

РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ
Факультет физико-математических и естественных наук

**Л. А. Севастьянов, М. Н. Геворкян,
А. В. Королькова, Д. С. Кулябов**

Разностные методы расчета оптических наноструктур

Учебно-методический комплекс

Москва

Российский университета дружбы народов

2013

УДК
ББК
С

Утверждено
РИС Учёного совета
Российского университета
дружбы народов

*Издание подготовлено в рамках реализации
Программы стратегического развития РУДН на 2012–2016 гг.*

Севастьянов, Л. А.

С Разностные методы расчета оптических наноструктур [Текст] /
Л. А. Севастьянов, М. Н. Геворкян, А. В. Королькова,
Д. С. Кулябов. — М. : РУДН, 2013. — 86 с. : ил.

Учебно-методический комплекс обеспечивает реализацию магистерской программы «Математическое моделирование оптических наноструктур» и предназначен для студентов, обучающихся по направлению «Прикладная математика и информатика».

ISBN

© Севастьянов Л. А., Геворкян М. Н., Королькова А. В.,
Кулябов Д. С., 2013

© Российский университет дружбы народов, Издательство, 2013.

Описание курса и программа

«Разностные методы расчета оптических наноструктур»

Методические указания

Цели и задачи дисциплины

Дисциплина имеет целью подробное ознакомление студентов с устойчивыми современными методами численного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений, получающихся при применении модального Фурье метода к математической модели взаимодействия электромагнитного излучения в области светового диапазона с диэлектрическими структурами нанометровых размеров. Эта область знаний особенно быстро развивается в последние годы в связи с широким применением нанозадач и тонких (менее одного микрометра толщиной) плёнок, используемых в производстве жидкокристаллических дисплеев, солнечных батарей на основе диэлектриков, фотоэмиссионных диодов, просветляющих покрытий, поляризаторов, миниатюрных лазеров, управляемых оптических элементов. Задачи оптики наноструктур практически не поддаются аналитическому решению, поэтому важным является не только освоение теоретического материала, но и изучение специальных численных методов, используемых при решении данного класса задач, приобретение навыков создания программного обеспечения для численного моделирования различных оптических наноструктур.

Задача дисциплины состоит в обучении студентов навыкам математического моделирования дифракции линейно поляризованного света на оптических структурах, состоящих из диэлектрических материалов.

Место дисциплины в структуре ООП

Цикл, к которому относится дисциплина: М1, общенаучный цикл, вариативная часть.

Требования к входным знаниям, умениям и компетенциям студента: требуется пройти обучение по дисциплинам: «Основы моделирования оптических явлений».

Знать:

1. концепции и основные понятия наноструктур (ОК—1);
2. актуальные аспекты и проблемы прикладной математики в области математического моделирования взаимодействия света с веществом (ОК—2);

Уметь:

1. использовать теоретические и практические знания в решении задач прикладной математики (ОК—3);
2. приобретать новые знания в предметной области, анализировать и систематизировать материал (ОК—4);

3. проводить семинарские и практические занятия со студентами (ПК—8).

Дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей: Метод связанных волн, Устойчивые методы в оптических моделях, Моделирование оптических наноструктур, Курсовая работа, Выпускная квалификационная работа.

Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций: ОК: 1—4, ПК: 1—3,8.

Знать:

- концепции и основные понятия предметной области оптических наноструктур на основе тонкоплёночных покрытий и дифракционных оптических элементов (ОК—1);
- актуальные аспекты и проблемы прикладной математики в области математического моделирования дифракции поляризованного света на оптических наноструктурах на основе тонкоплёночных покрытий и дифракционных оптических элементов (ОК—2).

Уметь:

- решать задачи моделирования и проектирования оптических наноструктур на основе тонкоплёночных покрытий и дифракционных оптических элементов (ОК—3);
- приобретать новые знания в предметной области, анализировать и систематизировать материал в области моделирования дифракции поляризованного света на оптических наноструктурах на основе тонкоплёночных покрытий и дифракционных оптических элементов (ОК—4);
- проводить самостоятельную научную работу, получать новые теоретические и практические результаты в математическом моделировании дифракции света на оптических структурах на основе тонкоплёночных покрытий и дифракционных оптических элементов (ПК—1).

Владеть:

- разрабатывать концептуальные и теоретические модели дифракции поляризованного света на оптических наноструктурах на основе тонкоплёночных покрытий и дифракционных оптических элементов (ПК—2);
- решать задачи, связанные с математическим синтезом и проектированием оптических наноструктур на основе тонкоплёночных покрытий и дифракционных оптических элементов (ПК—3);
- проводить семинарские и практические занятия со студентами (ПК—8).

Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зачётные единицы.

Вид занятий	Всего часов	Семестры
Общая трудоёмкость	108	3
Аудиторные занятия	36	36
Лекции		
Практические занятия (ПЗ)	—	—
Семинары (С)	—	—
Лабораторные работы (ЛР)	36	36
Другие виды аудиторных занятий (тактические занятия, учения, специальные игры, индивидуальные занятия)	—	—
Самостоятельная работа	72	72
Самостоятельная проработка учебного материала	36	36
Курсовой проект (работа)	—	—
Расчётно-графические работы	—	—
Домашняя работа (задание)	36	36
Реферат	—	
Вид итогового контроля		Экзамен

Содержание дисциплины

Содержание разделов дисциплины

Часть 1 Уравнения Максвелла и методы их решения

- Уравнения Максвелла;
- Вывод уравнения Хилла из уравнений Максвелла;
- Подходы к решению уравнения Хилла;

Аналитические методы.

- Аналитическая теория (решения ОДУ с помощью бесконечных рядов).
- Уравнение Матье как простейший случай уравнения Хилла; Функции Матье.
- Уравнение Хилла. Периодические решения. Непериодические решения и теорема Флоке—Ляпунова;
- Метод Хилла (бесконечный определитель).

Численные методы для уравнения Хилла.

- Методы, получаемые из аналитических решений;
- Метод связанных волн.

Часть 2 Методы Рунге—Кутты

- Конечные разности;

- Классификация численных методов с помощью куба (многошаговые, многостадийные и мультидифференцируемые);
- Методы Рунге–Кутты (явные/диагонально неявные/неявные; для одного уравнения, для систем);
- Раздельные методы Рунге–Кутты;
- Метод Рунге–Кутты–Нюстрёма.

Часть 3 Гамильтоновы системы

- Формализм Гамильтона;
- Скобки Пуассона;
- Канонические (симплектические преобразования).

Часть 4 Симплектические методы

- Симплектические методы
- 4 способа получения симплектических методов
- Подробно остановится на построении симплектических методов с помощью наложения дополнительных условий на условия порядка методов Рунге–Кутты

Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами

№ п/п	Наименование обеспечиваемых (последующих) дисциплин	№ № разделов данной дисциплины, необходимых для изучения обеспечиваемых (последующих) дисциплин			
		1	2	3	4
1.	Метод связанных волн	+	+	+	+
2.	Устойчивые методы в оптических моделях	+	+	+	+
3.	Моделирование оптических наноструктур	+	+	+	+

Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Лекц.	ПЗ	ЛР	С	СРС	Всего час.
1.	Уравнения Максвелла и методы их решения			8		16	24
2.	Методы Рунге–Кутты			8		16	24
3.	Гамильтоновы сист.			8		20	28
4.	Симплектические методы			8		20	28
5.	Контрольные работы			4			4
	Всего часов			36		72	108

Лабораторный практикум

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость (час.)
1.	1	Нахождение решение уравнения Бесселя (функции Бесселя).	8
2.	2	Реализация явных методов Рунге—Кутты, раздельного Рунге—Кутты и Рунге—Кутты—Нюстрема.	8
3.	3	Проверка на симплектичность нескольких классических численных методов. Как формулами, так и численно нарисовав фазовый портрет.	8
4.	4	Переработка написанных программ с заметой методов Рунге—Кутты на симплектические методы Рунге—Кутты. Проверка на симплектичность методом фазового портрета.	8

Практические занятия (семинары)

Практические занятия (семинары) не предусмотрены.

Примерная тематика курсовых проектов (работ)

1. Численное исследование систем массового обслуживания.
2. Численное решение системы нелинейных уравнений итерационными методами.
3. Численное моделирование надёжности функционирования сложных систем.
4. Построение численных схем решения системы линейных алгебраических уравнений с использованием прямых методов.
5. Численное решение нелинейных дифференциальных уравнений 2-го порядка методом конечных разностей.
6. Решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутты 4-го порядка.
7. Построение численных схем решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений с использованием неявного двухшагового метода Адамса.
8. Численное решение краевой задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений методом конечных разностей.

9. Численное решение модельных дифференциальных уравнений в частных производных методом сеток.

Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература

1. Ловецкий К.П., Севастьянов Л.А. Методы дифференциальных разностей расчёта оптических покрытий. Уч. пособие, электронное издание на CD /Регистрационное свидетельство No 15134 от 10.02.2009, номер гос. регистрации 0320802907.
2. Костомаров Д. П., Фаворский А. П. Вводные лекции по численным методам. — 1 издание. — Москва: Логос, 2004. — ISBN 5-94010-286-7, С. 184.
3. Butcher J. Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. — 2 edition. — New Zealand: Wiley, 2003. — ISBN 0-471-96758-0, P. 425.
4. Хайпер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи / под ред. С. С. Филиппов. — 1 издание. — Москва: Мир, 1990. — ISBN 5-03-001179-X, С. 512.
5. Hairer E., Nørsett S. P., G. Wanner. Solving Ordinary Differential Equations I. — 2 edition. — Berlin: Springer, 2008. — ISBN 978-3-540-56670-0, P. 528.
6. Сурис Ю.Б. Гамильтоновы методы типа Рунге-Кутты и их вариационная трактовка. // Математическое моделирование. — 1990. — Т. 2, No 4. — С. 78–87.

Дополнительная литература

1. Котляр В.В. Численное решение уравнений Максвелла в задачах дифракционной оптики // Компьютерная оптика. — 2006, №29, С. 24–40.
2. Беллман Р. Введение в теорию матриц. — М.: Наука, 1976.
3. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. — М.: Наука, 1984.
4. Методы компьютерной оптики. / Под ред. В.А. Соифера. — М.: Физматлит, 2003.
5. Feng K. On difference schemes and symplectic geometry // Proceedings of the 5-th Intern. Symposium on differential geometry and differential equations. — Beijing: 1985. — P. 42–58.

Программное обеспечение

OC Linux, gcc, python, scilab.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы не предусмотрены

Материально-техническое обеспечение дисциплины

Москва, ул. Орджоникидзе, д.3, корп. 5, Дисплейные классы ДК1, ДК2, ДК3, ДК4, ДК5, ДК6, ДК7, компьютеры типа Intel Core i3-550 3.2 GHz

Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Примерным учебным планом на изучение дисциплины отводится один семестр. В качестве итогового контроля предусмотрен — экзамен.

Рекомендуется провести контрольную работу или тестирование по материалам тем 3, 4 содержания дисциплины. По разделам 3 и 4 рекомендуется выдать индивидуальные домашние задания с получением формул амплитуд электромагнитного поля для тонкоплёночных покрытий и дифракционных оптических элементов из изотропных слоев с последующим расчётом на компьютере.

Для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации студентов рекомендуется использовать следующий перечень вопросов и заданий:

1. Векторно-матричные обозначения. Равномерные нормы векторов и матриц. Бесконечные ряды векторов и матриц. Существование и единственность решений линейной системы уравнений.
2. Матричная экспонента. Функциональные уравнения.
3. Однородные линейные системы дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Матричная экспонента.
4. Свойства матричной экспоненты. Невырожденность решения.
5. Явная форма решения линейного дифференциального уравнения. Диагональные матрицы. Диагонализация матрицы.
6. Вычисление матричной экспоненты с учётом недиагонализуемости.
7. Конечно-разностная формулировка в вертикальном направлении. Теоретический базис.
8. Алгоритм решения начальной задачи.
9. Сплетающие операторы. Корректирующий метод сплетающих операторов второго порядка.
10. Алгоритм Ньюмарка. Алгоритм точного четвёртого порядка.
11. Блочнo-треугольный $UL(LU)$ алгоритм.

12. Прямая задача дифракции электромагнитных волн на одномерных решётках. Квазипериодические решения. Отображение Дирихле-Неймана.
13. Уравнения Максвелла. От векторных полей к дифференциальным формам. 2-формы Фарадея и Максвелла.
14. Электромагнитный вариационный принцип. Вариационное происхождение уравнений Максвелла.
15. Сетки и двойственные сетки. Дискретные дифференциальные формы. Дискретное внешнее дифференцирование. Дискретное отображение Ходжа.
16. Дискретное внутреннее произведение. Дискретное кодифференцирование. Применение дискретного внешнего исчисления.
17. Прямоугольная сетка: построение, уравнения движения.
18. Неструктурированная пространственная сетка с равномерными шагами по времени: построение, уравнения движения.
19. Неструктурированная пространственная сетка с асинхронными шагами по времени: построение, уравнения движения, последовательная по времени итеративная схема.
20. Полностью неструктурированная пространственно-временная сетка: построение пространственно-временной сетки, уравнения движения, построение сеток и сохранение энергии.

Л. А. Севастьянов, М. Н. Геворкян,
А. В. Королькова, Д. С. Кулябов

Разностные методы расчета оптических наноструктур

Учебное пособие

Глава 1. Уравнения Максвелла

Рассмотрим метод дифференциальных форм в применении к задачам электромагнетизма.

1.1. От векторных полей к дифференциальным формам

Уравнения Максвелла (в отсутствие свободных зарядов и токов) традиционно выражаются в терминах четырёх векторных полей в трёхмерном пространстве: электрическое поле \vec{E} , магнитное поле \vec{H} , электрическая индукция \vec{D} и магнитная индукция \vec{B} . Чтобы перевести их на язык дифференциальных форм, начнём с замещения электрического поля 1-формой E и магнитной индукции 2-формой B . В координатной записи они выглядят следующим образом

$$E = E_x dx + E_y dy + E_z dz$$

$$B = B_x dy \wedge dz + B_y dz \wedge dx + B_z dx \wedge dy,$$

где $E = (E_x, E_y, E_z)$ и $B = (B_x, B_y, B_z)$.

Мотивацией для выбора E в виде 1-формы и B в виде 2-формы служит интегральная формулировка закона Фарадея:

$$\oint_C E \cdot dl = - \frac{d}{dt} \int_S B \cdot dA,$$

где E интегрируется по кривой, а B — по поверхности. Аналогично в законе Ампера:

$$\oint_C H \cdot dl = \frac{d}{dt} \int_S D \cdot dA$$

H интегрируется по кривым, а D — по поверхностям. Таким образом мы можем ввести 1-форму H и 2-форму D .

Теперь \vec{E} и \vec{B} связаны с \vec{D} и \vec{H} посредством обычных уравнений связи:

$$D = \varepsilon E, \quad B = \mu H.$$

Боссавит и Кеттунен показали, что можно рассматривать ε и μ как соответствующие операторы Ходжа $*_\varepsilon$ и $*_\mu$, которые отображают 1-формы «поля» в 2-формы «потоков индукции» в пространстве.

Отметим, что в вакууме, когда $\varepsilon = \varepsilon_0$ и $\mu = \mu_0$ являются константами, можно записать уравнения лишь в терминах E и B , выбирая подходящие единицы измерения (Гаусса), такие что $\varepsilon_0 = \mu_0 = c = 1$, игнорируя таким образом различие между E и D и между B и H . В дальнейшем ограничимся рассмотрением уравнений Максвелла в вакууме в системе единиц Гаусса в отсутствие свободных зарядов и токов. Для определённости будем считать E и H 1-формами, D и B — 2-формами.

1.1.1. 2-формы Фарадея и Максвелла

В лоренцовском пространстве-времени мы можем объединить E и B в единый объект: фарадеевскую 2-форму:

$$F = E \wedge dt + B.$$

Имеется теоретическое преимущество в объединении электрического поля и магнитной индукции в единый пространственно-временной объект: на этом пути электромагнитные явления могут быть описаны в релятивистски ковариантном виде, без разделения преимущественно на пространственную и временную компоненты. На деле можем вывернуть предыдущую конструкцию наизнанку: взять F в качестве фундаментального объекта, так что E и B появляются только при специфическом выборе системы координат. Если применить звёздное отображение Ходжа к F , мы снова получим двойственную 2-форму:

$$*F = H \wedge dt - D,$$

называемую 2-формой Максвелла. Это описывает отношения двойственности между E и B с одной стороны, и D и H — с другой, в конструктивной форме.

1.1.2. Электромагнитный вариационный принцип

Пусть A — электромагнитный потенциал, являющийся 1-формой. Он удовлетворяет уравнению $F = dA$ на пространственно-временном многообразии M . Определим 4-форму плотности лагранжиана:

$$L = \frac{1}{2} dA \wedge *dA$$

и соответствующий функционал действия

$$S(A) = \int_M L.$$

Если определить L^2 внутреннее произведение дифференциальных k -форм в виде:

$$\langle\langle\alpha, \beta\rangle\rangle = \int_M \alpha \wedge *\beta = \int_M \beta \wedge *\alpha,$$

то во введённых обозначениях мы можем переписать действие в виде:

$$S(A) = \frac{1}{2} \langle\langle dA, dA \rangle\rangle.$$

Теперь рассмотрим вариацию α потенциала A , такую, что α исчезает на границе ∂M . Тогда вариация функционала действия, соответствующая α , равна:

$$dS(A) \cdot \alpha = \left. \frac{d}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} S(A + \varepsilon\alpha) = \langle\langle dA, d\alpha \rangle\rangle = \langle\langle \delta dA, \alpha \rangle\rangle,$$

где в последнем равенстве мы проинтегрировали по частям с использованием кодифференциального оператора δ , L^2 - сопряжённого к d , и того факта, что α исчезает на границе.

Гамильтонов принцип постоянного действия требует, чтобы эта вариация обращалась в ноль при произвольном α , приводя таким образом, к электромагнитному уравнению Эйлера—Лагранжа:

$$\delta dA = 0. \quad (1.1)$$

1.2. Вариационное происхождение уравнений Максвелла

Поскольку $F = dA$, то совершенно ясно, что уравнение (1.1) эквивалентно $\delta F = 0$. Более того, так как $d^2 = 0$, то из этого следует, что $dF = d^2 A = 0$. Следовательно, уравнения Максвелла относительно фарадеевской 2-формы могут быть записаны в виде:

$$dF = 0, \quad (1.2)$$

$$\delta F = 0. \quad (1.3)$$

Предположим теперь, что выбрана стандартная система координат (x, y, z, t) в R^4 . Определим E и B с помощью соотношения $F = E \wedge dt + B$. Тогда простое вычисление показывает, что уравнение (1.2) эквивалентно паре уравнений:

$$\text{rot } E + \frac{\partial B}{\partial t} = 0 \quad (1.4)$$

$$\operatorname{div} B = 0. \quad (1.5)$$

Аналогично, если положить $*F = H \wedge dt - D$, то уравнение (1.3) эквивалентно уравнениям

$$\operatorname{rot} H - \frac{\partial D}{\partial t} = 0 \quad (1.6)$$

$$\operatorname{div} D = 0. \quad (1.7)$$

Следовательно, этот лагранжиан и метод дифференциальных форм к уравнениям Максвелла в точности эквивалентен классической формулировке в терминах векторных полей на гладком пространстве-времени. Однако в дискретном пространстве-времени мы увидим, что метод дифференциальных форм не эквивалентен произвольной дискретизации векторных полей, а требует специального выбора дискретных объектов.

1.2.1. Редукция уравнений

Решая начальную задачу, нет необходимости использовать все уравнения Максвелла, чтобы проследить эволюцию системы во времени. Действительно, роторные уравнения (1.4) и (1.6) автоматически сохраняют величины $\operatorname{div} \mathbf{B}$ и $\operatorname{div} \mathbf{D}$. Поэтому дивергентные уравнения (1.5) и (1.7) можно рассматривать лишь как ограничения на начальные условия, тогда как роторные уравнения полностью описывают эволюцию системы во времени.

Имеются различные пути доказательства правомерности исключения дивергентных уравнений. Непосредственный способ состоит в применении оператора дивергенции к уравнениям (1.4) и (1.6). Но так как $\operatorname{div} \operatorname{rot} = 0$, мы получаем соотношения:

$$\frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div} B = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div} D = 0.$$

Поэтому если дивергентные ограничения выполняются в начальный момент времени, то они выполняются всегда, так как дивергентные члены постоянны.

В другом подходе заметим, что лагранжиан L зависит лишь от внешней производной dA электромагнитного потенциала, а не от значений самого A . Таким образом, система обладает калибровочной симметрией: любое калибровочное преобразование $A \mapsto A + df$ оставляет dA , а, следовательно, L , неизменными. Фиксируя координату времени, фиксируем калибровку так, что скалярный электрический потенциал

обращается в ноль: $\phi = A(\partial/\partial t) = 0$ (так называемая калибровка Вейля), и, таким образом, A имеет только пространственные компоненты. Действительно, эти три оставшиеся компоненты соответствуют таковым из обычного векторного потенциала A . Редуцированные уравнения Эйлера—Лагранжа при такой калибровке состоят только из уравнений (1.6), в то время как остающаяся калибровочная симметрия $A \mapsto A + \nabla f$ порождает отображение импульса, которое автоматически сохраняет дивергенцию D во времени. Уравнения (1.4) и (1.5) автоматически сохраняются под действием тождества $d^2 A = 0$, и в действительности не являются частью уравнений Эйлера—Лагранжа.

