a_s^{s-2} & \dots & b^2-a_s^2 & b^1-a_s^1 \\
 & b^s & b^{s-1}-a_{s-1}^{s-1} & b^{s-2}-a_{s-1}^{s-2} & \dots & b^2-a_{s-1}^2 & b^1-a_{s-1}^1 \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2}-a_{s-2}^{s-2} & \dots & b^2-a_{s-2}^2 & b^1-a_{s-2}^1 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2-a_2^2 & b^1-a_2^1 \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & b^1-a_1^1 \\
\hline
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-3} & \dots & b^2 & b^1
\end{array}.
$$

При выполнении условий, указанных в теоремах 2 и 3, таблицы упрощаются и принимают вид:

$$
\Phi_h\colon\quad
\begin{array}{c|cccccc}
 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^2 & 0 \\
\hline
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s
\end{array},
\qquad
\Phi_h^*\colon\quad
\begin{array}{c|cccccc}
 & b^s & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^s & b^{s-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & 0 \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & b^1 \\
\hline
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-3} & \dots & b^2 & b^1
\end{array},
$$

$$
\Phi_h^d\colon\quad
\begin{array}{c|cccccc}
 & b^1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^2 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^2 & b^1 \\
\hline
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s
\end{array},
\qquad
\Phi_h^{d*}\colon\quad
\begin{array}{c|cccccc}
 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^s & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^s & b^{s-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & 0 & 0 \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & 0 \\
\hline
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-3} & \dots & b^2 & b^1
\end{array}.
$$

Что и требовалось доказать. □

## 2.2. Композиция методов Рунге–Кутты

Композиция нескольких методов Рунге–Кутты сводится к манипуляции с таблицами Батчера.

Запишем два метода Рунге–Кутты в симметричном виде:

$$\Phi_h^1\colon \begin{cases} g_i = y_0 + h a_i^j f(g_j), \\ y_1 = y_0 + h b^j f(g_j), \\ i, j = 1, \ldots, s, \end{cases} \quad \Phi_h^2\colon \begin{cases} g_i = y_0 + h A_i^j f(g_j), \\ y_1 = y_0 + h B^j f(g_j), \\ i, j = 1, \ldots, s. \end{cases}$$

Их композицией является $2s$–стадийный метод Рунге–Кутты с таблицей Батчера вида:

$$\Phi_{h/2}^2 \circ \Phi_{h/2}^1\colon \begin{array}{c|cccccc} & a_1^1 & \ldots & a_s^s & 0 & \ldots & 0 \\ & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & a_s^1 & \ldots & a_s^s & 0 & \ldots & 0 \\ & b^1 & \ldots & b^s & A_1^1 & \ldots & A_1^s \\ & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & b^1 & \ldots & b^s & A_s^1 & \ldots & A_s^s \\ \hline & b^s & \ldots & b^s & B^1 & \ldots & B^s \end{array}.$$

Стадийность же составного метода равна сумме стадийностей всех методов, участвующих в композиции. Для повышения порядка метода Рунге–Кутты можно использовать формулу $\Phi_{h/2} \circ \Phi_{h/2}^*$. При этом порядок исходного метода должен быть нечётным.

Интересно рассмотреть случаи явного и диагонально-неявного методов Рунге–Кутты нечётного порядка и произвольной стадийности $s$. Потребуем выполнения условий (2) и (3). Композиции $\Phi_{h/2} \circ \Phi_{h/2}^*$ и $\Phi_{h/2}^d \circ \Phi_{h/2}^{d*}$ дадут неявный метод (не диагонально-неявный).