1.3. Внешнее дискретное исчисление

В этом разделе предлагается краткий обзор фундаментальных объектов и операций дискретного внешнего исчисления, сохраняющего структуру исчисления внешних дифференциальных форм. По построению дискретное внешнее исчисление автоматически сохраняет ряд важных геометрических структур, включая теорему Стокса, интегрирование по частям (с правильным учётом границ), комплекс де Рама, двойственность Пуанкаре, лемму Пуанкаре и теорему Ходжа. Поэтому внешнее дифференциальное исчисление порождает полностью дискретный аналог инструментов, использовавшихся в предыдущем разделе, для формулировки уравнений Максвелла с помощью дифференциальных форм. В последующих разделах будем пользоваться этой структурой для формулировки дискретных уравнений Максвелла по аналогии с непрерывной версией.

1.3.1. Логическое обоснование использования внешнего дискретного исчисления в вычислительной электродинамике

Современная вычислительная электродинамика возникла в 1960-х гг., когда метод конечных элементов, основанный на сеточных функциях, успешно использовался для дискретизации дифференциальных уравнений, описывающих двумерную задачу электростатики, сформулированную в терминах скалярного потенциала. К сожалению, первоначальный успех метода конечных элементов оказалось невозможно перенести на трёхмерные задачи без появления численных артефактов.

Дискретное внешнее исчисление является попыткой построить общую вычислительную схему, учитывающую эти важные геометрические структуры. Базируясь на картановском внешнем исчислении дифференциальных форм на гладких многообразиях, внешнее дискретное исчисление является дискретным исчислением, построенным

изначально на дискретных многообразиях с целью сохранения ковариантной природы используемых величин. Этот вычислительный аппарат основан на понятиях дискретных цепей и коцепей, используемых в качестве основных строительных блоков для дискретизации, совместимой с такими важными геометрическими структурами, как комплексы де Рама. Представления с помощью цепей и коцепей являются привлекательными для вычислительных методов благодаря своей концептуальной простоте и элегантности.

1.3.2. Сетки и двойственные сетки

Дискретное внешнее исчисление имеет дело с задачами, в которых гладкие n -мерные многообразия заменяются дискретными сетками, точнее комплексами ячеек, образующими ориентированное многообразие и допускающими метрику. Простейшим примером такой сетки является конечный симплицальный комплекс — триангуляция 2-мерной поверхности. Обычно мы будем обозначать комплекс через K , а ячейку комплекса — через σ .

По сетке K можно построить двойственную сетку $*K$, когда каждой k -ячейке σ соответствует двойственная $(n - k)$ — ячейка $*\sigma$ ($*K$ является «двойственным» к K в смысле двойственности графов).

1.3.3. Дискретные дифференциальные формы

Фундаментальными объектами внешнего дифференциального исчисления являются дискретные дифференциальные формы. Дискретная k -форма α^k приписывает каждой ориентированной k -мерной ячейке σ^k комплекса K действительное число. (Индекс k не обязательное, но полезное обозначение, напоминающее о том, с каким порядком формы или ячейки имеем дело.) Это число обозначается как $\langle \alpha^k, \sigma^k \rangle$, и может быть интерпретировано как интеграл формы α^k по элементу σ^k :

$$\langle \alpha, \sigma \rangle \equiv \int_{\sigma} \alpha.$$

Например, 0-формы приписывают значения вершинам, 1-формы приписывают значения рёбрам и т.д. Это соответствие может быть продолжено по линейности на дискретную область интегрирования: простым сложением значений форм на каждой ячейке, входящей в область интегрирования. Если ячейка входит в область с противоположной ориентацией, значение добавляется со знаком минус. Формально эта область, составленная из k -мерных ячеек, называется цепью,

а дискретные дифференциальные формы — коцепями, так что $\langle \cdot, \cdot \rangle$ — спаривание коцепей с цепями.

Дифференциальные формы могут быть определены или на комплексе K , или на двойственном ему $*K$. При этом будем говорить о них как о первичных формах и двойственных формах соответственно. Существует естественное соответствие между первичными k -формами и двойственными $(n - k)$ -формами, так как каждая первичная k -ячейка имеет двойственную $(n - k)$ -ячейку. Это важное свойство, которым мы воспользуемся, чтобы определить дискретное отображение Ходжа.

1.3.4. Дискретное внешнее дифференцирование

Дискретное внешнее дифференцирование d строится так, чтобы выполнялась теорема Стокса, которая в непрерывном случае записывается следующим образом:

$$\int_{\sigma} d\alpha = \int_{\partial\sigma} \alpha.$$

Поэтому, если α — дискретная дифференциальная k -форма, то $(k + 1)$ -форма $d\alpha$ определена на каждой $(k + 1)$ -цепи σ соотношением

$$\langle d\alpha, \sigma \rangle = \langle \alpha, \partial\sigma \rangle,$$

где $\partial\sigma$ — граница k -цепи σ . Поэтому d часто называют кограничным оператором в теории когомологий.

1.3.5. Дискретное отображение Ходжа

Дискретное отображение Ходжа преобразовывает k -формы, заданные на основной сетке в $(n - k)$ — форму на двойственной сетке, и наоборот. В нашем изложении будем использовать так называемое диагональное приближение отображения Ходжа (по причине его простоты), но отметим, что для более высоких порядков аппроксимации потребуются некоторые модификации. Для данной дискретной формы α её преобразование Ходжа $*\alpha$ определено соотношением

$$\frac{1}{|*\sigma|} \langle *\alpha, *\sigma \rangle = k(\sigma) \frac{1}{|\sigma|} \langle \alpha, \sigma \rangle,$$

где $|\sigma|$ и $|*\sigma|$ — объёмы этих элементов, а k — функция причинности, которая равняется $+1$, когда σ пространственно подобен, и -1 — в противном случае.

1.3.6. Дискретное внутреннее произведение.

Определим L^2 внутреннее произведение $\langle\langle \cdot, \cdot \rangle\rangle$ для двух основных k -форм соотношением

$$\begin{aligned} \langle\langle \alpha, \beta \rangle\rangle &= \sum_{\sigma \in K} k(\sigma) \binom{n}{k} \frac{|CH(\sigma, * \sigma)|}{|\sigma|^2} \langle \alpha, \sigma \rangle \langle \beta, \sigma \rangle = \\ &= \sum_{\sigma \in K} k(\sigma) \frac{|* \sigma|}{|\sigma|} \langle \alpha, \sigma \rangle \langle \beta, \sigma \rangle, \end{aligned}$$

где сумма берётся по всем k -мерным элементам σ , а $CH(\sigma, * \sigma)$ — n -мерная выпуклая оболочка $\sigma \cup * \sigma$. Последнее равенство справедливо в силу использования кругоцентрической двойственности, так как σ и $* \sigma$ ортогональны друг другу и, следовательно, $|CH(\sigma, * \sigma)| = \left(\binom{n}{k} \right)^{-1} |\sigma| |* \sigma|$. (Действительно, это одно из преимуществ использования кругоцентрической двойственности, так как надо хранить лишь информацию об объёмах основных и двойственных ячеек, а не о выпуклых оболочках основных и двойственных ячеек.) Это внутреннее произведение может быть выражено в терминах $\alpha \wedge * \beta$ как и в непрерывном случае, если выбрано специальное дискретное V -произведение.

1.3.7. Дискретное кодифференцирование

Наконец, определяем кодифференциальный оператор δ , который преобразует дискретную $(k+1)$ -форму в k -форму по формуле

$$\delta \beta = (-1)^{nk+1+Ind(g)} * d * \beta,$$

где $Ind(g)$ — индекс метрики (для лоренцовской метрики пространства-времени $Ind(g) = 1$). Этот оператор играет важную роль в интегрировании по частям, так как для сеток без границ или в случае, когда граничные вклады обнуляются, имеем

$$\langle\langle d\alpha, \beta \rangle\rangle = \langle\langle \alpha, \delta \beta \rangle\rangle. \quad (1.8)$$

Эти отношения двойственности и являются причиной названия кодифференцирования.

1.3.8. Применение дискретного внешнего исчисления

Дискретное внешнее исчисление просто и эффективно применяется с помощью линейной алгебры. K -форма α может быть представлена вектором, компонентами которого являются значения α на каждой k -ячейке сетки. Таким образом, для данного списка k -ячеек σ_i^k компоненты вектора равны $\alpha_i = \langle \alpha, \sigma_i^k \rangle$. Внешняя производная d , преобразующая k -формы в $(k+1)$ -формы, тогда представляется матрицей: по сути, это в точности матрица смежности k -ячеек и $(k+1)$ -ячеек сетки, со значениями ± 1 . Отображение Ходжа, преобразующее основные k -формы в двойственные $(n-k)$ -формы, представляется квадратной матрицей, а в случае диагонального отображения Ходжа — диагональной матрицей со значениями $k(\sigma_i^k) |\ast \sigma_i^k| / |\sigma_i^k|$. Дискретное внутреннее произведение является при этом квадратичной формой матрицы отображения Ходжа. Из-за этого прямого изоморфизма между дискретным внешним исчислением и линейной алгеброй проблемы, сформулированные на языке дискретного внешнего исчисления, могут воспользоваться преимуществом существования библиотек программ по решению задач линейной алгебры.

1.3.9. Начальные и граничные условия в дискретном внешнем исчислении

Особое внимание следует обратить на корректное задание начальных и граничных условия на дискретной пространственно-временной границе ∂K . Например, в электродинамике, пусть требуется задать начальные условия для E и B в момент времени t_0 . Но, хотя B определено на ∂K в t_0 , E не определено. В действительности, E «живет» на рёбрах нормалей к сечениям пространства-времени фиксированным значением t_0 . Следовательно, чтобы не модифицировать наши определения, мы должны задавать значения E на полушагах $t_{1/2}$ (эти полушаги появляются в стандартной схеме Йе.) В некоторых приложениях можно задавать значения E и B в различные моменты времени (например, если поля задаются случайным образом и интегрируются в течение долгого времени при расчёте резонансных спектров), но мы хотим работать и с более общими ситуациями. Хотя дискретное внешнее исчисление в основном на границах областей, такие понятия как дуальные ячейки, должны быть корректно определены на границе ∂K и рядом с ней.

Для основной сетки K , двойственная сетка $\ast K$ определена как двойственная по Вороному к K , ограниченная на K . При этом усекаются части двойственных ячеек, выходящие за пределы K . Это новое определение приводит к добавлению вершин, двойственных по

Вороному, к каждому граничному $(n - 1)$ -симплексу, к имевшимся ранее вершинам, двойственным внутренним n -симплексам. Для завершения двойственной сетки $*K$ добавляем двойственные ребра между смежными вершинами, двойственными к границе, а также между двойственными граничными вершинами и их соседними внутренними двойственными вершинами; процесс продолжается по возрастанию размерности двойственных ячеек. Интуитивно можно представить $(n - 1)$ -мерную границу как исчезающе тонкую n -мерную оболочку. Таким образом, каждый граничный $(k - 1)$ -симплекс можно представить в виде призматической k -ячейки, полученной из предыдущей утолщением по нормали к границе. Этот процесс весьма похож на использование виртуальных ячеек границы в общепринятом методе конечных элементов. При таком процессе построения дуальной сетки её граница совпадает с границей основной сетки и при этом $\partial(*K) = *(\partial K)$.

Вернёмся к примеру о начальных условиях для E и B и вспомним, что E определено на рёбрах, нормальных к срезам времени t_0 . Поэтому, благодаря надлежащему ограничению диаграммы Вороного на область, мы можем теперь определить E на вершинах ∂K в момент времени t_0 (при этом данные вершины надо понимать как исчезающе короткие нормали к границе). Наконец отметим, что конструкция $*K$ задаёт отношение двойственности между условиями Дирихле на двойственной сетке и условиями Неймана на основной сетке, т. е. между основными полями и двойственными индукциями.

1.3.10. Дискретное интегрирование по частям с учётом ненулевых граничных условий

Когда двойственная сетка определена корректно, двойственные формы могут теперь быть определены и на границе. Поэтому дискретная двойственность между d и δ (уравнение (1.8)) может быть обобщена на случай неисчезающих граничных условий. Если $\alpha \in \mathcal{E}$ — основная $(k - 1)$ -форма и $\beta \in \mathcal{E}$ — основная k -форма, то

$$\langle\langle d\alpha, \beta \rangle\rangle = \langle\langle \alpha, \delta\beta \rangle\rangle + \langle \alpha \wedge * \beta, \partial K \rangle. \quad (1.9)$$

На границе в этом интеграле α по-прежнему все ещё является основной $(k - 1)$ -формой на ∂K , в то время как $*\beta$ является $(n - k)$ -формой, взятой на двойственной границе $*(\partial K)$. Формула (1.9) легко доказывается с использованием знакомого метода дискретного «суммирования по частям», и таким образом согласуется с формулой интегрирования по частям для непрерывных дифференциальных форм.

1.4. Контрольные вопросы

1. Какие формы записи уравнений Максвелла вы знаете?
2. Объясните физический смысл величин \mathbf{j} и ρ .
3. Почему при рассмотрении электромагнитной волны в волноводе часто предполагают $\mu = \text{const}$?
4. Дайте определение вектору (контравариантному вектору). Какая величина в уравнениях Максвелла является вектором?
5. Дайте определение ковектору (ковариантному вектору). Какая величина в уравнениях Максвелла является ковектором?
6. Дайте определение тензору.
7. Что такое тензор Фарадея? Какова его валентность? Запишите его.
8. В чем преимущество записи уравнений динамики с помощью тензора Фарадея?

Задача: запишите систему уравнений Максвелла с помощью тензора Фарадея.

Глава 2. Методы семейства Рунге–Кутты

2.1. Краткий обзор численных методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений

Практическая работа ставит целью сравнительный анализ вычислительных схем решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Такая задача формулируется в следующем виде:

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = \vec{f}(\vec{y}, t), \quad t \in [t_0, t_n], \quad \vec{y}(t_0) = \vec{y}_0, \quad \vec{y}(t) \in R^m, \quad \vec{f}(\vec{y}, t) \in R^m. \quad (2.1)$$

Далее везде будем предполагать, что условия существования решения задачи (2.1) выполнены. Там, где это не принципиально, будем рассматривать методы решения скалярной задачи (2.1).

2.1.1. Вычислительные схемы

В принципе, наиболее простым способом построения решения в точке t_{n+1} , если оно известно в точке t_n , является способ, основанный на разложении функции решения в ряд Тейлора:

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h \cdot F(t_n, y_n, h), \quad (2.2)$$

где

$$F(t, y, h) = y'(t) + \frac{h}{2}y''(t) + \frac{h^2}{3!}y'''(t) + \dots$$

Если этот ряд оборвать и заменить $y(t_n)$ приближенным значением y_n , то получим приближенную формулу:

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) + \frac{h^2}{2}f'(t_n, y_n) + \dots + \frac{h^p}{p!}f^{(p)}(t_n, y_n).$$

При $= 1$ она представляет собой вычислительную схему явного метода Эйлера:

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n). \quad (2.3)$$

Применение формулы (2.2) ограничено лишь теми задачами, где легко вычисляется производные высших порядков функции $f(y, t)$ правой части уравнения (2.1). Заметим, что обычно это не так.

В начале XX века Рунге, Хойн и Кутта предложили подход, основанный на построении формулы для y_{n+1} вида

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot \Phi(t_n, y_n, h),$$

в которой функция Φ близка к F , но не содержит производных от функции в правой части уравнения. Было получено семейство явных и неявных методов, требующих s -кратного вычисления функции правой части на каждом шаге интегрирования (s -этапные методы).

Формулы этих методов идеально приспособлены для практических расчётов: они позволяют легко менять шаг интегрирования, являются одношаговыми, достаточно экономичны, по крайней мере, до формул четвёртого порядка включительно. Возможно, наиболее известной является формула четырёхэтапного метода четвёртого порядка:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6}(k_1 + k_2 + k_3 + k_4), \\ k_1 &= f(t_n, y_n), \quad k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1), \\ k_3 &= f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2), \quad k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Одна из основных проблем, связанных с применением методов (2.3)–(2.4) (а в действительности, всех явных методов) состоит в выборе величины шага интегрирования h , обеспечивающей устойчивость вычислительной схемы.

За счёт некоторого вычислительного усложнения этих формул был получен класс неявных методов, у которых отмеченная проблема в значительной степени снята. Неявные вычислительные схемы представляют собой алгебраические уравнения, в общем случае нелинейные относительно значений y_{n+1} . Например:

– неявный метод Эйлера

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1});$$

– метод трапеции

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(t_{n+1}, y_{n+1}) + f(t_n, y_n)].$$

Получив приближение к решению в точках t_1, t_2, \dots, t_n , можно использовать их для нахождения решения в точке t_{n+1} . Эта идея приводит к группе многошаговых методов, например, к методам Адамса. В форме Лагранжа вычислительные схемы неявных методов этого класса (методы Адамса—Мултона) имеют вид:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot \sum_{r=1}^p \beta_r f_{n-r+1}. \quad (2.5)$$

Заметим, что неявный метод Эйлера и метод трапеции являются частными случаями последней вычислительной схемы. Очевидно, использование многошаговых формул ставит задачу вычисления начальных значений $y_1, y_2 \dots y_p$, точность задания которых должна быть не хуже точности соответствующей формулы.

Отмеченная выше трудность выбора шага интегрирования h , обеспечивающего численную устойчивость метода, делает неявные схемы предпочтительнее для практического использования. В этой связи отметим некоторые проблемы их реализации.

Из (2.5) получаем

$$y_{n+1} = h \cdot \beta_0 \cdot f(y_{n+1}, t_{n+1}) + g_n. \quad (2.6)$$

Можно показать, что если выполняется неравенство

$$h < \frac{1}{L} \cdot \frac{1}{|\beta_0|},$$

где L – константа Липшица для функции $f(y)$, то существует единственное решение алгебраического уравнения (2.6), которое можно получить методом простой итерации:

$$y_{n+1}^{(k+1)} = h \cdot \beta_0 \cdot f(y_{n+1}^{(k)}, t_{n+1}) + g_n, \quad k = 0, 1, \dots \quad (2.7)$$

Очевидна желательность выбора «хорошего» начального приближения $y_{n+1}^{(0)}$. Его надлежащий выбор обеспечивается посредством явной формулы того же порядка точности. В этом случае явная схема выполняет роль прогнозирующей, а неявная формула (2.7) реализует коррекцию решения, а весь комбинированный процесс становится методом прогноза–коррекции – П(ВК)^{*k*}, где k – номер итерации в процессе (2.7).

Реализация неявных вычислительных методов по схеме (2.7) не является единственно возможной. Для решения получающихся нелинейных уравнений и их систем (как в методах Рунге–Кутты) широко применяется метод Ньютона. Однако проблема вычисления начального приближения и общая идея схемы «прогноз–коррекция» остаются без изменений. В этой связи обратим внимание на то, что переход к неявным схемам в значительной степени снял проблему выбора величины шага интегрирования h как фактора, определяющего устойчивость метода, но привёл к проблемам выбора начального приближения и величины шага h , обеспечивающих сходимость итерационного процесса решения нелинейных алгебраических уравнений. Ясно, что для линейных задач этих проблем нет, и применение неявных вычислительных схем для них существенно проще и надёжней.

Наличие жёстких задач (жёсткость – свойство задачи, а не метода)

сделало неявные вычислительные схемы особенно привлекательными и привело к разработке группы специальных жёсткоустойчивых методов (методы Гира). Напомним, что явление жёсткости возникает в системах ОДУ, являющихся моделями физических систем, в которых протекают процессы с существенно (на несколько порядков) отличающимися постоянными времени.

Для того чтобы определить, является ли данная задача Коши жёсткой, необходимы сведения о её поведении в окрестности частного решения $y(t)$. В окрестности такого решения уравнение (2.1) можно хорошо аппроксимировать линеаризованным уравнением:

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = J(t_n) \cdot [\vec{y}(t) - \vec{y}(t_n)] + \vec{f}(t_n, \vec{y}(t_n)), \quad (2.8)$$

где $J(t_n)$ — матрица Якоби векторной функции $\vec{f}(t, \vec{y})$, вычисленная в точке $(t_n, \vec{y}(t_n))$.

Если $J(t)$ на некотором интервале t изменяется мало и s_i — собственные числа матрицы Якоби, то задача (2.8) будет жёсткой в некотором интервале $T = [t_0, t_n]$, если для $t \in T$ выполняется:

$$\operatorname{Re}(s_i) < 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

$$\omega(t) = \max[\operatorname{Re}(s_i)] / \min[\operatorname{Re}(s_i)] \gg 1.$$

Систему уравнений можно считать жёсткой, если $\max \omega(t)$ больше 10, однако во многих задачах радиоэлектроники, физики, химической кинетики, управления этот коэффициент достигает значений порядка 10^6 и более.

Введение понятия жёсткой устойчивости метода позволило сконструировать группу методов, в которых величина шага интегрирования выбирается так, чтобы быстро затухающие и не оказывающие существенного влияния компоненты решения аппроксимировались устойчиво, тогда как для компонент с большими постоянными времени гарантировалась точность аппроксимации.

Наиболее распространённым классом линейных многошаговых методов для жёстких задач являются «формулы дифференцирования назад» (более общее название — методы Гира). Их вычислительная формула основывается на интерполяционной формуле Лагранжа для правой части уравнения (2.1)

$$f(t_{m+1}, y_{m+1}) = -\frac{1}{h_{m+1}} \sum_{i=0}^k a_i y_{m-i+1}, \quad (2.9)$$

$$a_i = \frac{t_m - t_{m-1}}{t_m - t_{m-i}} \prod_{p=1, p \neq i}^k \frac{t_m - t_{m-p}}{t_{m-i} - t_{m-p}}, \quad i = 1, 2, \dots, k$$

$$a_0 = - \sum_{j=1}^k a_j.$$

Выражение (2.9) представляет собой нелинейное уравнение относительно y_{m+1} . Для вычисления начального приближения $y_{m+1}^{(0)}$ по значениям $y_m, y_{m-1}, \dots, y_{m-k}$ строится интерполяционный полином k -го порядка для функции $y(t)$ и посредством экстраполирования вычисляется значение $y_{m+1}^{(0)}$. Заметим, что по формулам (2.9) можно вести интегрирование с переменным шагом. Вместе с тем, при фиксированном шаге коэффициенты a_i не изменяются, что существенно упрощает метод.

2.1.2. Погрешность численного решения и методы её оценки

Главным источником погрешности численного решения y_n в точке t_n :

$$e_n = \|\vec{y}(t_n) - \vec{y}_n\| \quad (2.10)$$

является погрешность аппроксимации метода, которая возникает на каждом шаге интегрирования. Для этой погрешности в предположении гладкости решения справедлива оценка

$$e_a = \|\vec{y}(t_0 + h) - y_1\| \leq Ch^{p+1}, \quad (2.11)$$

где p — порядок метода. В общем случае глобальная (полная) погрешность решения определяется как погрешностью аппроксимации, а также тем, как уравнение метода преобразует предыдущие погрешности e_{n-1}, e_{n-2}, \dots . Доказано, что если погрешность аппроксимации удовлетворяет соотношению (2.11), а функция метода $\vec{y}(t, \vec{y}, h)$ такова, что выполняется неравенство

$$\|\vec{y}(t, \vec{y}_1, h) - \vec{y}(t, \vec{y}_2, h)\| \leq L \|\vec{y}_1 - \vec{y}_2\|,$$

то для полной погрешности (2.10) справедлива оценка:

$$|e_n| \leq h^p \cdot (C/L) \cdot \exp[L(t_n - t_0) - 1],$$

где $h = \max \{h_i\}$, $1 \leq i \leq n$ и L — константа Липшица.

Очевидно, что даже упрощённые оценки погрешности по приведённым формулам не представляют практического интереса, поскольку требуют вычисления или оценивания верхних границ частных производных высших порядков от $f(t, y)$ (постоянные C и L). Для практики, однако, оценки погрешности необходимы, чтобы реализовать выбор достаточно малой величины h_n для получения требуемой точности, и одновременно достаточно большой — для минимизации вычислительных затрат.

Самый старый способ оценки погрешности для одношаговых методов, который использовал ещё Рунге, состоит в двукратном вычислении значения y_n с шагом h и $h/2$. При этом погрешность решения, полученного с шагом h , оценивается выражением

$$e_{n+1} = \frac{y_{n+1}(h/2) - y_{n+1}(h)}{2^p - 1} \cdot 2^p, \quad (2.12)$$

а решения, полученного с шагом $h/2$, — выражением

$$e_{n+1} = \frac{y_{n+1}(h/2) - y_{n+1}(h)}{2^p - 1}.$$

Ещё одна идея оценки величины ошибки численного решения состоит в выполнении шага от точки t_{n-1} к t_n методами порядка p и $p+1$ для получения оценки ошибки интегрирования методом порядка p :

$$y_{n+1}^{(p)} - y(t_{n+1}) \cong y_{n+1}^{(p)} - y_{n+1}^{(p+1)}.$$

Очевидна вычислительная «дороговизна» такого способа оценки ошибки. Эта идея нашла наиболее эlegantное воплощение в предложенных Инглендом (1967) и Фельбергом (1969) вложенных методах. Они представляют собой формулы Рунге—Кутты, которые одновременно дают возможность получить решения порядка p и $p+1$.

Первые методы такого типа были предложены Мерсоном (1957). Однако в его методе решение $y(p+1)$ имеет пятый порядок точности только для линейных уравнений с постоянными коэффициентами. Поэтому этот метод в общем случае переоценивает погрешность при малых h , но все же работает вполне удовлетворительно.

Формулы Фельберга не имеют подобных ограничений. Фельберг получил целое семейство таких методов различного порядка, но наиболее популярным стал шестистапный метод 4-го порядка. Следует иметь в виду, что Фельберг минимизировал коэффициент погрешности аппроксимации для решения низшего порядка (4-го). Поэтому точность результата высшего (5-го) порядка трудно поддаётся оценке, и этот результат используется только для регулирования величины шага.

Использование процедуры прогноза-коррекции для методов Гира

даёт простой и эффективный способ оценки погрешности аппроксимации. Брайтон (1972) показал, что её главную часть можно выразить через разность предсказанного и скорректированного значений решения. Так, для метода k -го порядка справедлива оценка:

$$e_n = h_n \frac{y_n - y_n^{(0)}}{t_n - t_{n-k-1}}. \quad (2.13)$$

2.1.3. Общие проблемы реализации численных методов

Одной из центральных проблем реализации алгоритмов численного интегрирования задачи Коши является выбор стратегии регулирования шага интегрирования и оценки допустимой его величины при интегрировании с постоянным шагом.

При интегрировании с постоянным шагом выбор величины шага определяется, главным образом, условиями устойчивости метода. Для линейных задач исчерпывающую информацию на этот счёт несут собственные числа матрицы Якоби правой части системы. Для нелинейных задач максимальный шаг можно оценить величиной $h_{\max} = C/L$, где L – константа Липшица функции $\vec{f}(\vec{y}, t)$ и C – постоянная, существенно зависящая от метода, но редко превосходящая 10.

Методы, обладающие более высокими показателями устойчивости, являются неявными, и их реализация приводит к необходимости решения систем нелинейных алгебраических уравнений. Ограничения, накладываемые свойствами устойчивости метода, при этом могут быть существенно ужесточены условиями сходимости итерационного процесса, применяемого для решения алгебраических систем уравнений, порождаемых численным методом интегрирования. Метод простой итерации вида (2.7) часто практически неприемлем (для жёстких задач особенно), так как для его сходимости требуется выполнение условия, накладывающего на величину шага столь же сильное ограничение, как и то, которого старались избежать, переходя от явных схем к неявным.

В таких ситуациях для решения нелинейных уравнений оказывается более эффективным метод Ньютона, который позволяет нередко добиться сходимости при существенно меньших ограничениях на величину шага. Точность прогноза для \vec{y}_{n+1} , используемого для начала итерационного ньютоновского процесса, может оказывать заметное влияние на скорость сходимости. Поэтому следует иметь в виду, что дисперсия величины прогноза \vec{y}_{n+1} быстро растёт с ростом числа значений \vec{y}_{n+1-i} , $i = 1, 2, \dots, k$, участвующих в предсказывающей формуле, что может привести к существенному снижению эффективности многошаговых формул при $k > 4$.

Если предпринять все необходимые меры для снятия ограничения

на величину шага по условиям устойчивости метода и сходимости итерационного процесса, то выбор шага может быть обусловлен лишь требуемой точностью решения. При решении жёстких систем возможны две стратегии выбора шага.

Если влияние на решение быстро затухающих компонент фундаментального решения не представляет интереса, то процесс интегрирования можно провести с постоянным и достаточно большим, по сравнению с малыми постоянными времени системы, шагом. В этом случае можно получить значительный выигрыш в вычислительных затратах за счёт упрощения вычислительной схемы (постоянства коэффициентов метода).

Если в решении требуется точное представление быстро изменяющихся компонент решения, то начальная величина шага должна быть меньше наименьшей постоянной времени задачи. Поскольку эти компоненты решения быстро затухают, то шаг в процессе интегрирования можно увеличить до значений порядка постоянной времени существенной (медленной) компоненты решения.

Для эффективного использования последней стратегии необходим относительно простой механизм изменения шага интегрирования в соответствии с оценками погрешности аппроксимации, приведёнными выше. На основании формул (2.12)–(2.13) вычисляется оценка ошибки решения:

$$err \max_{1 \leq i \leq m} \frac{e_{n,i}}{d_i} \quad (2.14)$$

где d_i — масштабирующий множитель для i -й компоненты вектора решения (при вычислении абсолютной погрешности $d_i=1$, а при вычислении относительной погрешности — $d_i = |y_{n,i}|$). Для повышения надёжности программы разумно использовать масштабирование вида $d_i = \max\{|y_{n,i}|, |y_{n,0}|, 1\}$.

Величина ошибки (2.14) сравнивается с заданной допустимой погрешностью Tol и на основании оценки (2.11) вычисляется оптимальная величина следующего шага $h_{new} = \left(\frac{Tol}{err}\right)^{1/p} \cdot h_n$.

Соблюдая определённую осторожность, этот шаг следует несколько уменьшить умножением на 0.8 или 0.9. Не следует допускать и слишком быстрых изменений величины шага — разумно ограничить его вариации величиной $[0.5h_{new}, 2h_{new}]$.

Если $err \leq Tol$, то решение, полученное с шагом h_n , следует считать удовлетворительным, и процесс интегрирования можно продолжить с шагом $h_{n+1} = h_{new}$. В противном случае решение с шагом h_n отбрасывается, и интегрирование из точки t_{n-1} начинается с шагом $h_n = h_{new}$.

Значительные трудности возникают при определении величины Tol — допустимой ошибки на одном шаге. Брайтон с соавторами

предложили определять её из условия:

$$Tol = \frac{e_{\lim}}{T} h_n,$$

где e_{\lim} — предельная допустимая величина ошибки на полном интервале интегрирования T . Заметим, что такая стратегия определения этой величины для очень многих, особенно нежёстких, задач приводит к чрезмерно сильным ограничениям величины шага.

2.2. Введение в задачу

Будем рассмотрим функцию $y(x)$ действительного переменного или же вектор функцию $\mathbf{y}(x) = (y_1, \dots, y_N)$:

$$y(x): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad \mathbf{y}(x): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^N.$$

$y(x)$ и \mathbf{y} определены на отрезке $[x_0, X] \in \mathbb{R}$ и принадлежат классу непрерывных дифференцируемых необходимое число раз функций. В дальнейшем будем говорить о скалярной функции $y(x)$, обобщая ключевые положения на случай вектор–функции $\mathbf{y}(x)$.

Рассмотрим задачу аппроксимации функции $y(x)$. На $[x_0, X]$ зададим упорядоченный набор точек

$$x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < x_n = X,$$

который называют *сеткой*, а точки x_i , $i = 1, \dots, n$ — узлами сетки; $x_{i+1} - x_i = h_{i+1}$ — переменный *шаг* сетки, $i = 0, \dots, n-1$. Везде в дальнейшем будем использовать равномерную сетку: $x_{i+1} - x_i = h = \text{const}$, $\forall i$, тогда каждый узел сетки задаётся формулой $x_i = x_0 + ih$.

Пусть каждой точке x_i сетки по некоторому правилу — *численной схеме* — ставится в соответствие число y_i . Дискретную функцию y_i называют *сеточной функцией*, \mathbf{y} представляет собой элемент конечномерного линейного пространства. Сеточную функцию используют для аппроксимации функции $y(x)$.

Важно заметить, что значение исходной функции $y(x)$ в точке x_i и значение сеточной функции в этой же точке не обязательно равны $y(x_i) \neq y_i$, но $y_i \approx y(x_i)$ [30]. Для сравнения функции $y(x)$ и y_i строят вспомогательную сеточную функцию $y(x_i)$, которая также принадлежит конечномерному линейному пространству размерности N . Теперь появляется возможность оценить погрешность аппроксимации, воспользовавшись какой-либо нормой конечномерного линейного пространства, например

$$\varepsilon = \max_{0 \leq i \leq n} |y(x_i) - y_i|.$$

2.3. Задача Коши

Будем рассматривать численные методы решения задачи Коши для ОДУ и для системы ОДУ на отрезке $[x_0, X]$. Здесь и далее будем предполагать, что $f(x, y(x))$ достаточно гладкая функция.

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), \\ y(x_0) = y_0, \end{cases} \quad \begin{cases} \mathbf{y}'(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)), \\ \mathbf{y}(x_0) = \mathbf{y}_0, \end{cases} \quad (2.15)$$

где $\mathbf{y}(x) = (y^1(x), \dots, y^N(x))$, $\mathbf{f}(x, \mathbf{y}) = (f^1(x, \mathbf{y}), \dots, f^N(x, \mathbf{y}))$, $f^\alpha(x, \mathbf{y}) = f^\alpha(x, y^1, \dots, y^N)$, $\alpha = 1, \dots, N$. Греческая буква в качестве индекса здесь введена во избежание путаницы в дальнейшем. Нам будут встречаться индексы, пробегающие узлы сетки. Их мы будем обозначать латинскими буквами i, j, k, l, m , а индексы имеющие отношение к уравнениям задачи Коши будут обозначаться греческими буквами α, β, γ .

2.4. Классификация численных методов

Приведём здесь классификацию численных методов, данную Батчером [17]. Данную классификацию можно наглядно изобразить в виде куба (рис. 2.1).

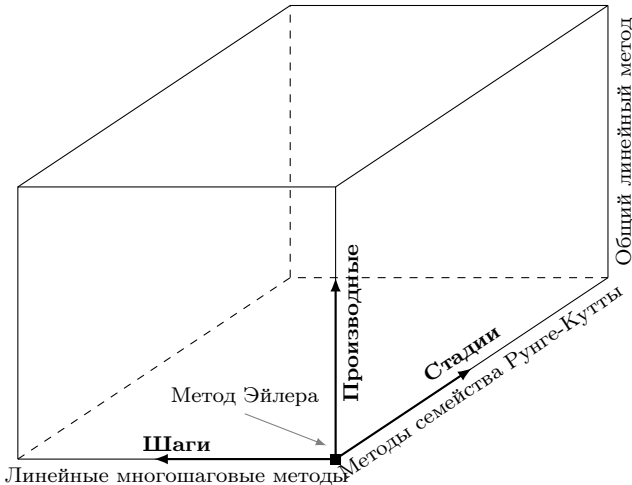


Рис. 2.1. Классификация численных методов

Батчер выделяет три класса численных методов:

Многошаговые (multistep) — для вычисления значения y_i используются несколько предыдущих (y_{i-1}, y_{i-2}, \dots) или/и последующих (y_{i+1}, y_{i+2}, \dots) значений сеточной функции. Кроме того, если зависимость y_i от $\dots y_{i-1}, y_{i-2}, y_{i+1}, y_{i+2}, \dots$ линейная, то говорят о *линейных многошаговых методах* (методы Адамса–Башфорта, Адамса–Моултона).

Многостадийные (multistage) — на каждом шаге происходит несколько дополнительных вычислений (т.е. вычисление y_i происходит в несколько *стадий*). Число стадий будем обозначать буквой s . К этому классу относятся методы Рунге–Кутты.

Мультидифференцируемые (multiderivative) — на каждом шаге, для вычисления y_i используются производные от $y(x)$.

Комбинация многостадийности и мультидифференцируемости даёт численные методы, называемые *общими линейными методами* (general linear methodes). Кроме того, если для вычисления y_i используются y_{i+1}, y_{i+2}, \dots , то говорят о *неявных методах*.

Из всего многообразия методов нас будут интересовать методы семейства Рунге–Кутты. В это семейство входят:

- явные и неявные методы Рунге–Кутты;
- явные и неявные раздельные методы Рунге–Кутты;
- явные и неявные методы Рунге–Кутты–Нюстрёма.

Прежде чем перейти к их изучению, познакомимся с важным понятием конечных разностей.

2.5. Конечные разности

Конечные разности используются для аппроксимации производных.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. Следующие выражения называют *конечными разностями*:

$$\Delta_h y(x_i) = y(x_i + h) - y(x_i) \quad \text{— разность вперёд,}$$

$$\nabla_h y(x_i) = y(x_i) - y(x_i + h) \quad \text{— разность назад,}$$

$$\delta_h y(x_i) = y(x_i + h/2) - y(x_i - h/2) \quad \text{— центральная разность.}$$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2. Разности высшего порядка определяются с помощью рекуррентных соотношений:

$$\Delta_h^m y(x_i) = \Delta_h(\Delta_h^{m-1} y(x_i)) = \Delta_h^{m-1} y(x_i + h) + \Delta_h^{m-1} y(x_i),$$

$$\nabla_h^m y(x_i) = \nabla_h(\nabla_h^{m-1} y(x_i)) = \nabla_h^{m-1} y(x_i) + \nabla_h^{m-1} y(x_i + h),$$

$$\delta_h^m y(x_i) = \delta_h(\delta_h^{m-1} y(x_i)) = \delta_h^{m-1} y(x_i + h/2) + \delta_h^{m-1} y(x_i - h/2).$$

ТЕОРЕМА 1 (см. [30]). *Погрешность конечных разностей имеет порядок:*

$$\left| \frac{\Delta_h y(x_i)}{h} - y'(x) \right| = O(h), \quad \left| \frac{\nabla_h y(x_i)}{h} - y'(x) \right| = O(h),$$

$$\left| \frac{\delta_h y(x_i)}{h} - y'(x) \right| = O(h^2).$$

ПРИМЕР 2.5.1. *Покажем, как с помощью конечных разностей можно получить простейшие численные методы. Рассмотрим задачу Коши:*

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

Заменяя $y'(x)$ на $\frac{\Delta_h y(x_i)}{h}$ и $\frac{\nabla_h y(x_{i+1})}{h}$ учитывая $i = 1, \dots, n$, получаем:

$$\begin{cases} y(x_{i+1}) = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)), \\ y(x_0) = y_0, \end{cases} \quad \begin{cases} y(x_{i+1}) = y(x_i) + hf(x_{i+1}, y(x_{i+1})), \\ y(x_0) = y_0. \end{cases}$$

Заменяя $y(x_i)$ на y_i , получаем две численные схемы: явный метод Эйлера и неявный метод Эйлера:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \\ y_0 = y(x_0), \end{cases} \quad \begin{cases} y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}), \\ y_0 = y(x_0). \end{cases}$$

Комбинируя оба метода получаем явно-неявный метод Эйлера:

$$\begin{cases} \hat{y}_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \\ y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}), \\ y_0 = y(x_0). \end{cases}$$

Мы часто будем встречать методы Эйлера как простейшие случаи более общих численных методов.

2.6. Явные методы Рунге–Кутты

Рассмотрим вначале задачу Коши для одного уравнения (2.15):

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

К. Рунге (1895) усовершенствовал численный метод Эйлера, а затем М. В. Кутта (1901) сформулировал уже общую схему, получившую название *численной схемы Рунге–Кутты*.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 3. [18,21] Пусть $s \in \mathbb{N}$ — число *стадий*, а $0 = c_1, c_2, \dots, c_s; b^1, \dots, b^j < i \leq s$ — вещественные параметры. Тогда схема:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_0, y_0), \\ k_2 &= f(x_0 + c_2, y_0 + a_2^1 k_1), \\ k_3 &= f(x_0 + c_3, y_0 + a_3^1 k_1 + a_3^2 k_2), \\ k_4 &= f(x_0 + c_4, y_0 + a_4^1 k_1 + a_4^2 k_2 + a_4^3 k_3), \\ &\dots\dots\dots \\ k_s &= f(x_0 + c_s, y_0 + a_s^1 k_1 + a_s^2 k_2 + \dots + a_s^{s-1} k_{s-1}), \\ y_1 &= y_0 + h \sum_{i=1}^s b^i k_i \end{aligned}$$

называется *s-стадийным явным методом Рунге–Кутты* (ЯМРК) для задачи Коши.

Обычно на коэффициенты c_i накладывают дополнительные условия:

$$c_2 = a_2^1, c_3 = a_3^1 + a_3^2, \dots, c_s = a_s^1 + \dots + a_s^{s-1} \Leftrightarrow c_i = \sum_{j=1}^{s-1} a_i^j, \quad 0 < j < i \leq s.$$

Эти условия были введены Куттой. Они существенно упрощают нахождение численных значений параметров b^i, c_i, a_i^j .