Однако можно указать приём, позволяющий получить явный метод в случае $\Phi_{h/2} \circ \Phi_{h/2}^*$ и диагонально-неявный в случае $\Phi_{h/2}^d \circ \Phi_{h/2}^{d*}$. Для этого в методе $\Phi_{h/2}^*$ следует добавить «пустую» стадию (пустой столбец и пустую строку) следующим образом:

$$\Phi_{h/2}^*\colon \begin{array}{c|cccccc} & b^s & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ & b^s & b^{s-1} & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & 0 & 0 \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & 0 \\ & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & b^1 \\ \hline & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & b^1 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c|ccccccc} & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ & b^s & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ & b^s & b^{s-1} & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & 0 & 0 \\ & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & b^1 & 0 \\ \hline & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & b^1 & 0 \end{array}$$

Аналогично в случае $\Phi_{h/2}^{d*}$:

$$\Phi_{h/2}^{d*}\colon \begin{array}{c|cccccc} & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ & b^s & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ & b^s & b^{s-1} & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & 0 & 0 \\ & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & 0 \\ \hline & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & b^1 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c|ccccccc} & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ & 0 & b^s & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ & 0 & b^s & b^{s-1} & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & 0 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & 0 & 0 \\ & 0 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & 0 \\ & 0 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & b^1 \\ \hline & 0 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & b^1 \end{array}$$

В результате получим явный метод

$$
\Phi_{h/2} \circ \Phi^{*}_{h/2} \colon \quad
\begin{array}{c|ccccccccccccc}
 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 & b^1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^{s-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & b^s & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & b^s & b^{s-1} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & b^1 & 0 \\
\hline
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & b^1 & 0
\end{array}
\tag{2}
$$

и диагонально-неявный метод

$$
\Phi^{d}_{h/2} \circ \Phi^{d*}_{h/2} \colon \quad
\begin{array}{c|cccccccccccccc}
 & b^1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^{s-1} & b^s & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & 0 & b^s & 0 &  & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & 0 & b^s & b^{s-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & 0 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots &  \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & 0 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & 0 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & b^1 \\
\hline
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & 0 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & b^1
\end{array}
\; . \tag{3}
$$

## 3. Симплектический раздельный метод Рунге–Кутты

Рассмотрим теперь особый случай метода Рунге–Кутты — *симплектический раздельный метод Рунге–Кутты*. Сурис в своей статье [5] называет такие методы *гамильтоновыми методами Рунге–Кутты*. Рассмотрим следующую систему обыкновенных дифференциальных:

$$
\begin{cases}
\dot{y}(x) = f(y(x), z(x)), \\
\dot{z}(x) = g(y(x), z(x)), \\
y(0) = y_0, \quad z(0) = z_0.
\end{cases}
$$

**Определение 4.** Пусть $s \in \mathbb{N}$ — число *стадий*, $b^1, \dots, b^s$; $[a_i^j]$; $\hat{b}^1, \dots, \hat{b}^s$ и $[\hat{a}_i^j]$, где $i, j = 1, \dots, s$ — вещественные параметры. Тогда схема:

$$\begin{cases} k_i = f(y_0 + h a_i^j k_j, z_0 + h \hat{a}_i^j \hat{k}_j), \\ \hat{k}_i = g(y_0 + h a_i^j k_j, z_0 + h \hat{a}_i^j \hat{k}_j), \\ y_1 = y_0 + h b^i k_i, \\ z_1 = z_0 + h \hat{b}^i \hat{k}_i, \\ i, j = 1, \dots, s. \end{cases}$$

называется *раздельным методом Рунге–Кутты* (неявным).