Батчер предложил [17] компактную запись метода Рунге–Кутты с помощью таблицы, которую называют в его честь *таблицей Батчера*:

0	0	0	0	...	0	0	0	0
c_2	a_2^1	0	0	...	0	0	c_2	a_2^1
c_3	a_3^1	a_3^2	0	...	0	0	c_3	a_3^1 a_3^2
c_4	a_4^1	a_4^2	a_4^3	...	0	0	c_4	a_4^1 a_4^2 a_4^3
c_5	a_5^1	a_5^2	a_5^3	...	0	0	c_5	a_5^1 a_5^2 a_5^3
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
c_s	a_{s1}	a_{s2}	a_{s3}	...	a_s^{s-1}	0	c_s	a_s^1 a_s^2 a_s^3 ... a_s^{s-1}
	b^1	b^2	b^3	...	b^{s-1}	b^s		b^1 b^2 b^3 ... b^{s-1} b^s

В более компактном виде метод Рунге–Кутты можно записать так:

$$\begin{cases} k_i = f \left(x_0 + hc_i, y_0 + h \sum_{j=1}^i a_i^j k_j \right), \\ y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b^i k_i; \quad 0 < j < i \leq s, \end{cases}$$

Метод легко распространяется на случай системы уравнений:

$$\begin{cases} \mathbf{y}'(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)), \\ \mathbf{y}(x_0) = \mathbf{y}_0, \\ \mathbf{k}_i = \mathbf{f} \left(x_0 + hc_i, \mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^i a_i^j \mathbf{k}_j \right), \\ \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h \sum_{i=1}^s b^i \mathbf{k}_i; \\ 0 < j < i \leq s, \end{cases}$$

где \mathbf{k}_i — вектор вида (k_i^1, \dots, k_i^N) . Для компонент вектора \mathbf{k}_i будем использовать греческие индексы: k_i^α , что логично, так как каждый компонент вектора \mathbf{k}_i соответствует уравнению системы ОДУ, для которой записывается метод

$$\begin{cases} k_i^\alpha = f^\alpha \left(x_0 + hc_i, y_0^\alpha + h \sum_{j=1}^i a_i^j k_j^\alpha \right), \\ y_1^\alpha = y_0^\alpha + h \sum_{i=1}^s b^i k_i^\alpha, \\ \alpha = 1, \dots, N; \quad i, j = 1, \dots, s. \end{cases}$$

ПРИМЕР 2.6.1. *Простейший пример явного метода Рунге–Кутты даёт явный метод Эйлера, полученный выше:*

$$\begin{cases} y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0), \\ y_0 = y(x_0), \\ i = 1, \dots, n \end{cases} \quad \begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array}$$

ПРИМЕР 2.6.2. В качестве примера распишем трёхстадийный метод Рунге–Кутты для системы из двух уравнений

$$\begin{cases} \frac{d}{dx}y^1(x) = f^1(x, y^1, y^2), \\ \frac{d}{dx}y^2(x) = f^2(x, y^1, y^2), \end{cases}$$

$$\begin{cases} k_1^1 = f^1(x_0 + c_1h, y_0^1 + h(a_1^1k_1^1 + a_2^1k_2^1 + a_3^1k_3^1), y_0^2 + h(a_1^1k_1^2 + a_2^1k_2^2 + a_3^1k_3^2)), \\ k_2^1 = f^1(x_0 + c_2h, y_0^1 + h(a_2^1k_1^1 + a_2^2k_2^1 + a_2^3k_3^1), y_0^2 + h(a_2^1k_1^2 + a_2^2k_2^2 + a_2^3k_3^2)), \\ k_3^1 = f^1(x_0 + c_3h, y_0^1 + h(a_3^1k_1^1 + a_2^3k_2^1 + a_3^3k_3^1), y_0^2 + h(a_3^1k_1^2 + a_2^3k_2^2 + a_3^3k_3^2)), \\ k_1^2 = f^2(x_0 + c_1h, y_0^1 + h(a_1^1k_1^1 + a_2^1k_2^1 + a_3^1k_3^1), y_0^2 + h(a_1^1k_1^2 + a_2^1k_2^2 + a_3^1k_3^2)), \\ k_2^2 = f^2(x_0 + c_2h, y_0^1 + h(a_2^1k_1^1 + a_2^2k_2^1 + a_2^3k_3^1), y_0^2 + h(a_2^1k_1^2 + a_2^2k_2^2 + a_2^3k_3^2)), \\ k_3^2 = f^2(x_0 + c_3h, y_0^1 + h(a_3^1k_1^1 + a_2^3k_2^1 + a_3^3k_3^1), y_0^2 + h(a_3^1k_1^2 + a_2^3k_2^2 + a_3^3k_3^2)), \\ y_1^1 = y_0^1 + h(b^1k_1^1 + b^2k_2^1 + b^3k_3^1), \\ y_1^2 = y_0^2 + h(b^1k_1^2 + b^2k_2^2 + b^3k_3^2). \end{cases}$$

2.7. Условия порядка

Важнейшие характеристики метода Рунге–Кутты — это стадийность s и порядок p . Стадийность показывает, сколько дополнительных вычислений необходимо выполнить на каждом шаге и, следовательно, от величины s сильно зависит время, затрачиваемое на вычисления. Дадим точное определение порядка p .

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 4. [18, 21] Говорят, что метод Рунге–Кутты имеет *порядок* p , если для достаточно гладких задач ряд Тейлора для точного решения $y(x_0 + h)$ и для аппроксимирующей функции $y_1(h)$ совпадают до h^p включительно (разложение по шагу сетки h) т.е.:

$$y(x_0 + h) - y_1(h) = O(h^{p+1})$$

Для того, чтобы метод Рунге–Кутты имел порядок p , необходимо выполнение условий:

$$\begin{aligned} \left. \frac{dy_1(h)}{dh} \right|_{h=0} &= \left. \frac{dy(x_0 + h)}{dh} \right|_{h=0}, \\ &\dots \\ \left. \frac{d^p y_1(h)}{dh^p} \right|_{h=0} &= \left. \frac{d^p y(x_0 + h)}{dh^p} \right|_{h=0}. \end{aligned}$$

где $y_1(h)$ — аппроксимирующая функция, а $y(x_0 + h)$ — точное решение. Эти равенства позволяют найти условия для параметров. Заметим, что $y_1(0) = y(x_0)$.

В качестве примера, найдём условия для случаев $p = 1, s = 1$ и $p = 2, s = 2$.

ПРИМЕР 2.7.1. Положим $p = 1, s = 1$:

$$\begin{aligned} y_1(h) &= y_0 + hb^1k_1 = y_0 + hb^1f(x_0, y_0) \Rightarrow \\ y'_1(0) &= b^1f_0, \text{ где } f_0 \stackrel{\text{not}}{=} f(x_0, y_0), \\ y'_h(x_0 + h) &= y'_{x_0+h}(x_0 + h) = f(x_0 + h, y(x_0 + h)) \Rightarrow \\ y'_h(x_0) &= f(x_0, y(x_0)) = f_0. \end{aligned}$$

Из требования $y'_1(0) = y'_h(x_0)$ получим единственное тривиальное уравнение для параметров:

$$b^1f_0 = f_0.$$

Получили метод Эйлера:

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0), \quad \begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array}$$

ПРИМЕР 2.7.2. Положим: $p = 2, s = 2$:

	$y_1^{(p)}(h)$	$y^{(p)}(x_0 + h)$
$p=1$	$b^1f_0 + b^2f(x_0 + h, y(x_0 + h)) +$ $h(b^2c_2f_x + b^2a_2^1f_yf_0)$	$f(x_0 + h, y(x_0 + h))$
$p=2$	$2b^2c_2f_x + 2b^2a_2^1f_yf_0 +$ $h[c_2^2f_{xx} + 2c_2a_2^1f_{xy}f_0 + (a_2^1)^2f_0^2f_{yy}]$	$f_x + f_yf(x_0 + h, y(x_0 + h))$

$$\begin{aligned} (b^1 + b^2)f_0 &= f_0, \\ 2b^2c_2f_x + 2b^2a_2^1f_yf_0 &= f_x + f_yf_0, \end{aligned}$$

$$b^1 + b^2 = 1,$$

$$2b^2c_2 = 1,$$

$$2b^2a_2^1 = 1.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = f(x_0, y_0), \\ k_2 = f(x_0 + h, y_0 + k_1), \\ y_1 = y_0 + \frac{h}{2}k_1 + \frac{h}{2}k_2, \end{array} \right. \quad \begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array};$$

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = f(x_0, y_0), \\ k_2 = f\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_1\right), \\ y_1 = y_0 + \frac{h}{2}k_2, \end{array} \right. \quad \begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ \hline & 0 & 1 \end{array}.$$

На первый взгляд, нахождение условий для $p = 3, 4, 5, \dots$ — задача тривиальная. Однако уже для $p = 4, s = 4$ выкладки становятся очень громоздкими. Существуют методы, позволяющие существенно упростить вывод условий порядка.

2.8. Неявные методы Рунге–Кутты

Первый неявный метод семейства Рунге–Кутты получил О. Коши. Коши применил теорему о среднем значении к интегралу:

$$y(x_1) = y(x_0) + \int_{x_0}^{x_1} f(x, y(x)) dx,$$

получив выражение:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x, y(x)) dx = (x_1 - x_0) f(c, y(c)), \quad c \in [x_0, x_1].$$

Используя параметры $0 \leq \theta \leq 1$ и $0 \leq \Theta \leq 1$, можно записать $c = x_0 + h\theta$ и $y(c) = y_0 + (y_1 - y_0)\Theta$. В результате получим следующую численную схему:

$$y_1 = y_0 + hf(x_0 + h\theta, y_0 + (y_1 - y_0)\Theta), \quad 0 \leq \theta, \Theta \leq 1,$$

называемую θ -методом.

- При $\theta = \Theta = 0$ получим явный метод Эйлера,
- При $\theta = \Theta = 1$ получим неявный метод Эйлера,
- При $\theta = \Theta = \frac{1}{2}$ получим неявное правило средней точки.

Запишем неявное правило средней точки в развёрнутом виде:

$$\begin{cases} k_1 = f(x_0 + h/2, y_0 + \frac{1}{2}hk_1), \\ y_1 = y_0 + hk_1. \end{cases}$$

Дадим теперь общее определение неявного метода Рунге–Кутты.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 5. Пусть $s \in \mathbb{N}$ — число *стадий*, а $c_1, c_2, \dots, c_s; b^1, \dots, b^s; [a_i^j], i, j = 1, \dots, s$ — вещественные параметры. Тогда схема:

$$\begin{cases} k_i = f(x_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^s a_i^j k_j), \\ y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b^i k_i, \\ i, j = 1, \dots, s \end{cases} \quad (2.16)$$

называется s -стадийным методом Рунге–Кутты.

- Если $a_i^j = 0$ при $i \leq j$, 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*.

Таблица Батчера для неявного метода Рунге–Кутты:

c_1	a_1^1	a_1^2	a_1^3	\dots	a_1^{s-1}	a_1^s
c_2	a_2^1	a_2^2	a_2^3	\dots	a_2^{s-1}	a_2^s
c_3	a_3^1	a_3^2	a_3^3	\dots	a_3^{s-1}	a_3^s
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots
c_s	a_s^1	a_s^2	a_s^3	\dots	a_s^{s-1}	a_s^s
	b^1	b^2	b^3	\dots	b^{s-1}	b^s

Рассмотрим систему ОДУ:

$$\frac{dy^\alpha(x)}{dx} = f^\alpha(x, y^\beta(x)) \Leftrightarrow \frac{d}{dx} \begin{bmatrix} y^1(x) \\ y^2(x) \\ \vdots \\ y^N(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(y^1, \dots, y^N, x) \\ f(y^2, \dots, y^N, x) \\ \vdots \\ f(y^1, \dots, y^N, x) \end{bmatrix},$$

и запишем для неё неявный метод:

$$\begin{cases} k_i^\alpha = f^\alpha(y_0^\beta + h \sum_{j=1}^s a_i^j k_j^\beta, x_0 + c_i h), \\ y_1^\alpha = y_0^\alpha + h \sum_{i=1}^s b^i k_i^\alpha, \\ i, j = 1, \dots, s; \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N. \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} g_i^\alpha(h) = y_0^\alpha + h \sum_{j=1}^s a_i^j f^\alpha(g_j^\beta, x_0 + c_j h), \\ y_1^\alpha(h) = y_0^\alpha + h \sum_{i=1}^s b^i f^\alpha(g_i^\beta, x_0 + c_i h), \\ i, j = 1, \dots, s; \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N. \end{cases}$$

Неявное правило средней точки представляет собой частный случай неявного метода Рунге–Кутты:

$$\begin{array}{c|c} 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1 \end{array}$$

Ещё один пример — метод Хаммера–Холлингсуорта:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 2/3 & 1/3 & 1/3 \\ \hline & 1/3 & 1/3 \end{array}$$

Определение порядка неявного метода Рунге–Куты и вывод условий порядка совпадают с аналогичными для явного метода Рунге–Кутты.

Основная сложность в использовании неявных методов Рунге–Кутты состоит в том, что невозможно вычислить значения k_i последовательно, необходимо решить систему уравнений. Возникает вопрос,

имеет ли вообще система уравнений (2.16) численное решение? Ответ на этот вопрос получил Батчер (1964) сформулировав и доказав следующую теорему [21].

ТЕОРЕМА 2. Пусть $f^\alpha: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\alpha = 1, \dots, n$ — непрерывная и удовлетворяющая условию Липшица с постоянной L функция в некоторой окрестности начальных условий. Если выполнено неравенство

$$h > \frac{1}{L \max_i \sum_j |a_j^i|}$$

то существует единственное решение уравнения (2.16), которое может быть получено интегрированием. Если $f^\alpha(x, y^\beta) \in C^p$, то все k_i как функции h также принадлежат C^p .

Для жёстких задач (для которых L велико) теорема даёт весьма сильные ограничения длины шага, неприменимые на практике.

2.9. Раздельные методы Рунге-Кутты

Сурис в своей статье [10] называет такие методы *гамильтоновыми методами Рунге-Кутты*. Рассмотрим следующую задачу Коши для системы ОДУ (2N дифференциальных уравнений первого порядка):

$$\begin{cases} \mathbf{y}'(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x), \mathbf{z}(x)), \\ \mathbf{z}'(x) = \mathbf{g}(x, \mathbf{y}(x), \mathbf{z}(x)), \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \quad \mathbf{z}(0) = \mathbf{z}_0, \end{cases}$$

где:

$$\mathbf{y}(x) = \begin{bmatrix} y^1(x) \\ \vdots \\ y^N(x) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{z}(x) = \begin{bmatrix} z^1(x) \\ \vdots \\ z^N(x) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}(0) = \begin{bmatrix} y_0^1 \\ \vdots \\ y_0^N \end{bmatrix}, \quad \mathbf{z}(0) = \begin{bmatrix} z_0^1 \\ \vdots \\ z_0^N \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{f}(x, \mathbf{y}) = \begin{bmatrix} f^1(x, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \\ \vdots \\ f^N(x, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g}(x, \mathbf{y}) = \begin{bmatrix} g^1(x, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \\ \vdots \\ g^N(x, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \end{bmatrix}.$$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. Пусть $s \in \mathbb{N}$ — число стадий, $c_1, c_2, \dots, c_s; b^1, \dots, b^s; [a_i^j]; \hat{b}^1, \dots, \hat{b}^s$ и $[\hat{a}_i^j]$, где $i, j = 1, \dots, s$ — вещественные параметры.

Тогда схема:

$$\begin{cases} k_i^\alpha = f^\alpha(x_0 + c_i h, y_0^\beta + h a_i^j k_j^\beta, z_0^\beta + h \hat{a}_i^j \hat{k}_j^\beta), \\ \hat{k}_i^\alpha = g^\alpha(x_0 + c_i h, y_0^\beta + h a_i^j k_j^\beta, z_0^\beta + h \hat{a}_i^j \hat{k}_j^\beta), \\ y_1^\alpha = y_0^\alpha + h b^i k_i^\alpha, \\ z_1^\alpha = z_0^\alpha + h \hat{b}^i \hat{k}_i^\alpha, \\ i, j = 1, \dots, s; \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N \end{cases}$$

называется разделённым методом Рунге–Кутты (неявным).

Таблица Батчера для таких методов имеет более сложный вид:

c_1	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
c_2	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
c_3	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	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots
c_s	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
	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

Симметричный вид:

$$\begin{cases} Y_i^\alpha = y_0^\alpha + h a_i^j f^\alpha(x_0 + c_i h, Y_j^\beta, Z_j^\beta), \\ Z_i^\alpha = z_0^\alpha + h \hat{a}_i^j g^\alpha(x_0 + c_i h, Y_j^\beta, Z_j^\beta), \\ y_1^\alpha = y_0^\alpha + h b^i f^\alpha(x_0 + c_i h, Y_j^\beta, Z_j^\beta), \\ z_1^\alpha = z_0^\alpha + h \hat{b}^i g^\alpha(x_0 + c_i h, Y_j^\beta, Z_j^\beta), \\ i, j = 1, \dots, s; \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N \end{cases}$$

Раздельные методы Рунге–Кутты применяются для решения уравнений второго порядка вида:

$$y''(x) = f(x, y(x), y'(x)),$$

с начальными условиями $y(x_0) = y_0$, $y'(x_0) = y'_0$. Уравнение можно преобразовать к виду:

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} y(x) \\ y'(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y'(x) \\ f(x, y(x), y'(x)) \end{bmatrix}.$$

Запишем для этой системы отдельный метод Рунге-Кутты:

$$\begin{cases} k_i = y'_0 + h\hat{a}_i^j \hat{k}_j, \\ \hat{k}_i = f(x_0 + c_i h, y_0 + h\hat{a}_i^j k_j, y'_0 + h\hat{a}_i^j \hat{k}_j), \\ y_1 = y_0 + h\bar{b}^i k_i, \\ y'_1 = y'_0 + h\hat{b}^i \hat{k}_i, \\ i, j = 1, \dots, s. \end{cases}$$

Подставив k_i в остальные формулы, получим:

$$\begin{cases} \hat{k}_i = f(x_0 + c_i h, y_0 + c_i h y'_0 + h^2 \bar{a}_i^j \hat{k}_j, y'_0 + h\hat{a}_i^j \hat{k}_j), \\ y_1 = y_0 + h y'_0 + h^2 \bar{b}^i \hat{k}_i, \\ y'_1 = y'_0 + h\hat{b}^i \hat{k}_i, \\ i, j = 1, \dots, s, \end{cases}$$

где

$$\bar{a}_i^j = a_i^l \hat{a}_l^j, \quad \bar{b}^i = b^j \hat{a}_j^i.$$

Пример реализации метода даёт таблица:

0	0	0	0	0	0	0	0	0
1/2	1/2	0	0	0	1/8	0	0	0
1/2	0	1/2	0	0	1/8	0	0	0
1	0	0	1	0	0	0	1/2	0
	1/6	2/6	2/6	1/6	1/6	1/6	1/6	0

2.10. Метод Рунге-Кутты-Нюстрёма

Особенно важный случай отдельного метода Рунге-Кутты получается, если ОДУ второго порядка имеет вид:

$$y''(x) = f(x, y(x)),$$

$$\begin{cases} \hat{k}_i = f(x_0 + c_i h, y_0 + c_i h y'_0 + h^2 \bar{a}_i^j \hat{k}_j), \\ y_1 = y_0 + h y'_0 + h^2 \bar{b}^i \hat{k}_i, \\ y'_1 = y'_0 + h\hat{b}^i \hat{k}_i, \\ i, j = 1, \dots, s. \end{cases}$$

Это метод *Рунге–Кутты–Нюстрёма* (*Nystrom*). Таблица Батчера для него существенно упрощается:

c_1	\bar{a}_1^1	\bar{a}_1^2	\bar{a}_1^3	\dots	\bar{a}_1^{s-1}	\bar{a}_1^s
c_2	\bar{a}_2^1	\bar{a}_2^2	\bar{a}_2^3	\dots	\bar{a}_2^{s-1}	\bar{a}_2^s
c_3	\bar{a}_3^1	\bar{a}_3^2	\bar{a}_3^3	\dots	\bar{a}_3^{s-1}	\bar{a}_3^s
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots
c_s	\bar{a}_s^1	\bar{a}_s^2	\bar{a}_s^3	\dots	\bar{a}_s^{s-1}	\bar{a}_s^s
<hr/>						
	b^1	b^2	b^3	\dots	b^{s-1}	b^s
<hr/>						
	b^1	b^2	b^3	\dots	b^{s-1}	b^s

Для системы уравнений второго порядка

$$\begin{cases} \ddot{y}^\alpha = f^\alpha(x, y^\beta(x)), \\ y^\alpha(x_0) = y_0^\alpha, \\ \dot{y}^\alpha(x_0) = \dot{y}_0^\alpha \stackrel{\text{not}}{=} z^\alpha(x_0) = z_0^\alpha. \end{cases}$$

запишем метод Рунге–Кутты–Нюстрёма в наиболее используемом, симметричном виде:

$$\begin{cases} Y_i^\alpha = y_0^\alpha + c_i h z_0^\alpha + h^2 \bar{a}_i^j f^\alpha(x_0 + c_j h, Y_j^\beta), \\ y_1^\alpha = y_0^\alpha + h z_0^\alpha + h^2 \bar{b}^i f^\alpha(x_0 + c_i h, Y_i^\beta), \\ z_1^\alpha = z_0^\alpha + h b^i f^\alpha(x_0 + c_i h, Y_i^\beta). \end{cases}$$

2.11. Контрольные вопросы

1. Дайте классификацию численных методов по Батчеру.
2. Что такое стадийность? Порядок? Шаг?
3. Запишите явный метод Рунге–Кутты для одного ОДУ, для системы ОДУ. Запишите неявный метод для тех же случаев.
4. Прodelайте то же самое для раздельного метода Рунге–Кутты.
5. Прodelайте то же самое для метода Рунге–Кутты–Нюстрёма.
6. Запишите таблицу Батчера для методов Рунге–Кутты, раздельных методов Рунге–Кутты и методов Рунге–Кутты–Нюстрёма.
7. К какому из перечисленных выше методов относятся методы: Эйлера, Штёрмера–Верле, средней точки? Запишите их таблицы Батчера.
8. Что такое метод чехарды (leap-frog method)?

-
9. В чем сложность нахождения условий порядка для методов семейства Рунге–Кутты?
 10. В чем сложность решений уравнений порядка для методов семейства Рунге–Кутты?

Задача: получите условия порядка для метода Рунге–Кутты 3-го порядка 3-й стадийности и для раздельного метода Рунге–Кутты 2-го порядка, 2-й стадийности.

Глава 3. Гамильтонов формализм на кокасательных расслоениях и симплектическая структура

3.1. Функции Лагранжа и Гамильтона

Пусть для окрестности U точки P многообразия M задана карта и, следовательно, координаты q^1, \dots, q^N . В дальнейшем будем считать, что для любой окрестности многообразия M можно задать некоторую карту и будем говорить о координатах на M , имея в виду координаты в некоторой окрестности. Многообразие M называется *конфигурационным*.

Пусть некоторая механическая система имеет N координат $q^i = (q^1(t), \dots, q^N(t))$. Эволюция во времени задаётся кривой $q^i(t)$ на многообразии M . Построение гамильтонова формализма начинается с задания функции Лагранжа $L(q^i, \dot{q}^i)$, определения импульса:

$$p_i = \frac{\partial L(q^i, \dot{q}^i)}{\partial \dot{q}^i}, \quad \dot{q}^i = \frac{dq^i}{dt}, \quad (3.1)$$

и задания функция Гамильтона в виде:

$$H(p_i, q^i) = p_i \dot{q}^i - L(q^i, \dot{q}^i).$$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 6. Лагранжиан по называется *невыврожденным*, если определитель Гессе невырожден:

$$\det \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j} \right) \neq 0$$

и *сильно невырожденным*, если он невырожден и уравнения (3.1) можно гладко и взаимно-однозначно разрешить в виде: $\dot{q}^i = v^i(q^i, p_i)$, $\forall q^i, \dot{q}^i$.