Симметричный вид:

$$\begin{cases} Y_i = y_0 + h a_i^j f(Y_j, Z_j), \\ Z_i = z_0 + h \hat{a}_i^j g(Y_j, Z_j), \\ y_1 = y_0 + h b^i f(Y_j, Z_j), \\ z_1 = z_0 + h \hat{b}^i f(Y_j, Z_j), \\ i, j = 1, \dots, s. \end{cases}$$

Таблица Батчера для таких методов имеет более сложный вид:

$$\begin{array}{c|cccccc|cccccc} & a_1^1 & a_1^2 & a_1^3 & \dots & a_1^{s-1} & a_1^s & \hat{a}_1^1 & \hat{a}_1^2 & \hat{a}_1^3 & \dots & \hat{a}_1^{s-1} & \hat{a}_1^s \\ & a_2^1 & a_2^2 & a_2^3 & \dots & a_2^{s-1} & a_2^s & \hat{a}_2^1 & \hat{a}_2^2 & \hat{a}_2^3 & \dots & \hat{a}_2^{s-1} & \hat{a}_2^s \\ & a_3^1 & a_3^2 & a_3^3 & \dots & a_3^{s-1} & a_3^s & \hat{a}_3^1 & \hat{a}_3^2 & \hat{a}_3^3 & \dots & \hat{a}_3^{s-1} & \hat{a}_3^s \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & a_s^1 & a_s^2 & a_s^3 & \dots & a_s^{s-1} & a_s^s & \hat{a}_s^1 & \hat{a}_s^2 & \hat{a}_s^3 & \dots & \hat{a}_s^{s-1} & \hat{a}_s^s \\ \hline & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & \hat{b}^1 & \hat{b}^2 & \hat{b}^3 & \dots & \hat{b}^{s-1} & \hat{b}^s \end{array}$$

Важно, что обычный метод Рунге–Кутты является симплектичным только в неявном случае, но для раздельного симплектического метода Рунге–Кутты можно построить явную схему. Условия симплектичности даёт следующая теорема

**Теорема 4 (см. [5]).** *Для гладкого гамильтониана $H$ раздельный метод Рунге–Кутты является симплектическим при выполнении следующих тождеств:*

$$b^i = \hat{b}^i, \ \forall i = 1, \dots, s;$$
$$b^i \hat{a}_i^j + \hat{b} a_j^i - b^i \hat{b}^j = 0, \ \forall i, j = 1, \dots, s.$$

*Для гамильтониана вида $H(p, q) = T(p) + U(q)$ раздельный метод Рунге–Кутты изначально является симлектическим и может быть записан в явном виде.*

Предположим, что раздельный метод Рунге–Кутты имеет коэффициенты вида:

$$\begin{aligned} & a_i^j = 0 \ \forall i < j \ (\text{диагонально неявный}), \\ & \hat{a}_i^j = 0 \ \forall i \leqslant j \ (\text{явный}), \end{aligned} \tag{4}$$

Заметим, что из условий (4):

$$\forall i \geqslant j \ \Rightarrow \ a_i^j \neq 0 \text{ и } \hat{a}_j^i = 0,$$
$$\forall i > j \ \Rightarrow \ \hat{a}_i^j \neq 0 \text{ и } a_j^i = 0.$$

Условия симплектичности раздельного метода Рунге–Кутты в этом случае упрощаются:

$$b^i\hat{a}^j_i + \hat{b}a^i_j - b^i\hat{b}^j = 0 \Rightarrow \begin{cases} \forall i \geqslant j \Rightarrow \hat{b}^i a^j_i = b^j\hat{b}^i \Rightarrow a^j_i = b^j, \\ \forall i > j \Rightarrow b^i\hat{a}^j_i = b^i\hat{b}^j \Rightarrow \hat{a}^j_i = \hat{b}^j. \end{cases}$$

Таблицу Батчера можно записать в виде:

$$\begin{array}{c|cccccc|cccccc}
 & b^1 & 0 & & & & & 0 & & & & & \\
 & b^1 & b^2 & 0 & & & & \hat{b}^1 & 0 & & & & \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & 0 & & & \hat{b}^1 & \hat{b}^2 & 0 & & & \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & 0 & \hat{b}^1 & \hat{b}^2 & \hat{b}^3 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & \hat{b}^1 & \hat{b}^2 & \hat{b}^3 & \dots & \hat{b}^{s-1} & 0 \\
\hline
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & \hat{b}^1 & \hat{b}^2 & \hat{b}^3 & \dots & \hat{b}^{s-1} & \hat{b}^s
\end{array}.$$