Если лагранжиан L сильно невырожден, то уравнения Эйлера–Лагранжа эквивалентны уравнениям Гамильтона:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial L}{\partial q^i} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial H}{\partial q^i} = -\frac{dp_i}{dt}, \quad \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{dq^i}{dt}.$$

Примем во внимание то, что $\vec{v}(t) = (\dot{q}^1, \dots, \dot{q}^N)^T$ есть поле векторов на многообразии M (т.е. сечение касательного расслоения TM), а

$\tilde{p}(t) = (p_1, \dots, p_N)$ — поле 1-форм (ковекторов) на M (т.е. сечение кокасательного расслоения T^*M). Тогда:

- функция Лагранжа $L(q^i, \dot{q}^i)$ является функцией на касательном расслоении TM ,
- функция Гамильтона $H(q^i, p_i)$ является функцией на кокасательном расслоении T^*M .

3.2. Фазовое пространство и симплектическая структура

Пространство T^*M называется *фазовым пространством*. Фазовое пространство имеет размерность $2N$ и по определению является многообразием.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 7. Кососимметричная 2-форма $\tilde{\omega} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{d}q^i \wedge \tilde{d}p_j$, определённая на T^*M , называется *симплектической формой*.

Пара $(T^*M, \tilde{\omega})$ называется *симплектическим многообразием*. Говорят, что на многообразии T^*M задана *симплектическая структура*.

Далее, для простоты будем рассматривать двумерное фазовое пространство T^*M с симплектической формой $\tilde{\omega} = \tilde{d}p \wedge \tilde{d}q$. Рассмотрим кривую $p = p(t)$, $q = q(t)$. Касательный вектор к этой кривой имеет вид:

$$\vec{u} = \frac{d}{dt} = \frac{dq}{dt} \frac{\partial}{\partial q} + \frac{dp}{dt} \frac{\partial}{\partial p}.$$

Так как $\tilde{d}\tilde{\omega} = \tilde{d}\tilde{d}p \wedge \tilde{d}q + \tilde{d}p \wedge \tilde{d}\tilde{d}q \equiv 0$, то производная Ли $\mathcal{L}_{\vec{u}}$ от симплектической формы по векторному полю \vec{u} равна нулю.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 8. Векторное поле \vec{u} , удовлетворяющее условию $\mathcal{L}_{\vec{u}}\tilde{\omega} \equiv 0$, называется *гамильтоновым векторным полем*.

Найдём свёртку $\tilde{\omega}(\vec{u})$. По определению $\tilde{\omega} = \tilde{d}q \otimes \tilde{d}p - \tilde{d}p \otimes \tilde{d}q$, следовательно:

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}(\vec{u}) &= \tilde{d}q(\vec{u})\tilde{d}p - \tilde{d}p(\vec{u})\tilde{d}q = \langle \tilde{d}q, \vec{u} \rangle \tilde{d}p - \langle \tilde{d}p, \vec{u} \rangle \tilde{d}q = \\ &= \tilde{d}q \left(\frac{d}{dt} \right) \tilde{d}p - \tilde{d}p \left(\frac{d}{dt} \right) \tilde{d}q = \frac{dq}{dt} \tilde{d}p - \frac{dp}{dt} \tilde{d}q = \frac{\partial H}{\partial p} \tilde{d}p + \frac{\partial H}{\partial q} \tilde{d}q = \tilde{d}H, \end{aligned}$$

$$\tilde{\omega}(\vec{u}, \cdot) = \tilde{d}H(\cdot) \Rightarrow \tilde{\omega}(\vec{u}) = \tilde{d}H \Rightarrow \tilde{d}\tilde{\omega} = \tilde{d}(\tilde{d}H) = 0.$$

3.3. Канонические преобразования

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 9. *Каноническим преобразованием* называется преобразование, сохраняющее вид $\tilde{\omega}$, т.е. сохраняющее симплектическую структуру.

Новые координаты $P = P(q, p)$ и $Q = Q(q, p)$ будут каноническими, если:

$$\tilde{d}q \wedge \tilde{d}p = \tilde{d}Q \wedge \tilde{d}P,$$

$$\begin{aligned} \tilde{d}Q \wedge \tilde{d}P &= \left(\frac{\partial Q}{\partial q} \tilde{d}q + \frac{\partial Q}{\partial p} \tilde{d}p \right) \wedge \left(\frac{\partial P}{\partial q} \tilde{d}q + \frac{\partial P}{\partial p} \tilde{d}p \right) = \\ &= \frac{\partial Q}{\partial q} \frac{\partial P}{\partial q} \tilde{d}q \wedge \tilde{d}q + \frac{\partial Q}{\partial q} \frac{\partial P}{\partial p} \tilde{d}q \wedge \tilde{d}p + \\ &+ \frac{\partial Q}{\partial p} \frac{\partial P}{\partial q} \tilde{d}p \wedge \tilde{d}q + \frac{\partial Q}{\partial p} \frac{\partial P}{\partial p} \tilde{d}p \wedge \tilde{d}p = \left(\frac{\partial Q}{\partial q} \frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p} \frac{\partial P}{\partial q} \right) \tilde{d}q \wedge \tilde{d}p. \end{aligned}$$

Получаем, что каноническое преобразование должно удовлетворять следующему условию:

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial q} \frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p} \frac{\partial P}{\partial q} \right) = 1 \Leftrightarrow \det \frac{\partial(Q, P)}{\partial(q, p)} = 1.$$

3.4. Скобки Пуассона и $\tilde{\omega}$

Один из наиболее важных моментов описанного геометрического подхода к гамильтоновой динамике состоит в том, что форма $\tilde{\omega}$ играет ту же роль, какую метрика играет на римановых многообразиях — задаёт взаимно однозначное соответствие между векторами и 1-формами.

Если \vec{V} — векторное поле на M , то мы определяем поле 1-форм \tilde{V} следующей формулой:

$$\begin{aligned} \tilde{V} &= \tilde{V}(\cdot) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\omega}(\vec{V}, \cdot) = \tilde{\omega}(\vec{V}) \text{ — бескоординатная запись,} \\ (\tilde{V})_i &= (\tilde{\omega})_{ij}(\vec{V})^j = \omega_{ij} V^j \text{ — координатная запись.} \end{aligned}$$

Аналогично по заданному полю 1-форм $\tilde{\alpha}$ определяется однозначно векторное поле $\vec{\alpha}$:

$$\vec{\alpha} = \tilde{\omega}(\vec{\alpha}, \cdot) = \tilde{\omega}(\vec{\alpha}).$$

Пусть на многообразии заданы две функции f и g . Введём вектор-

ные поля:

$$\vec{X}_f \stackrel{\text{def}}{=} \vec{d}f \text{ и } \vec{X}_g \stackrel{\text{def}}{=} \vec{d}g,$$

где $\vec{d}f$ — векторный градиент, определяется из равенства $\tilde{d}f = \tilde{\omega}(\vec{d}f) = \tilde{\omega}(\vec{X}_g) = \tilde{X}_g$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 10. Скобками Пуассона называется скаляр

$$\{f, g\} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\omega}(\vec{X}_f, \vec{X}_g).$$

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}(\vec{X}_f, \cdot) &= \tilde{\omega}(\vec{d}f, \cdot) = \tilde{d}f(\cdot) \Rightarrow \\ \tilde{\omega}(\vec{X}_f, \vec{X}_g) &= \tilde{\omega}(\vec{d}f, \vec{d}g) = \tilde{d}f(\vec{d}g) = \langle \vec{d}f, \vec{d}g \rangle = \langle \tilde{d}f, \vec{X}_g \rangle, \\ \tilde{X}_g &= \tilde{d}g = \frac{\partial}{\partial q} \tilde{d}q + \frac{\partial}{\partial p} \tilde{d}p. \end{aligned}$$

Теперь можно найти вектор \vec{X}_g :

$$\vec{X}_g = \frac{\partial g}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} \Rightarrow \tilde{\omega}(\vec{X}_f, \vec{X}_g) = \tilde{d}f(\vec{X}_g) = \vec{X}_g f = \frac{\partial g}{\partial q} \frac{\partial f}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial q}.$$

Таким образом, определены скобки Пуассона функций f и g . Определение поясняет их геометрический смысл и показывает, что скобки Пуассона не зависят от системы координат, а зависят только от $\tilde{\omega}$. При канонических преобразованиях вид $\tilde{\omega}$ не меняется и, следовательно, сохраняются и скобки Пуассона. Это означает, что сохраняются все интегралы движения, так как нулевая скобка Пуассона переходит в нулевую.

Итак, при сохранении симплектической формы, сохраняются все интегралы движения системы, в том числе и полная энергия H .

3.5. Контрольные вопросы

1. В чем основное отличие векторной (ньютоновской) механики от аналитической механики?
2. Дайте определение конфигурационного пространства, обобщенной координаты и скорости. Приведите примеры.
3. Что такое функция Лагранжа? Запишите уравнения Лагранжа. Из какого фундаментального принципа они следуют? Дайте формулировку этого принципа.
4. Запишите уравнения Гамильтона. Как определяется обобщенный

импульс? В чем преимущество уравнений Гамильтона над уравнениями Лагранжа?

5. Каков физический смысл функции Гамильтона?
6. Дайте определение первого интеграла системы дифференциальных уравнений. Какие первые интегралы, имеющий физический смысл вы знаете?
7. Дайте определение консервативной системы.
8. Дайте определение скобок Пуассона. Запишите их основные свойства.
9. Дайте определение симплектической формы. Как она связана со скобками Пуассона?
10. Какие преобразования называются каноническими? Приведите пример канонических преобразований.
11. Сохраняется ли симплектическая форма в случае неконсервативной системы?

Задача: Получите канонические уравнения для многомерного фазового пространства применив преобразование Лежандра. Объясните откуда возникает условие.

$$\sum_{i,j} \frac{\partial^2 L}{\partial q^i \partial q^j} \neq 0$$

Глава 4. Симплектические методы

4.1. Введение

Известно, что в задачах математической физики большую роль играют различные глобальные структуры и инварианты. Это, например, законы сохранения, группы преобразований и геометрические структуры (метрика, косая форма и т.д.). Часто они также важны для понимания физического явления как и точные решения дифференциальных уравнений.

Многие из перечисленных качественных характеристик связаны друг с другом. Так, например, согласно теореме Нётр, каждая группа преобразований функции Лагранжа, относительно которой лагранжиан инвариантен, связана с некоторой сохраняющейся величиной.

В связи со вышесказанным можно выделить два подхода к построению численных методов. Первый подход заключается в стремлении уменьшить локальную и глобальную ошибку аппроксимации. В результате получается универсальный метод общего назначения, дающий численное решение большой точности. Такой метод может не учитывать глобальных характеристик рассматриваемой задачи. Второй подход заключается в учёте глобальной структуры решаемой задачи. Изначально выделяется глобальная характеристика, затем с учётом этой характеристики разрабатывается численный метод. В результате получаем метод неуниверсальный, но хорошо подходящий для решения конкретной задачи.

До изобретения компьютеров, а также в начале развития вычислительной техники внимание учёных было сосредоточено на получении численных методов, позволяющих достичь большей точности решения с минимальной затратой ресурсов и времени. Поэтому изначально доминировал первый подход. В дальнейшем рост вычислительной мощности привёл к смещению внимания на подходы второго типа.

Рассмотрим частный случай численных методов второго типа, применяемых для решения уравнений Гамильтона и учитывающих симплектическую структуру. Такие численные методы получили название *симплектических интеграторов* или *канонических численных методов*. Основы теории были заложены в конце 80-х и начале 90-х годов прошлого века. С тех пор вышло большое количество статей, посвящённых данной теме.

Широко известны лишь несколько работ на русском языке посвящённых теории симплектических интеграторов. Это ряд статей Ю.Б. Суриса [10, 13]. Можно указать три книги, где содержится последовательное изложение рассматриваемого вопроса. Это в первую очередь монография И.М. Санс-Серны [11] и монографии Хайрера и

др. [16, 18], в которых симплектическим интеграторам посвящены отдельные параграфы. Краткий обзор по теме можно найти в статье [12] и в конспектах лекций [15]. К пионерским работам относятся [9, 19, 31].

4.2. Проблемы классических численных методов

В качестве первого примера рассмотрим гармонический осциллятор с $\omega \neq 1$. Для наглядности иллюстраций будем рассматривать двумерное фазовое пространство $(p(t), q(t)) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, $t \in [t_0, T] \in \mathbb{R}$. Запишем гамильтониан и канонические уравнения:

$$H(p, q) = \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 q^2),$$

$$\begin{cases} \dot{p}(t) = -\omega^2 q(t), \\ \dot{q}(t) = p(t), \end{cases}$$

зададим начальные условия: $p(t_0) = p_0, q(t_0) = q_0$.

Каждый численный метод будем записывать для задачи Коши для системы из двух ОДУ:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} y^\alpha(x) &= f^\alpha(x, y^\beta(x)), \\ \alpha &= 1, 2; \quad \beta = 1, 2; \\ \begin{cases} \frac{d}{dx} y^1(x) &= f^1(x, y^1, y^2), \\ \frac{d}{dx} y^2(x) &= f^2(x, y^1, y^2). \end{cases} \end{aligned}$$

ПРИМЕР 4.2.1 (ЯВНЫЙ МЕТОД ЭЙЛЕРА).

$$y_{k+1}^\alpha = y_k^\alpha + h f^\alpha(x_k, y_k^\beta), \quad \begin{cases} y_{k+1}^1 = y_k^1 + h f^1(x_k, y_k^1, y_k^2), \\ y_{k+1}^2 = y_k^2 + h f^2(x_k, y_k^1, y_k^2). \end{cases}$$

$$\alpha = 1, 2; \quad \beta = 1, 2;$$

Для гармонического осциллятора явный метод Эйлера:

$$\begin{cases} p_{k+1} = p_k - \omega^2 h q_k, \\ q_{k+1} = q_k + h p_k, \end{cases} \quad \begin{bmatrix} p_{k+1} \\ q_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -\omega h \\ h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_k \\ q_k \end{bmatrix}$$

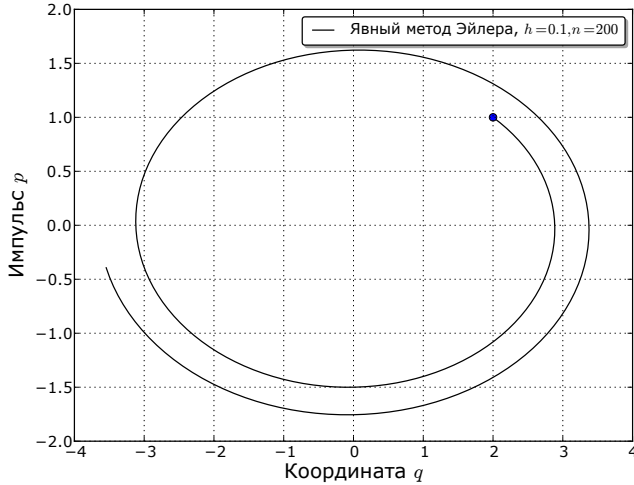


Рис. 4.1. Явный метод Эйлера

ПРИМЕР 4.2.2 (НЕЯВНЫЙ МЕТОД ЭЙЛЕРА).

$$y_{k+1}^\alpha = y_k^\alpha + h f^\alpha(x_{k+1}, y_{k+1}^\beta), \quad \begin{cases} y_{k+1}^1 = y_k^1 + h f^1(x_{k+1}, y_{k+1}^1, y_{k+1}^2), \\ y_{k+1}^2 = y_k^2 + h f^2(x_{k+1}, y_{k+1}^1, y_{k+1}^2). \end{cases}$$

$\alpha = 1, 2; \beta = 1, 2;$

Для гармонического осциллятора неявный метод Эйлера:

$$\begin{cases} p_{k+1} = p_k - \omega^2 h q_{k+1}, \\ q_{k+1} = q_k + h p_{k+1}, \end{cases}$$

можно записать в явном виде:

$$\begin{cases} p_{k+1} = \frac{1}{1 + h^2 \omega^2} (p_k - \omega^2 h q_k), \\ q_{k+1} = \frac{1}{1 + h^2 \omega^2} (q_k + h p_k), \end{cases} \quad \begin{bmatrix} p_{k+1} \\ q_{k+1} \end{bmatrix} = \frac{1}{1 + h^2 \omega^2} \begin{bmatrix} 1 & -\omega h \\ h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_k \\ q_k \end{bmatrix}.$$

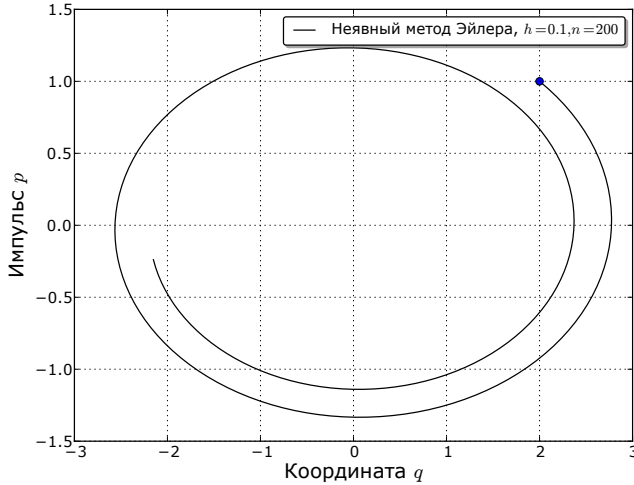


Рис. 4.2. Неявный метод Эйлера

ПРИМЕР 4.2.3 (ЯВНО-НЕЯВНЫЙ МЕТОД ЭЙЛЕРА).

$$\begin{cases} \hat{y}_{k+1}^\alpha = y_k^\alpha + h f^\alpha(x_k, y_k^\beta), \\ y_{k+1}^\alpha = y_k^\alpha + h f^\alpha(x_k, \hat{y}_{k+1}^\beta), \\ \alpha = 1, 2; \beta = 1, 2; \end{cases} \quad \begin{cases} \hat{y}_{k+1}^1 = y_k^1 + h f^1(x_k, y_k^1, y_k^2), \\ \hat{y}_{k+1}^2 = y_k^2 + h f^2(x_k, y_k^1, y_k^2), \\ y_{k+1}^1 = y_k^1 + h f^1(x_{k+1}, \hat{y}_{k+1}^1, \hat{y}_{k+1}^2), \\ y_{k+1}^2 = y_k^2 + h f^2(x_{k+1}, \hat{y}_{k+1}^1, \hat{y}_{k+1}^2). \end{cases}$$

Для гармонического осциллятора неявный метод Эйлера:

$$\begin{cases} p_{k+1} = (1 - h^2 \omega^2) p_k - \omega^2 h q_k, \\ q_{k+1} = h p_k + (1 - h^2 \omega^2) q_k, \end{cases} \quad \begin{bmatrix} p_{k+1} \\ q_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - h^2 \omega^2 & -\omega^2 h \\ h & 1 - h^2 \omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_k \\ q_k \end{bmatrix}.$$

Если же к первому каноническому уравнению $\dot{p}(t) = -\omega^2 q(t)$ применить явный метод Эйлера, а ко второму уравнению явно-неявный метод Эйлера, то получим следующую схему:

$$\begin{cases} p_{k+1} = p_k - \omega^2 h q_k, \\ q_{k+1} = h p_k + (1 - h^2 \omega^2) q_k, \end{cases} \quad \begin{bmatrix} p_{k+1} \\ q_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -\omega^2 h \\ h & 1 - h^2 \omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_k \\ q_k \end{bmatrix}.$$

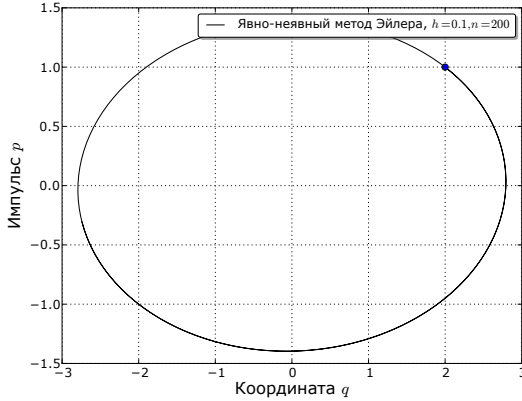


Рис. 4.3. Явно-неявный метод Эйлера

ПРИМЕР 4.2.4 (2-СТАДИЙНЫЙ МЕТОД РУНГЕ-КУТТЫ 2-ГО ПОРЯДКА).

$$\begin{cases} k_1^1 = f^1(y_k^1 + h(a_1^1 k_1^1 + a_1^2 k_2^1), y_k^2 + h(a_1^1 k_1^2 + a_1^2 k_2^2), x_k + c_1 h), \\ k_1^2 = f^2(y_k^1 + h(a_1^1 k_1^1 + a_1^2 k_2^1), y_k^2 + h(a_1^1 k_1^2 + a_1^2 k_2^2), x_k + c_1 h), \\ k_2^1 = f^1(y_k^1 + h(a_2^1 k_1^1 + a_2^2 k_2^1), y_k^2 + h(a_2^1 k_1^2 + a_2^2 k_2^2), x_k + c_2 h), \\ k_2^2 = f^2(y_k^1 + h(a_2^1 k_1^1 + a_2^2 k_2^1), y_k^2 + h(a_2^1 k_1^2 + a_2^2 k_2^2), x_k + c_2 h), \\ y_{k+1}^1 = y_k^1 + h(b^1 k_1^1 + h b^2 k_2^1), \\ y_{k+1}^2 = y_k^2 + h(b^1 k_1^2 + h b^2 k_2^2). \end{cases}$$

Используя метод с таблицей Батчера:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}$$

для гармонического осциллятора получим:

$$\begin{cases} p_{k+1} = p_k - \omega^2 h q_k - \frac{1}{2} h^2 \omega^2 p_k, \\ q_{k+1} = q_k + h p_k - \frac{1}{2} \omega^2 h^2 q_k. \end{cases} \quad \begin{bmatrix} p_{k+1} \\ q_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{1}{2} h^2 \omega^2 & -\omega^2 h \\ h & 1 - \frac{1}{2} h^2 \omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_k \\ q_k \end{bmatrix}.$$

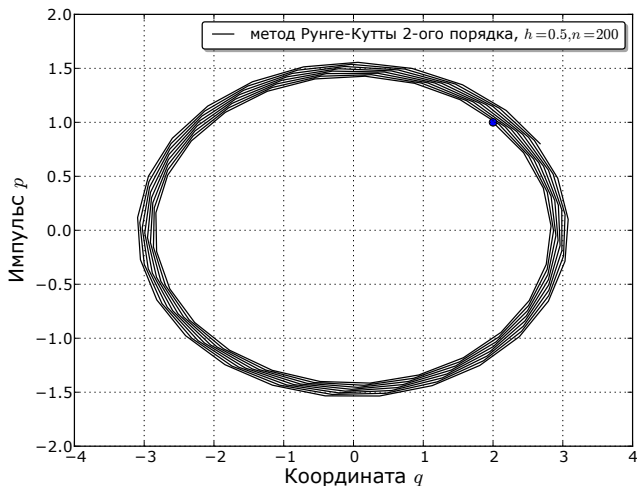


Рис. 4.4. Двустадийный метод Рунге-Кутты 2-го порядка

ПРИМЕР 4.2.5 (3-СТАДИЙНЫЙ МЕТОД РУНГЕ-КУТТЫ 3-ГО ПОРЯДКА).

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1^1 = f^1(y_k^1 + h(a_1^1 k_1^1 + a_2^1 k_2^1 + a_3^1 k_3^1), y_k^2 + h(a_1^1 k_1^2 + a_2^1 k_2^2 + a_3^1 k_3^2), x_k + c_1 h), \\ k_2^1 = f^1(y_k^1 + h(a_2^1 k_1^1 + a_2^2 k_2^1 + a_3^2 k_3^1), y_k^2 + h(a_2^1 k_1^2 + a_2^2 k_2^2 + a_3^2 k_3^2), x_k + c_2 h), \\ k_3^1 = f^1(y_k^1 + h(a_3^1 k_1^1 + a_3^2 k_2^1 + a_3^3 k_3^1), y_k^2 + h(a_3^1 k_1^2 + a_3^2 k_2^2 + a_3^3 k_3^2), x_k + c_3 h), \\ k_1^2 = f^2(y_k^1 + h(a_1^1 k_1^1 + a_2^1 k_2^1 + a_3^1 k_3^1), y_k^2 + h(a_1^1 k_1^2 + a_2^1 k_2^2 + a_3^1 k_3^2), x_k + c_1 h), \\ k_2^2 = f^2(y_k^1 + h(a_2^1 k_1^1 + a_2^2 k_2^1 + a_3^2 k_3^1), y_k^2 + h(a_2^1 k_1^2 + a_2^2 k_2^2 + a_3^2 k_3^2), x_k + c_2 h), \\ k_3^2 = f^2(y_k^1 + h(a_3^1 k_1^1 + a_3^2 k_2^1 + a_3^3 k_3^1), y_k^2 + h(a_3^1 k_1^2 + a_3^2 k_2^2 + a_3^3 k_3^2), x_k + c_3 h), \\ y_{k+1}^1 = y_k^1 + h(b^1 k_1^1 + b^2 k_2^1 + b^3 k_3^1), \\ y_{k+1}^2 = y_k^2 + h(b^1 k_1^2 + b^2 k_2^2 + b^3 k_3^2). \end{array} \right.$$

Используя метод с таблицей Батчера:

0	0	0	0
2/3	2/3	0	0
2/3	1/3	1/3	0
	1/4	0	3/4

для гармонического осциллятора получим:

$$\begin{cases} p_{k+1} = p_k - \omega^2 h q_k - \frac{1}{2} h^2 \omega^2 p_k + \frac{1}{6} h^3 \omega^4 q_k, \\ q_{k+1} = q_k + h p_k - \frac{1}{2} \omega^2 h^2 q_k - \frac{1}{6} h^3 \omega^2 p_k. \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} p_{k+1} \\ q_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{1}{2} h^2 \omega^2 & -\omega^2 h + \frac{1}{6} h^3 \omega^4 \\ h - \frac{1}{6} h^3 \omega^2 & 1 - \frac{1}{2} h^2 \omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_k \\ q_k \end{bmatrix}.$$

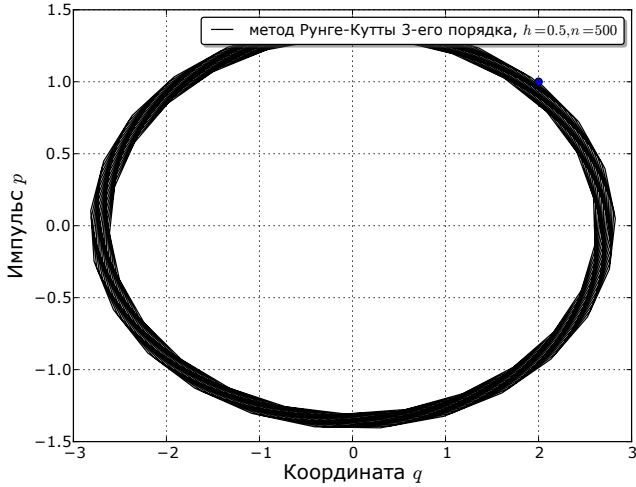


Рис. 4.5. Трёхстадийный метод Рунге-Кутты 3-го порядка

ПРИМЕР 4.2.6 (НЕЯВНОЕ ПРАВИЛО СРЕДНЕЙ ТОЧКИ).

$$\begin{cases} k_1^1 = f^1 \left(y_k^1 + \frac{1}{2} h, y_k^2 + \frac{1}{2} h k_1^2, x_k + \frac{1}{2} h \right), \\ k_1^2 = f^2 \left(y_k^1 + \frac{1}{2} h, y_k^2 + \frac{1}{2} h k_1^2, x_k + \frac{1}{2} h \right), \\ y_{k+1}^1 = y_k^1 + h k_1^1, \\ y_{k+1}^2 = y_k^2 + h k_1^2. \end{cases}$$

для гармонического осциллятора метод можно записать в явном виде:

$$\begin{cases} p_{k+1} = \frac{4}{4 + (h\omega)^2} \left(\left(1 - \frac{1}{4}h^2\omega^2\right)p_k - h\omega^2 q_k \right), \\ q_{k+1} = \frac{4}{4 + (h\omega)^2} \left(\left(1 - \frac{1}{4}h^2\omega^2\right)q_k + hp_k \right). \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} p_{k+1} \\ q_{k+1} \end{bmatrix} = \frac{4}{4 + (h\omega)^2} \begin{bmatrix} 1 - \frac{1}{4}(h\omega)^2 & -\omega^2 h \\ h & 1 - \frac{1}{4}(h\omega)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_k \\ q_k \end{bmatrix}.$$

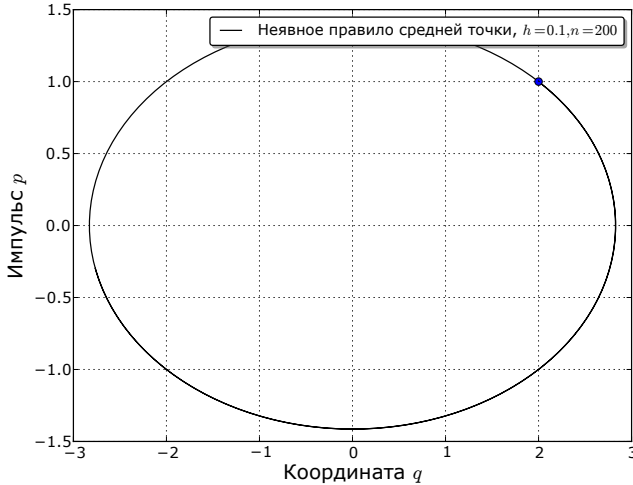


Рис. 4.6. Неявное правило средней точки

ПРИМЕР 4.2.7 (МЕТОД АДАМСА–МОУЛТОНА 2-ГО ПОРЯДКА).

$$y_{k+1}^\alpha = y_k^\alpha + \frac{1}{2} \left(f^\alpha(y_{k+1}^\beta, x_{k+1}) + f^\alpha(y_k^\beta, x_k) \right), \quad y_0^\alpha = y^\alpha(x_0).$$

Для линейного осциллятора данный численный метод даёт ту же схему, что и неявный метод средней точки.

4.3. Канонические уравнения. Решающий оператор

В [11] симплектичность рассматривается как характеристика гамильтоновой системы в терминах её решения (т.е. в терминах решения канонических уравнений).

Будем рассматривать уравнение Гамильтона на отрезке $T \in \mathbb{R}$. Пусть $t_0, t \in T$. Решающим оператором (solution operator) является:

$$\Phi_H(t, t_0): \begin{bmatrix} p_\alpha(t_0) \\ q^\alpha(t_0) \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} p_\alpha(t) \\ q^\alpha(t) \end{bmatrix}.$$

Таким образом $\Phi_H(t, t_0)$ задаёт отображение фазового пространства на себя же: $\Omega \rightarrow \Omega$. Обычно под $(p_\alpha(t_0), q^\alpha(t_0))^T$ понимают константы (начальные условия). Однако, можно воспринимать $(p_\alpha(t_0), q^\alpha(t_0))^T$ как некоторые параметры, которые могут иметь различные значения. Можно записать короче:

$$\begin{bmatrix} p_\alpha(t) \\ q^\alpha(t) \end{bmatrix} = \Phi_H(t, t_0) \begin{bmatrix} p_\alpha(t_0) \\ q^\alpha(t_0) \end{bmatrix}$$

Задаваемая таким образом точка фазового пространства определена, только если существует решение канонических уравнений с начальным условием $(p_\alpha(t_0), q^\alpha(t_0))^T$. Надо заметить, что область определения решающего оператора может быть существенно меньше всего фазового пространства.

ПРИМЕР 4.3.1. Рассмотрим гармонический осциллятор. Уравнения Гамильтона и их решения для начальной точки $(p(t_0), q(t_0))$ имеют вид:

$$\begin{cases} \dot{p}(t) = -q, \\ \dot{q}(t) = p, \end{cases} \quad \begin{cases} p(t) = p(t_0) \cos(t - t_0) - q(t_0) \sin(t - t_0), \\ q(t) = p(t_0) \sin(t - t_0) + q(t_0) \cos(t - t_0). \end{cases}$$

Легко находится матрица решающего оператора:

$$\Phi_H(t, t_0) = \begin{pmatrix} \cos(t - t_0) & -\sin(t - t_0) \\ \sin(t - t_0) & \cos(t - t_0) \end{pmatrix}$$

ПРИМЕР 4.3.2. Рассмотрим гамильтониан вида $H = pq^2$. Канонические уравнения и их решения для начальной точки $(p(t_0), q(t_0))$ имеют вид:

$$\begin{cases} \dot{p}(t) = -2pq, \\ \dot{q}(t) = q^2, \end{cases} \quad \begin{cases} q(t) = \frac{q_0}{1 - (t - t_0)q_0}, \\ p(t) = p(1 - (t - t_0)q_0)^2. \end{cases}$$

Можем записать решающий оператор в виде:

$$(p, q) = \Phi_H(t, t_0)(p_0, q_0) = \left(p_0(1 - (t - t_0)q_0)^2, \frac{q_0}{1 - (t - t_0)q_0} \right)$$

Область определения $\Phi_H(t, t_0)$ при $t - t_0 > 0$ задаётся неравенством: $q_0 < \frac{1}{(t - t_0)}$. Видно, что область определения Φ_H меньше области определения \mathbb{R}^2 гамильтониана H .

ТЕОРЕМА 3 (СМ. [11]). Для решающего оператора $\Phi_h(t, t_0)$ выполняется следующее соотношение:

$$\Phi_H(t_2, t_0) = \Phi_H(t_2, t_1)\Phi_H(t_1, t_0), \quad t_2, t_1, t_0 \in T$$

Для автономных гамильтонианов оператор $\Phi_H(t, t_0)$ зависит только от разности $t - t_0$. Поэтому можем ввести обозначение:

$$\Phi_H(t, t_0) \stackrel{\text{not}}{=} \varphi_{t-t_0, H}.$$

Часто $t_0 = 0$ и преобразование фазового пространства, задаваемое оператором $\phi_{s, H}$, называется *потоком* канонических уравнений.

4.4. Классификация симплектических интеграторов

В основу классификации симплектических интеграторов можно положить способы их. Выделяют четыре способа построения симплектических интеграторов [12]:

- Накладывание дополнительных условий на коэффициенты методов типа Рунге-Кутты [1, 2, 10, 20, 26, 28]. Методы, полученные этим путём, будем называть *симплектическими методами Рунге-Кутты*.
- Композиция нескольких симплектических численных методов для получения интегратора более высокого порядка (используются понятия *композиции* численных методов, *присоединённого* численного метода и *расщепления* векторного поля) [3–5, 14, 25, 27]. Такие методы будем называть *составными симплектическими методами*. В английской литературе используется термин «splitting method».

- Получение симплектических интеграторов как частный случай геометрических интеграторов [6]. Геометрические интеграторы составляют отдельную обширную область численных методов.
- Использование генерирующих функций.

Следует отметить, что эта классификация условна — часто одну и ту же численную схему можно получить сразу несколькими способами.

4.5. Численный метод Штёрмера–Верле

Рассмотрим задачу Коши для уравнения второго порядка:

$$y''(x) = f(y), \quad y(x_0) = y_0, \quad y'(x)|_{x=x_0} = y_1$$

где $y(x)$ и $f(y)$ — достаточно гладкие функции. Областью определения функции $y(x)$ является отрезок $[x_0, X]$.

Заменим $y''(x)$ разностной аппроксимацией, составив разностное соотношение [30, п. 5.1.3]:

$$\begin{aligned} L_h[y_i] &= \frac{1}{h} (L_h^+[y_i] - L_h^-[y_i]) = \\ &= \frac{1}{h} \left(\frac{1}{h}(y_{k+1} - y_k) - \frac{1}{h}(y_k - y_{k+1}) \right) = \frac{1}{h^2}(y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y''(x)|_{x=x_k} &\approx \frac{1}{h} \left(\frac{1}{h}(y_{k+1} - y_k) - \frac{1}{h}(y_k - y_{k+1}) \right) = \\ &= \frac{1}{h^2}(y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}) = f(y_k). \end{aligned}$$

Окончательно получим:

$$\begin{cases} y_{k+1} = 2y_k - y_{k-1} + h^2 f(y_k), \\ y_0 = y(x_0), \quad y_1 = y'(x_0). \end{cases}$$

История этого метода весьма примечательна [22, п. 1.3]. В астрономии этот метод известен как метод Штёрмера (Carl Störmer), в молекулярной динамике — как метод Верле (Loup Verlet), а в теории уравнений в частных производных как метод чехарды (leap-frog).

Метод можно преобразовать из многошагового в многостадийный одношаговый явный метод. Для этого исходную задачу запишем в виде системы:

$$\begin{cases} z'(x) = f(y), \\ y'(x) = z(x), \end{cases}$$

$$z_{k-\frac{1}{2}} = \frac{1}{h}(y_k - y_{k-1}), \quad z_k = \frac{1}{2h}(y_{k+1} - y_{k-1}), \quad z_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{h}(y_{k+1} - y_k),$$

$$z_{k+1} = \frac{1}{2h}(y_{k+2} - y_k), \quad z_{k+\frac{3}{2}} = \frac{1}{h}(y_{k+2} - y_{k+1}).$$

Суммируя $z_{k+1/2} + z_{k-1/2} = hf(y_k)$ и $z_{k+1/2} + z_{k-1/2} = 2z_k$, получим:

$$z_{k+\frac{1}{2}} = z_k + \frac{h}{2}f(y_k).$$

Непосредственно из выражения для $z_{k+1/2}$ получим:

$$y_{k+1} = y_k + hz_{k+\frac{1}{2}}.$$

Вычитая из $z_{k+3/2} - z_{k+1/2} = hf(y_{k+1})$ $z_{k+3/2} + z_{k+1/2} = hz_{k+1}$, получим:

$$z_{k+1} = z_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}f(y_{k+1}).$$

Окончательно:

$$\begin{cases} z_{k+\frac{1}{2}} = z_k + \frac{h}{2}f(y_k), \\ y_{k+\frac{1}{2}} = y_k + hz_{k+\frac{1}{2}}, \\ z_{k+1} = z_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}f(y_{k+1}). \end{cases}$$

4.6. Условие симплектичности методов семейства Рунге-Кутты

Известно, что система условий порядка методов семейства Рунге-Кутты (под словосочетанием «методы семейства Рунге-Кутты» мы понимаем явные и неявные методы Рунге-Кутты, явные и неявные раздельные методы Рунге-Кутты и явные и неявные методы Рунге-Кутты-Нюстрёма) не определена, т.е. коэффициенты методов не определяются из этих уравнений однозначно. Этой неоднозначностью можно воспользоваться, наложив дополнительные условия, обеспечивающие симплектичность метода.

4.6.1. Условие симплектичности неявного метода Рунге-Кутты

Рассмотрим уравнения Гамильтона вида:

$$\begin{cases} \dot{p}_\alpha(t) = f_\alpha(p_\beta, q^\beta, t), \\ \dot{q}^\alpha(t) = g^\alpha(p_\beta, q^\beta, t), \\ \alpha, \beta = 1, \dots, N, \end{cases}$$

Учтём, что $q^\alpha = (q^1, \dots, q^N)^T$ — вектор, $p_\alpha = (p_1, \dots, p_N)$ — ковектор.

Запишем для данной системы метод Рунге-Кутты в самом общем виде:

$$\begin{cases} P_{i\alpha} = p_{0\alpha} + ha_i^j f_\alpha(P_{j\beta}, Q_j^\beta, t_0 + c_i h), \\ Q_i^\alpha = q_0^\alpha + ha_i^j g^\alpha(P_{j\beta}, Q_j^\beta, t_0 + c_i h), \\ p_{1\alpha} = p_{0\alpha} + hb^i f_\alpha(P_{i\beta}, Q_i^\beta, t_0 + c_i h), \\ q_1^\alpha = q_0^\alpha + hb^i g^\alpha(P_{i\beta}, Q_i^\beta, t_0 + c_i h), \\ i, j = 1, \dots, s; \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N. \end{cases}$$

ТЕОРЕМА 4. [10, 11] *если коэффициенты метода Рунге-Кутты удовлетворяют условиям*

$$b^i a_i^j + b^j a_j^i - b^i b^j = 0 \quad \text{где } \forall i, j = 1, \dots, s \quad (\text{суммирования нет}),$$

и гамильтониан — гладкая функция, то метод Рунге-Кутты является симплектическим.

Теорема была сформулирована независимо тремя учёными: Лазагни [1] (не опубликовано), Санс-Серной [20] и Сурисом [10].