Симплектический раздельный метод Рунге–Кутты можно трактовать как два разных метода — один диагонально неявный, а второй — явный. Кроме того, из условия симплектичности автоматически следует выполнение теорем 2 и 3. Из раздельного метода $\Psi_h$ нечётного порядка $p$ можно с помощью композиции $\Psi_{h/2} \circ \Psi^*_{h/2}$ получить метод $p+1$ порядка. При этом таблица Батчера будет состоять из таблиц (3) и (2). Таким образом доказана теорема:

**Теорема 5.** *Пусть раздельный метод Рунге–Кутты состоит из диагонально-неявного метода $\Phi^d_h$ и явного метода $\Phi_h$. Тогда условия симплектичности раздельного метода Рунге–Кутты совпадают с условиями явности метода $\Phi^{d*}_h$ и диагональной неявности метода $\Phi^*_h$.*

## Заключение

В статье получены следующие результаты:

1. Выведены условия явности метода $\Phi^{d*}_h$ и диагональной неявности метода $\Phi^*_h$.
2. Показан способ получения явного и диагонально-неявного методов с помощью «пустой» стадии и композиции $\Phi_{h/2} \circ \Phi^*_{h/2}$ и $\Phi^d_{h/2} \circ \Phi^{d*}_{h/2}$.
3. Показана связь вышесформулированных условий с симплектическими раздельными методами Рунге–Кутты.

## Литература

1. *Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи / под ред. С. С. Филиппова. — 1 издание. — М.: Мир, 1990. — ISBN 5-03-001179-X, С. 512. [Hairer E., Norsett S. P., Wanner G. Reshenie obihknovennihkh differencialjnihkh uravneniyj. Nezhestkie zadachi / editor by S. S. Filippov. — 1 Ed. — M.: Mir, 1990. — ISBN 5-03-001179-X, P. 512. ]
2. *Suzuki M.* Fractal Decomposition of Exponential Operators with Applications to Many-Body Theories and Monte Carlo Simulations // Physics Letters A. — 1990. — Vol. 146, No 6. — Pp. 319–323. — ISSN 0375-9601. — `http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037596019090962N`.

3. *Yoshida H.* Construction of Higher Order Symplectic Integrators // Physics Letters A. — 1990. — Vol. 150, No 5-7. — Pp. 262–268. — http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0375960190900923.
4. *Hairer E., Lubich C., Wanner G.* Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. Springer series in computational mathematics. — Springer, 2006. — ISBN 9783540306634. — http://books.google.ru/books?id=T1TaNRLmZv8C.
5. *Сурис Ю. Б.* Гамильтоновы методы типа Рунге–Кутты и их вариационная трактовка // Математическое моделирование. — 1990. — Т. 2, № 4. — С. 78–87. [*Suris Yu. B.* Gamiljtonovih metodih tipa Runge–Kuttih i ikh variacionnaya traktovka // Matematicheskoe modelirovanie. — 1990. — T. 2, No 4. — S. 78–87. ]

UDC 517.958, 519.6

## The Condition of Explicitness and the Diagonal Implicitness for Composition of Runge–Kutta Method with its Adjoint One

**M. N. Gevorkyan**

*Telecommunication Systems Department*
*Peoples' Friendship University of Russia*
*6, Miklukho-Maklaya str., Moscow, Russia, 117198*

The paper addresses three topics: the adjoint Runge–Kutta methods, the composition of several Runge - Kutta methods and symplectic partitioned Runge–Kutta methods. A connection between the explicitness or diagonal implicitness for adjoint Runge–Kutta methods and conditions of a partitioned symplectic Runge–Kutta methods.

**Key words and phrases:** the composition of the numerical methods, numerical adjoint method, Runge–Kutta, symplectic numerical methods.