Доказательство. Введём обозначения $f_{i\alpha} \stackrel{\text{not}}{=} f_\alpha(P_{i\beta}, Q_i^\beta, t_0 + c_i h)$ и $g_j^\alpha \stackrel{\text{not}}{=} g^\alpha(P_{j\beta}, Q_j^\beta, t_0 + c_j h)$. Найдём теперь условие, при котором сохраняется 2-форма $\tilde{d}p_{1\alpha_1} \wedge \tilde{d}q_1^{\alpha_2}$:

$$\begin{aligned} \tilde{d}p_{1\alpha_1} \wedge \tilde{d}q_1^{\alpha_2} &= \tilde{d}(p_{0\alpha_1} + hb^i f_{i\alpha_1}) \wedge \tilde{d}(q_0^{\alpha_2} + hb^j g_j^{\alpha_2}) = \\ &= \tilde{d}p_{0\alpha_1} \wedge \tilde{d}q_0^{\alpha_2} + hb^i \tilde{d}f_{i\alpha_1} \wedge \tilde{d}q_0^{\alpha_2} + hb^j \tilde{d}p_{0\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2} + h^2 b^i b^j \tilde{d}f_{i\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2} \end{aligned}$$

Найдём внешнюю производную от $P_{j\alpha_1}$ и $Q_i^{\alpha_2}$:

$$\tilde{d}P_{j\alpha_1} = \tilde{d}p_{0\alpha_1} + ha_j^i \tilde{d}f_{i\alpha_1}, \quad \tilde{d}Q_i^{\alpha_2} = \tilde{d}q_0^{\alpha_2} + ha_i^j \tilde{d}g_j^{\alpha_2}.$$

Найдём $\tilde{d}P_{j\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2}$ и $\tilde{d}Q_i^{\alpha_2} \wedge \tilde{d}f_{i\alpha_1}$:

$$\begin{aligned} \tilde{d}P_{j\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2} &= \tilde{d}p_{0\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2} + ha_j^i \tilde{d}f_{i\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2}, \\ \tilde{d}Q_i^{\alpha_2} \wedge \tilde{d}f_{i\alpha_1} &= \tilde{d}q_0^{\alpha_2} \wedge \tilde{d}f_{i\alpha_1} + ha_i^j \tilde{d}g_j^{\alpha_2} \wedge \tilde{d}f_{i\alpha_1}, \\ \tilde{d}p_{0\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2} &= \tilde{d}P_{j\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2} - ha_j^i \tilde{d}f_{i\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2}, \\ \tilde{d}q_0^{\alpha_2} \wedge \tilde{d}f_{i\alpha_1} &= \tilde{d}Q_i^{\alpha_2} \wedge \tilde{d}f_{i\alpha_1} - ha_i^j \tilde{d}g_j^{\alpha_2} \wedge \tilde{d}f_{i\alpha_1}. \end{aligned} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \tilde{d}p_{1\alpha_1} \wedge \tilde{d}q_1^{\alpha_2} - \tilde{d}p_{0\alpha_1} \wedge \tilde{d}q_0^{\alpha_2} &= \\ hb^i \tilde{d}f_{i\alpha_1} \wedge \tilde{d}Q_i^{\alpha_2} + hb^j \tilde{d}P_{j\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2} - h^2(b^i a_i^j + b^j a_j^i - b^i b^j) \tilde{d}f_{i\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2} &= \\ = hb^i (\tilde{d}f_{i\alpha_1} \wedge \tilde{d}Q_i^{\alpha_2} + \tilde{d}P_{i\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_i^{\alpha_2}) - h^2(b^i a_i^j + b^j a_j^i - b^i b^j) \tilde{d}f_{i\alpha_1} \wedge \tilde{d}g_j^{\alpha_2} \end{aligned}$$

Предположим теперь, что выбран базис Дарбу. В этом случае выражение упростится:

$$\begin{aligned} \tilde{d}p_{1\alpha} \wedge \tilde{d}q_1^\alpha - \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha &= \\ hb^i (\tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha + \tilde{d}P_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_i^\alpha) - h^2(b^i a_i^j + b^j a_j^i - b^i b^j) \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha. \end{aligned}$$

Покажем теперь, что $\tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha + \tilde{d}P_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_i^\alpha = 0$, $\forall i = 1, \dots, 0$:

$$\begin{aligned} \tilde{d}f_\alpha &= \frac{\partial f_\alpha}{\partial P_\beta} \tilde{d}P_\beta + \frac{\partial f_\alpha}{\partial Q^\beta} \tilde{d}Q^\beta, \quad \tilde{d}g^\alpha = \frac{\partial g^\alpha}{\partial P_\beta} \tilde{d}P_\beta + \frac{\partial g^\alpha}{\partial Q^\beta} \tilde{d}Q^\beta \Rightarrow \\ \tilde{d}f_\alpha \wedge \tilde{d}Q^\alpha &= \frac{\partial f_\alpha}{\partial P_\beta} \tilde{d}P_\beta \wedge \tilde{d}Q^\alpha + \frac{\partial f_\alpha}{\partial Q^\beta} \tilde{d}Q^\beta \wedge \tilde{d}Q^\alpha = \frac{\partial f_\alpha}{\partial P_\beta} \tilde{d}P_\beta \wedge \tilde{d}Q^\alpha, \\ \tilde{d}P_\alpha \wedge \tilde{d}g^\alpha &= \tilde{d}P_\alpha \wedge \frac{\partial g^\alpha}{\partial P_\beta} \tilde{d}P_\beta + \tilde{d}P_\alpha \wedge \frac{\partial g^\alpha}{\partial Q^\beta} \tilde{d}Q^\beta = \tilde{d}P_\alpha \wedge \frac{\partial g^\alpha}{\partial Q^\beta} \tilde{d}Q^\beta. \\ \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha + \tilde{d}P_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_i^\alpha &= \frac{\partial f_\alpha}{\partial P_\beta} \tilde{d}P_\beta \wedge \tilde{d}Q^\alpha - \tilde{d}P_\alpha \wedge \frac{\partial g^\alpha}{\partial Q^\beta} \tilde{d}Q^\beta = \\ &= -\frac{\partial H}{\partial P_\beta \partial Q^\alpha} \tilde{d}P_\beta \wedge \tilde{d}Q^\alpha + \frac{\partial H}{\partial Q^\beta \partial P_\alpha} \tilde{d}P_\alpha \wedge \tilde{d}Q^\beta = 0 \end{aligned}$$

В последнем равенстве мы переобозначили немые индексы. Теперь для выполнения $\tilde{d}p_{1\alpha} \wedge \tilde{d}q_1^\alpha - \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha = 0$ необходимо:

$$b^i a_i^j + b^j a_j^i - b^i b^j = 0 \quad \text{где } \forall i, j = 1, \dots, s$$

4.6.2. Условие симплектичности раздельного метода Рунге–Кутты

Вновь рассмотрим систему уравнений Гамильтона вида:

$$\begin{cases} \dot{p}_\alpha(t) = f_\alpha(p_\beta, q^\beta, t), \\ \dot{q}^\alpha(t) = g^\alpha(p_\beta, q^\beta, t), \\ \alpha, \beta = 1, \dots, N, \end{cases}$$

и запишем для неё раздельный метод Рунге–Кутты.

$$\begin{cases} P_{i\alpha} = p_{0\alpha} + h\hat{a}_i^j f_\alpha(t_0 + c_i h, P_{j\beta}, Q_j^\beta), \\ Q_i^\alpha = q_0^\alpha + h\hat{a}_i^j g^\alpha(t_0 + c_i h, P_{j\beta}, Q_j^\beta), \\ p_{1\alpha} = p_{0\alpha} + h\hat{b}^i f_\alpha(t_0 + c_i h, P_{i\beta}, Q_i^\beta), \\ q_1^\alpha = q_0^\alpha + h\hat{b}^i g^\alpha(t_0 + c_i h, P_{i\beta}, Q_i^\beta), \\ i, j = 1, \dots, s; \alpha, \beta = 1, \dots, N. \end{cases}$$

Сформулируем и докажем условия симплектичности раздельного метода Рунге–Кутты.

ТЕОРЕМА 5 (см. [10]). *Для гладкого гамильтониана $H(p_\alpha, q^\alpha)$ раздельный метод Рунге–Кутты является симплектическим при выполнении следующих тождеств:*

$$\begin{aligned} b^i &= \hat{b}^i \quad \forall i = 1, \dots, s; \\ b^i \hat{a}_i^j + \hat{b} a_j^i - b^i \hat{b}^j &= 0, \quad \forall i, j = 1, \dots, s \quad (\text{суммирования нет}). \end{aligned}$$

Для гамильтониана вида $H(p_\alpha, q^\alpha) = T(p_\alpha) + U(q^\alpha)$ раздельный метод Рунге–Кутты изначально является симплектическим.

Доказательство. Без потери общности можно рассматривать автономный случай.

$$\begin{cases} P_{i\alpha} = p_{0\alpha} + h\hat{a}_i^j f_\alpha(P_{j\beta}, Q_j^\beta), \\ Q_i^\alpha = q_0^\alpha + h\hat{a}_i^j g^\alpha(P_{j\beta}, Q_j^\beta), \\ p_{1\alpha} = p_{0\alpha} + h\hat{b}^i f_\alpha(P_{i\beta}, Q_i^\beta), \\ q_1^\alpha = q_0^\alpha + h\hat{b}^i g^\alpha(P_{i\beta}, Q_i^\beta), \\ i, j = 1, \dots, s; \alpha, \beta = 1, \dots, N. \end{cases}$$

Введём обозначения $f_{j\alpha} \stackrel{\text{not}}{=} f_\alpha(P_{j\beta}, Q_j^\beta)$ и $g_j^\alpha \stackrel{\text{not}}{=} g^\alpha(P_{j\beta}, Q_j^\beta)$

$$\tilde{d}p_{1\alpha} = \tilde{d}p_{0\alpha} + hb^i \tilde{d}f_{i\alpha}, \quad \tilde{d}q_1^\alpha = \tilde{d}q_0^\alpha + h\hat{b}^j \tilde{d}g_j^\alpha,$$

$$\begin{aligned} \tilde{d}p_{1\alpha} \wedge \tilde{d}q_1^\alpha - \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha = \\ hb^i \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha + h\hat{b}^j \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha + h^2 b^i \hat{b}^j \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha. \end{aligned}$$

Найдём $\tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha$ и $\tilde{d}P_{j\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha$:

$$\begin{aligned} \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha &= \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha + h\hat{a}_i^j \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha, \\ \tilde{d}P_{j\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha &= \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha + ha_j^i \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha, \\ \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha &= \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha - h\hat{a}_i^j \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha, \\ \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha &= \tilde{d}P_{j\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha - ha_j^i \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} hb^i \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha + h\hat{b}^j \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha = \\ hb^i \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha + h\hat{b}^j \tilde{d}P_{j\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha - h^2 (\hat{a}_i^j b^i + a_j^i \hat{b}^j) \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha, \end{aligned}$$

$$\tilde{d}p_{1\alpha} \wedge \tilde{d}q_1^\alpha - \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha \stackrel{\text{not}}{=} \tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_0.$$

$$\tilde{d}f_{i\alpha} = [\forall i] = -\frac{\partial^2 H}{\partial Q^\beta \partial Q^\alpha} \tilde{d}Q^\beta - \frac{\partial^2 H}{\partial P_\beta \partial Q^\alpha} \tilde{d}P_\beta,$$

$$\tilde{d}g_j^\alpha = [\forall j] = +\frac{\partial^2 H}{\partial Q^\beta \partial P_\alpha} \tilde{d}Q^\beta + \frac{\partial^2 H}{\partial P_\beta \partial P_\alpha} \tilde{d}P_\beta.$$

$$\tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha = [\forall i] = -\frac{\partial^2 H}{\partial Q^\beta \partial Q^\alpha} \tilde{d}Q^\beta \wedge \tilde{d}Q^\alpha - \frac{\partial^2 H}{\partial P_\beta \partial Q^\alpha} \tilde{d}P_\beta \wedge \tilde{d}Q^\alpha,$$

$$\tilde{d}P_{j\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha = [\forall j] = +\frac{\partial^2 H}{\partial Q^\beta \partial P_\alpha} \tilde{d}P_\alpha \wedge \tilde{d}Q^\beta + \frac{\partial^2 H}{\partial P_\beta \partial P_\alpha} \tilde{d}P_\alpha \wedge \tilde{d}P_\beta.$$

$\tilde{d}Q^\beta \wedge \tilde{d}Q^\alpha = 0$ и $\tilde{d}P_\alpha \wedge \tilde{d}P_\beta = 0$, следовательно

$$\tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha = [\forall i] = -\frac{\partial^2 H}{\partial P_\beta \partial Q^\alpha} \tilde{d}P_\beta \wedge \tilde{d}Q^\alpha,$$

$$\tilde{d}P_{j\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha = [\forall j] = +\frac{\partial^2 H}{\partial Q^\beta \partial P_\alpha} \tilde{d}P_\alpha \wedge \tilde{d}Q^\beta.$$

Переобозначив немые индексы, получим:

$$\tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_0 = h(b^i - \hat{b}^i) \frac{\partial^2 H}{\partial Q^\alpha \partial P_\beta} \tilde{d}P_{i\beta} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha - h^2(\hat{a}_i^j b^i + a_i^j \hat{b}^j - b^i \hat{b}^j) \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha.$$

Из условия симплектичности $\tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_0 = 0$ следуют два тождества:

$$b^i = \hat{b}^i \quad \forall i = 1, \dots, s;$$

$$b^i \hat{a}_i^j + \hat{b} a_j^i - b^i \hat{b}^j = 0, \quad \forall i, j = 1, \dots, s \text{ (суммирования нет)}.$$

Таким образом, первая часть теоремы доказана. Для доказательства второй части, заметим, что смешанная производная от $H(p_\alpha, q^\alpha) = T(p_\alpha) + U(q^\alpha)$ равна нулю. В результате $\tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}g_j^\alpha = 0$ и условие $\tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_0 = 0$ выполняется для любых коэффициентов b^i , \hat{b}^i и a_i^j , \hat{a}_i^j .

4.6.3. Явные раздельные методы Рунге–Кутты для распадающегося гамильтониана

Будем рассматривать гамильтониан вида $H(p_\alpha, q^\alpha) = T(p_\alpha) + U(q^\alpha)$. Предположим, что раздельный метод Рунге–Кутты имеет коэффициенты вида:

$$\begin{aligned} a_i^j &= 0 \quad \forall i < j \text{ (диагонально неявный)}, \\ \hat{a}_i^j &= 0 \quad \forall i \leq j \text{ (явный)}, \end{aligned} \tag{4.1}$$

$$\left\{ \begin{aligned} P_{i\alpha} &= p_{0\alpha} - h a_i^j \frac{\partial U}{\partial q^\alpha}(Q_j^\beta), \\ Q_i^\alpha &= q_0^\alpha + h \hat{a}_i^j \frac{\partial T}{\partial p_\alpha}(P_{j\beta}), \\ p_{1\alpha} &= p_{0\alpha} - h b^i \frac{\partial U}{\partial q^\alpha}(Q_i^\beta) \\ q_1^\alpha &= q_0^\alpha + h \hat{b}^i \frac{\partial T}{\partial p_\alpha}(P_{i\beta}), \\ i, j &= 1, \dots, s; \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N. \end{aligned} \right.$$

Заметим, что из условий (4.1):

$$\forall i \geq j \Rightarrow a_i^j \neq 0 \text{ и } \hat{a}_j^i = 0,$$

$$\forall i < j \Rightarrow \hat{a}_i^j \neq 0 \text{ и } a_j^i = 0.$$

Условия симплектичности раздельного метода Рунге–Кутты в этом

случае упрощаются:

$$b^i \hat{a}_i^j + \hat{b} a_j^i - b^i \hat{b}^j = 0 \Rightarrow \begin{cases} \forall i \geq j \Rightarrow \hat{b}^i a_i^j = b^j \hat{b}^i \Rightarrow a_i^j = b^j, \\ \forall i > j \Rightarrow b^j \hat{a}_j^i = b^j \hat{b}^i \Rightarrow \hat{a}_j^i = \hat{b}^i. \end{cases}$$

Таблицу Батчера можно записать в виде:

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
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

Схема принимает простой вид:

$$\begin{cases} P_{i\alpha} = p_{0\alpha} - hb^j \frac{\partial U}{\partial q^\alpha}(Q_j^\beta), \\ Q_i^\alpha = q_0^\alpha + h\hat{b}^j \frac{\partial T}{\partial p_\alpha}(P_{j\beta}), \\ p_{1\alpha} = p_{0\alpha} - hb^i \frac{\partial U}{\partial q^\alpha}(Q_i^\beta) \\ q_1^\alpha = q_0^\alpha + h\hat{b}^i \frac{\partial T}{\partial p_\alpha}(P_{i\beta}), \\ i, j = 1, \dots, s; \alpha, \beta = 1, \dots, N, \end{cases}$$

легко записывается в виде алгоритма:

```

P0α ← p0α
Q1α ← q0α
for i = 1 → s do
    Piα ← Pα, i-1 - hbi  $\frac{\partial U}{\partial q^\alpha}(Q_i^\alpha)$ 
    Qi+1α ← Qiα + h $\hat{b}^i \frac{\partial T}{\partial p_\alpha}(P_{i\alpha})$ 
end for
p1α ← Psα
q1α ← Qs+1α

```


ПРИМЕР 4.6.1. Рассмотрим случай $s = 1$ (одностадийный раздельный метод Рунге–Кутты)

$$\begin{array}{c|c} b^1 & 0 \\ \hline b^1 & \hat{b}^1 \end{array}$$

В случае $b^1 = 1$ и $\hat{b}^1 = 1$ получим:

$$\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 \end{array}$$

$$\begin{cases} Q_1^\alpha = q_0^\alpha, \\ P_{1\alpha} = p_{0\alpha} - h \frac{\partial U}{\partial q^\alpha}(Q_1^\beta), \\ p_{1\alpha} = p_{0\alpha} - h \frac{\partial U}{\partial q^\alpha}(Q_1^\beta) \\ q_1^\alpha = q_0^\alpha + h \frac{\partial T}{\partial p_\alpha}(P_{1\beta}), \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} p_{1\alpha} = p_{0\alpha} - h \frac{\partial U}{\partial q^\alpha}(q_0^\beta), \\ q_1^\alpha = q_0^\alpha + h \frac{\partial T}{\partial p_\alpha}(p_{1\beta}). \end{cases}$$

Это хорошо знакомый нам явно- неявный метод Эйлера.

ПРИМЕР 4.6.2. Рассмотрим случай $s = 3$ Сочетая условия порядка для раздельных методов Рунге–Кутты и условия симплектичности, получим следующие уравнения:

$$\begin{aligned} b^1 + b^2 + b^3 &= 1, \quad \hat{b}^1 + \hat{b}^2 + \hat{b}^3 = 1, \\ b^2 \hat{b}^1 + b^3(\hat{b}^1 + \hat{b}^2) &= 1/2, \quad b^2(\hat{b}^1)^2 + b^3(\hat{b}^1 + \hat{b}^2)^2 = 1/3, \\ \hat{b}^1(b^1)^2 + \hat{b}^2(b^1 + b^2)^2 + \hat{b}^3(b^1 + b^2 + b^3)^2 &= 1/3. \end{aligned}$$

Простое решение предложил Рунт [19]

$$\begin{array}{c|ccc} b^1 & 7/24 & 3/4 & -1/24 \\ \hline \hat{b}^1 & 2/3 & -2/3 & 1 \end{array}$$

$$\begin{aligned} P_{0\alpha} &= p_{0\alpha}, \quad Q_1^\alpha = q_0^\alpha, \\ P_{1\alpha} &= P_{0\alpha} - \frac{7h}{24} \frac{\partial U}{\partial q^\alpha}(Q_1^\alpha), \quad Q_2^\alpha = Q_1^\alpha + \frac{2h}{3} \frac{\partial T}{\partial p_\alpha}(P_{1\alpha}), \\ P_{2\alpha} &= P_{1\alpha} - \frac{3h}{4} \frac{\partial U}{\partial q^\alpha}(Q_2^\alpha), \quad Q_3^\alpha = Q_2^\alpha - \frac{2h}{3} \frac{\partial T}{\partial p_\alpha}(P_{2\alpha}), \end{aligned}$$

$$P_{3\alpha} = P_{2\alpha} + \frac{h}{24} \frac{\partial U}{\partial q^\alpha}(Q_3^\alpha), \quad Q_4^\alpha = Q_3^\alpha + h \frac{\partial T}{\partial p_\alpha}(P_{3\alpha}),$$

$$p_{1\alpha} = P_{3\alpha}, \quad q_1^\alpha = Q_4^\alpha.$$

4.6.4. Условие симплектичности метода Рунге–Кутты–Нюстрёма

Рассмотрим гамильтониан вида:

$$H(p_\alpha, q^\alpha, t) = \frac{1}{2} \mu^{\alpha\beta} p_\alpha p_\beta + U(q^\alpha),$$

где $\mu^{\alpha\beta}$ — компоненты матрицы M^{-1} (матрица масс). Часто $\mu^{\alpha\beta}$ симметрична (или даже диагональна).

$$\ddot{q}^\alpha = \mu^{\alpha\beta} f_\beta(q^\gamma),$$

где

$$f_\alpha(q^\beta) = -\frac{\partial U(q^\beta)}{\partial q^\alpha}$$

$$\begin{cases} Q_i^\alpha = q_0^\alpha + h c_i \mu^{\alpha\beta} p_{0\beta} + h^2 \bar{a}_i^j \mu^{\alpha\beta} f_{j\beta}, \\ q_1^\alpha = q_0^\alpha + h \mu^{\alpha\beta} p_{0\beta} + h^2 \bar{b}^i \mu^{\alpha\beta} f_{i\beta}, \\ p_{1\alpha} = p_{0\alpha} + h b^i f_{i\alpha}. \end{cases}$$

ТЕОРЕМА 6. [7]. *Чтобы метод Рунге–Кутты–Нюстрёма был применён к каноническим уравнениям с гамильтонианом вида:*

$$H(p_\alpha, q^\alpha, t) = \frac{1}{2} \mu^{\alpha\beta} p_\alpha p_\beta + U(q^\alpha),$$

с симметричной матрицей $\mu^{\alpha\beta}$, необходимо выполнение условий:

$$\bar{b}_i = b_i(1 - c_i),$$

$$b_i(\bar{b}_j - \bar{a}_i^j) = b_j(\bar{b}_i - \bar{a}_j^i),$$

$$i, j = 1, \dots, s.$$

Доказательство Введём обозначение $f_\alpha(Q_j^\beta) \stackrel{\text{not}}{=} f_{j\alpha}$,

$$\tilde{d}p_{1\alpha} = \tilde{d}p_{0\alpha} + h b^i \tilde{d}f_{i\alpha}, \quad \tilde{d}q_1^\alpha = \tilde{d}q_0^\alpha + h \mu^{\alpha\beta} \tilde{d}p_{0\beta} + h^2 \bar{b}^j \mu^{\alpha\beta} \tilde{d}f_{j\beta}$$

$$\begin{aligned} \tilde{d}p_{1\alpha} \wedge \tilde{d}q_1^\alpha - \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha = \\ h\mu^{\alpha\beta} \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta} + hb^i \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha + h^2 \mu^{\alpha\beta} \bar{b}^j \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}f_{j\beta} + \\ + h^2 b^i \mu^{\alpha\beta} \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta} + h^3 \mu^{\alpha\beta} b^i \bar{b}^j \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}f_{j\beta}. \end{aligned}$$

Исключим q_0^α из формулы, воспользовавшись Q_i^α

$$\begin{aligned} \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha &= \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha + hc_i \mu^{\alpha\beta} \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta} + h^2 \bar{a}_j^i \mu^{\alpha\beta} \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}f_{j\beta}, \\ \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha &= \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha - hc_i \mu^{\alpha\beta} \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta} - h^2 \bar{a}_j^i \mu^{\alpha\beta} \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}f_{j\beta}. \end{aligned}$$

Подставим теперь это выражение в формулу для $\tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_0$:

$$\begin{aligned} \tilde{d}p_{1\alpha} \wedge \tilde{d}q_1^\alpha - \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}q_0^\alpha &= h\mu^{\alpha\beta} \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta} + b^i \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha + \\ &+ h^2 \mu^{\alpha\beta} (b^i - \bar{b}^i - b^i c_i) \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta} + h^3 \mu^{\alpha\beta} (b^i \bar{b}^j - b^i \bar{a}_j^i) \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}f_{j\beta}. \end{aligned}$$

Первое слагаемое правой части равно нулю в виду симметричности $\mu^{\alpha\beta} = (\mu^{\alpha\beta} + \mu^{\beta\alpha})/2$:

$$\begin{aligned} h\mu^{\alpha\beta} \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta} &= \frac{h}{2} (\mu^{\alpha\beta} \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta} + \mu^{\beta\alpha} \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta}) = \\ &= \frac{h}{2} (\mu^{\alpha\beta} \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta} - \mu^{\beta\alpha} \tilde{d}p_{0\beta} \wedge \tilde{d}p_{0\alpha}) = \\ &= \frac{h}{2} (\mu^{\alpha\beta} \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta} - \mu^{\alpha\beta} \tilde{d}p_{0\alpha} \wedge \tilde{d}p_{0\beta}) = 0. \end{aligned}$$

Здесь мы переобозначили немые индексы. Второе слагаемое $\tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}Q_i^\alpha$ также равно нулю из-за раздельного гамильтониана. Четвёртое слагаемое преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} h^3 \mu^{\alpha\beta} (b^i \bar{b}^j - b^i \bar{a}_j^i) \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}f_{j\beta} &= \\ \frac{h^3}{2} \left(\mu^{\alpha\beta} (b^i \bar{b}^j - b^i \bar{a}_j^i) \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}f_{j\beta} + \mu^{\beta\alpha} (b^i \bar{b}^j - b^i \bar{a}_j^i) \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}f_{j\beta} \right) &= \\ = \frac{h^3}{2} \left(\mu^{\alpha\beta} (b^i \bar{b}^j - b^i \bar{a}_j^i) \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}f_{j\beta} - \mu^{\alpha\beta} (b^i \bar{b}^j - b^i \bar{a}_j^i) \tilde{d}f_{j\alpha} \wedge \tilde{d}f_{i\beta} \right) &= \\ = \frac{h^3}{2} \mu^{\alpha\beta} \left(b^i (\bar{b}^j - \bar{a}_i^j) - b^j (\bar{b}^i - \bar{a}_j^i) \right) \tilde{d}f_{i\alpha} \wedge \tilde{d}f_{j\beta}, \end{aligned}$$

откуда и получаем условие $b_i (\bar{b}_j - \bar{a}_i^j) = b_j (\bar{b}_i - \bar{a}_j^i)$

Естественно, что особый интерес представляет явный метод Рунге–Кутты–Нюстрёма. Положим

$$\bar{a}_j^i = 0, \quad \forall i \leq j; \quad i, j = 1, \dots, s$$

В этом случае из условий симплектичности метода Рунге–Кутты–Нюстрёма следует:

$$\begin{aligned} b^i \bar{b}^j - b^i \bar{a}_j^i &= b^j \bar{b}^i, \\ b^i \bar{a}_j^i &= b^i \bar{b}^j - b^j \bar{b}^i = b^i b^j (c_i - c_j), \quad \bar{a}_j^i = b^j (c_i - c_j). \end{aligned}$$

ТЕОРЕМА 7 (СМ. [18]). *Для того, чтобы явный метод Рунге–Кутты–Нюстрёма был симплектическим, необходимо и достаточно, чтобы выполнялись следующие соотношения для коэффициентов (суммирования нет):*

$$\begin{aligned} \bar{b}^i &= b^i (1 - c_i), \\ \bar{a}_i^j &= b^j (c_i - c_j) \text{ для } i > j \text{ для остальных } \bar{a}_i^j = 0 \\ i, j &= 1, \dots, s. \end{aligned}$$

Таким образом, достаточно задать коэффициенты b^i и c_i .

Положив $c_i \neq c_{i-1}$, запишем явный метод Рунге–Кутты–Нюстрёма в виде алгоритма.

```

 $Q_0^\alpha \leftarrow q_0^\alpha$ 
 $P_{0\alpha} \leftarrow p_{0\alpha}$ 
for  $i = 1 \dots, s$  do
     $Q_i^\alpha \leftarrow Q_{i-1}^\alpha + h(c_i - c_{i-1})\mu^{\alpha\beta} P_{\beta i-1}$ 
     $P_{i\alpha} \leftarrow P_{\alpha i-1} + h b^i f_\alpha(Q_i^\beta)$ 
end for
 $q_1^\alpha \leftarrow Q_s^\alpha + h(1 - c_s)\mu^{\alpha\beta} P_{s\beta}$ 
 $p_{1\alpha} \leftarrow P_{s\alpha}$ 

```

4.6.5. Реализации метода Рунге–Кутты–Нюстрёма

Наиболее простой метод получается для одной стадии: $s = 1$. В этом случае $b = 1$, а c_1 выбирается произвольно. В [18] указано значение $c_1 = 1/2$.

$$\begin{cases} Y_1 = y_0 + \frac{1}{2} h z_0, \\ y_1 = y_0 + h z_0 + \frac{1}{2} h^2 f(Y_1), \\ z_1 = z_0 + h f(Y_1). \end{cases}$$

Для $s = 3$ Окунбор и Скил [7] нашли точные коэффициенты:

$$c_1 = 1 - c_3 = \frac{1}{6} \left(2 + \sqrt[3]{2} + \frac{1}{\sqrt[3]{2}} \right), \quad c_2 = \frac{1}{2}.$$

Коэффициенты b^1 , b^2 и b^3 находятся из первых трёх условий порядка:

$$b^1 + b^2 + b^3 = 1, \quad b^1 c_1 + b^2 c_2 + b^3 c_3 = 1/2, \quad b^1 c_1^2 + b^2 c_2^2 + b^3 c_3^2 = 1/3$$

Для $s = 5$ и $p = 4$ Калво и Санс-Серной [8, 24, 29] численно вычислили коэффициенты. Окунбор и Скил в работах [2, 26] предприняли численный поиск коэффициентов для методов высоких порядков ($p = 5$, $p = 6$ и $p = 8$):

- для метода $p = 5$, $s = 5$ существует 10 условий порядка для 10 коэффициентов. Найдены 4 решения этих условий;
- для метода $p = 6$, $s = 5$ решений найти не удалось. Решения искались для симметричного метода. Окунбор и Скил высказали предположение, что симметричного симплектического метода с $p = 6$, $s = 7$ не существует;
- для метода $p = 6$, $s = 7$ численно найдено 8 решений условий порядка;
- для метода $p = 8$, $s = 17$ численно найдено 1 решение условий порядка.

4.7. Составные симплектические методы

В данном разделе используются следующие способы получения новых методов:

- присоединённый метод;
- композиция нескольких численных методов;
- расщепление векторного поля.

Для увеличения порядка метода применяется композиция двух или более методов, поэтому мы будем пользоваться обобщающим названием *составной симплектический метод*, каждый раз уточняя, как именно этот метод получается.

Следующие три положения являются для нас ключевыми:

- T1** присоединённый метод симплектического метода в свою очередь является симплектическим;
- T2** композиция нескольких симплектических методов также является симплектическим методом;
- T3** методы, составленные на основе расщепления векторного поля, также являются симплектическими, так как используют точные решающие операторы φ_t .

ТЗ даёт нам способ получения симплектического метода на основе решаемой задачи (точнее на основе аналитического решения рассматриваемой задачи). Важно, что для его получения не требуются уже известные симплектические численные методы.

Т1 даёт способ получения нового симплектического метода Φ_h^* из уже известного Φ_h . Порядок этого нового метода равен порядку исходного метода.

Наиболее полезен Т2, так как позволяет комбинировать известные симплектические методы для получения новых, более высокого порядка. Особенно интересен способ, совмещающий Т1 и Т2. Например, используя метод Φ_h нечётного порядка p и присоединённый к нему Φ_h^* , всегда можно получить составной метод $\Phi_{h/2} \circ \Phi_{h/2}^*$ порядка $p + 1$. При этом стадийность метода возрастает в два раза по сравнению с исходным Φ_h , что влечёт увеличение времени вычисления.

4.8. Различные симплектические методы

Таблица 4.1

Число условий порядка в методах Рунге–Кутты. РРК — Раздельный метод Рунге–Кутты, РКН — метод Рунге–Кутты–Нюстрёма.

Порядок	РРК	Симплектический РРК	РКН	Симплектический РКН
1	2	2	1	1
2	4	3	2	2
3	8	5	4	4
4	16	8	7	6
5	34	14	13	10
6	74	24	23	15
7	170	46	43	25
8	400	88	79	39

Таблица 4.2

Sanz–Serna [23]: Раздельный метод РК, $s = 3$, $p = 3$

b^i	0,268330	-0,187992	0,919662
\hat{b}^i	0,919662	-0,187992	0,268330

Таблица 4.3

Ruth [19]: Раздельный метод РК, $s = 3$, $p = 3$

b^i	7/24	3/4	-1/24
\hat{b}^i	2/3	-2/3	1

Таблица 4.4

Okunbor, Skeel [7]: Раздельный метод РК, $s = 6$, $p = 4$

b^i	7/48	3/8	-1/48	-1/48	3/8	7/48
\hat{b}^i	1/3	-1/3	1	-1/3	1/3	0

Таблица 4.5

Sanz-Serna [23]: Раздельный метод РК, $s = 6$, $p = 4$

b^i	0,134165	-0,093996	0,459831	0,459831	-0,093996	0,134165
\hat{b}^i	0,459831	-0,093996	0,268330	-0,093996	0,459831	0

Таблица 4.6

Calvo [8, 24, 29]: Метод РК-Нюстрёма, $s = 5$, $p = 4$

$c_1 = 0$	$b^1 = 0,0617588581356263250$
$c_2 = 0,2051776615422863869$	$b^2 = 0,3389780265536433551$
$c_3 = 0,6081989431465009739$	$b^3 = 0,6147913071755775662$
$c_4 = 0,4872780668075869657$	$b^4 = -0,1405480146593733802$
$c_5 = 1$	$b^5 = 0,1250198227945261338$

Таблица 4.7

Candy, Razmus [27]: Раздельный РК метод, $s = 4$, $p = 4$

$b^1 = \frac{1}{6}(2 + \sqrt[3]{2} + 1/\sqrt[3]{2})$	$\hat{b}^1 = 0$
$b^2 = \frac{1}{6}(2 - \sqrt[3]{2} - 1/\sqrt[3]{2})$	$\hat{b}^2 = (2 - \sqrt[3]{2})^{-1}$
$b^3 = \frac{1}{6}(2 - \sqrt[3]{2} - 1/\sqrt[3]{2})$	$\hat{b}^3 = (1 - \sqrt[3]{4})^{-1}$
$b^4 = \frac{1}{6}(2 + \sqrt[3]{2} + 1/\sqrt[3]{2})$	$\hat{b}^4 = (2 - \sqrt[3]{2})^{-1}$

Таблица 4.8

Forest, Ruth [5]: Раздельный РК метод, $s = 4$, $p = 4$

$b^1 = 0$	$\hat{b}^1 = \frac{1}{6}(2 + \sqrt[3]{2} + 1/\sqrt[3]{2})$
$b^2 = \frac{1}{3}(2 + \sqrt[3]{2} + 1/\sqrt[3]{2})$	$\hat{b}^2 = \frac{1}{6}(2 - \sqrt[3]{2} - 1/\sqrt[3]{2})$
$b^3 = \frac{2}{3}(5 - \sqrt[3]{2} - 1/\sqrt[3]{2})$	$\hat{b}^3 = \frac{1}{6}(2 - \sqrt[3]{2} - 1/\sqrt[3]{2})$
$b^4 = \frac{1}{3}(2 + \sqrt[3]{2} + 1/\sqrt[3]{2})$	$\hat{b}^4 = \frac{1}{6}(2 + \sqrt[3]{2} + 1/\sqrt[3]{2})$

4.9. Контрольные вопросы

1. Дайте определение симплектоморфизма.
2. Дайте определение симплектического численного метода. Чем отличаются симплектические численные методы от симплектических интеграторов?
3. Как можно классифицировать симплектические численные методы?
4. Что такое композиция и присоединение в контексте численных методов?
5. Какие симплектические численные методы 1-ого и 2-ого порядка вы знаете?
6. В чем преимущество симплектических численных методов по сравнению с классическими численными методами?
7. Имеет ли смысл симплектический численный метод для неконсервативной системы?
8. Может ли быть композиция двух симплектических методов не симплектическим методом? Ответ обоснуйте.

Задача: Получите условие симплектичности для методов Рунге–Кутты.

Используемая литература

1. Lasagni F. M. Canonical Runge-Kutta methods // Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP). — 1988. — Vol. 39. — P. 952–953. — 10.1007/BF00945133. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/BF00945133>.
2. Okunbor Daniel I., Lu Eric J. Eighth-order Explicit Symplectic Runge-Kutta-Nyström Integrators. — 1994.
3. Kinoshita Hiroshi, Yoshida Haruo, Nakai Hiroshi. Symplectic integrators and their application to dynamical astronomy // Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy. — 1991. — Vol. 50, no. 1. — P. 59–71. — URL: <http://www.springerlink.com/content/h4mkq7768115777v/>.
4. Yoshida Haruo. Recent progress in the theory and application of symplectic integrators // Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy. — 1993. — Vol. 56, no. 1-2. — P. 27–43. — URL: <http://www.springerlink.com/index/10.1007/BF00699717>.
5. Forest E., Ruth R. D. Fourth-order symplectic integration // Physica D Nonlinear Phenomena. — 1990. — 5. — Vol. 43. — P. 105–117.
6. Stern A., Desbru M. Discrete Geometric Mechanics for Variational Time Integrators // Discrete Differential Geometry: An applied Introduction / Caltech. — 2006. — P. 75–80.
7. Okunbor Daniel I., Skeel Robert D. Explicit canonical methods for Hamiltonian systems // Mathematics of Computation. — 1992. — Vol. 59. — P. 439–455.
8. Calvo M.P., Sanz-Serna J.M. High-order symplectic Runge-Kutta-Nyström methods // SIAM J. Sci. Comput. — 1993. — Vol. 14. — P. 1237–1252.
9. Feng K. On difference schemes and symplectic geometry // Proceedings of the 5-th Intern. Symposium on differential geometry and differential equations. — Beijing, 1985. — august. — P. 42–58.
10. Сурис Ю.Б. Гамильтоновы методы типа Рунге-Кутты и их вариационная трактовка. // Математическое моделирование. — 1990. — Т. 2, № 4. — С. 78–87.
11. Sanz-Serna J.M., Calvo M.P. Numerical Hamiltonian Problems. — 1 edition. — London : Chapman and Hall, 1994. — P. 207. — ISBN: 0-412-54290-0.
12. Budd C.J., Piggott M. D. Geometric Integration and Its Applications // in Handbook of numerical analysis. — 2003. — Vol. 11. — P. 35–139. — URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1570865902110027>.
13. Сурис Ю.Б. О некоторых свойствах методов численного интегрирования систем вида $\ddot{x} = f(x)$ // Журнал вычислительной

- математики и математической физики. — 1987. — Т. 27, № 10. — С. 1504–1515.
14. Yoshida Haruo. Symplectic Integrators for Hamiltonian Systems: Basic Theory // *Chaos Resonance and Collective Dynamical Phenomena in the Solar System*. — 1992. — Vol. 152. — P. 407–+. — URL: <http://adsabs.harvard.edu/abs/1992IAUS..152..407Y>.
 15. Hairer E. Symplectic integrators. — 2010. — TU Munchen. URL: www.unige.ch/~hairer/poly_geoint/week2.pdf.
 16. 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. — URL: <http://books.google.ru/books?id=T1TaNRmZv8C>.
 17. Butcher J.C. Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. — 2 edition. — New Zealand : Wiley, 2003. — P. 425. — ISBN: 0-471-96758-0.
 18. Hairer E., Nørsett S. P., G.Wanner. Solving Ordinary Differential Equations I. — 2 edition. — Berlin : Springer, 2008. — P. 528. — ISBN: 978-3-540-56670-0.
 19. Ruth Ronald D. A Canonical Integration Technique // *IEEE Transactions on Nuclear Science*. — 1983. — august. — Vol. 30, no. 4. — P. 2669–2671. — URL: <http://dx.doi.org/10.1109/TNS.1983.4332919>.
 20. Sanz-Serna J M. Runge-kutta schemes for Hamiltonian systems // *BIT*. — 1988. — Vol. 28, no. 4. — P. 877–883. — URL: <http://www.springerlink.com/index/10.1007/BF01954907>.
 21. Э. Хайер, С. Нёрсетт, Г. Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи / Под ред. С. С. Филиппова. — 1 изд. — Москва : Мир, 1990. — С. 512. — ISBN: 5-03-001179-X.
 22. Hairer Ernst, Lubich Christian, Wanner Gerhard. Geometric numerical integration illustrated by the Störmer–Verlet method // *Acta Numerica*. — 2003. — Vol. 12. — P. 399–450.
 23. Sanz-Serna J.M. The numerical integration of Hamiltonian systems // *Computational Ordinary Differential Equations* / Ed. by J.R. Cash, I. Gladwell. — Clarendon Press, Oxford, 1992. — P. 81–106.
 24. Calvo M.P., Sanz-Serna J.M. Reasons for failure. The integration of the two-body problem with a symplectic Runge-Kutta-Nyström code with stepchanging facilities // *Equadiff 91* / Ed. by C. Perelló, C. Simo, J. Sola-Morales. — World Scientific, Singapore, 1993. — P. 34–48.
 25. Yoshida Haruo. Construction of higher order symplectic integrators // *Physics Letters A*. — 1990. — Vol. 150, no. 5-7. — P. 262–268. — URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0375960190900923>.
 26. Okunbor D., Skeel R.D. Canonical Runge-Kutta-Nyström Methods of Orders 5 and 6 // *J. Comput. Appl. Math.* — 1994. — Vol. 51, no. 3. —

-
- P. 375–382.
27. Candy J., Rozmus W. A symplectic integration Algorithm for separable Hamiltonian Functions // Journal of computational physics. — 1991. — Vol. 92, no. 1. — P. 230–256.
 28. Ракитский Ю. В. О некоторых свойствах решений систем обыкновенных дифференциальных уравнений одношаговыми методами численного интегрирования. // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1961. — Т. 1, № 6. — С. 947–962. — URL: <http://mi.mathnet.ru/zvmmf7998>.
 29. Calvo M.P., Sanz-Serna J.M. Order conditions for canonical Runge-Kutta-Nyström methods // BIT. — 1992. — Vol. 32. — P. 131–142.
 30. Костомаров Д. П., Фаворский А. П. Вводные лекции по численным методам. — 1 изд. — Москва : Логос, 2004. — С. 184. — ISBN: 5-94010-286-7.
 31. Methods of integration which preserve the contact transformation property of the Hamiltonian equations : Rep. / Univ. of Notre Dame ; Executor: R. de Vogelaere : 1956.

Содержание

Описание курса и программа «Разностные методы расчета оптических наноструктур» 3

«Разностные методы расчета оптических наноструктур» (учебное пособие, конспект лекций) 13

Глава 1. Уравнения Максвелла 15

1.1. От векторных полей к дифференциальным формам . . . 15

1.2. Вариационное происхождение уравнений Максвелла . . . 17

1.3. Внешнее дискретное исчисление 19

1.4. Контрольные вопросы. 25

Глава 2. Методы семейства Рунге–Кутты 26

2.1. Краткий обзор численных методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений 26

2.2. Введение в задачу 34

2.3. Задача Коши 35

2.4. Классификация численных методов 35

2.5. Конечные разности 36

2.6. Явные методы Рунге–Кутты 37

2.7. Условия порядка. 40

2.8. Неявные методы Рунге–Кутты 42

2.9. Раздельные методы Рунге–Кутты 45

2.10. Метод Рунге–Кутты–Нюстрёма 47

2.11. Контрольные вопросы 48

Глава 3. Гамильтонов формализм на кокасательных расслоениях и симплектическая структура 50

3.1. Функции Лагранжа и Гамильтона 50

3.2. Фазовое пространство и симплектическая структура . . . 51

3.3. Канонические преобразования 52

3.4. Скобки Пуассона и $\hat{\omega}$ 52

3.5. Контрольные вопросы. 53

Глава 4. Симплектические методы 55

4.1. Введение. 55

4.2. Проблемы классических численных методов 56

4.3. Канонические уравнения. Решающий оператор 63

4.4. Классификация симплектических интеграторов 64

4.5. Численный метод Штёрмера–Верле 65

4.6. Условие симплектичности методов семейства Рунге-Кутты.	66
4.7. Составные симплектические методы	77
4.8. Различные симплектические методы	78
4.9. Контрольные вопросы.	80
Используемая литература	81

Учебное издание

Леонид Антонович Севастьянов
Мигран Нельсонович Геворкян
Анна Владиславовна Королькова
Дмитрий Сергеевич Кулябов

Разностные методы расчета оптических наноструктур

Учебное пособие

Технический редактор *Н. А. Ясько*
Дизайн обложки *М. В. Рогова*

Издание подготовлено в авторской редакции
Компьютерная вёрстка *А. В. Королькова, Д. С. Кулябов*

Подписано в печать . . . г. Формат 60×84/16. Печать офсетная.
Усл. печ. л. . . Тираж 100 экз. Заказ № .

Российский университет дружбы народов
115419, ГСП-1, г. Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3

Типография РУДН
115419, ГСП-1, г. Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3, тел. 952-04-41