Анализ составных симплектических методов и симплектических методов семейства Рунге–Кутты для протяженных во времени задач

Геворкян Мигран Нельсонович

Российский университет дружбы народов
Факультет физико-математических и естественных наук
Кафедра Систем телекоммуникаций

23 января 2013

Цель диссертационной работы

Оценка применимости симплектических численных методов к различным задачам, оценка точности сохранения различных физически значимых инвариантов (полная энергия, момент импульса и т.д.)

Задачи диссертационной работы

- ✓ Систематизация известных симплектических численных методов.
- ✓ Оценка применимости симплектических методов типа Рунге–Кутты и составных симплектических методов к динамическим системам в зависимости от вида гамильтониана.
- ✓ Проведение сравнения методов по точности сохранения инвариантов и времени выполнения. Сравнение симплектических методов со стандартными.
- ✓ Запись симплектической схемы для ограниченной задачи трех тел.

Фазовое пространство $\mathbf{\Phi}$: $(p(t), q(t)) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, где $t \in [t_0, T] \in \mathbb{R}$.
Функция Гамильтона и канонические уравнения:

$$H(p, q) = \frac{1}{2}\left(p^2 + q^2\right), \qquad \begin{cases} \dot{p}(t) = -q(t), \\ \dot{q}(t) = p(t). \end{cases}$$

Начальные условия: $p(0) = 1,\ q(0) = 2$.

Иллюстрация проблемы

Явный метод Эйлера (1-ый порядок точности):

$$\begin{cases} p_{k+1} = p_k - hq_k, \\ q_{k+1} = q_k + hp_k. \end{cases}$$

Фазовый объем **не** сохраняется т.к.:

$$J = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial p_{k+1}}{\partial p_k} & \dfrac{\partial p_{k+1}}{\partial q_k} \\ \dfrac{\partial q_{k+1}}{\partial p_k} & \dfrac{\partial q_{k+1}}{\partial q_k} \end{vmatrix} = 1+h^2$$

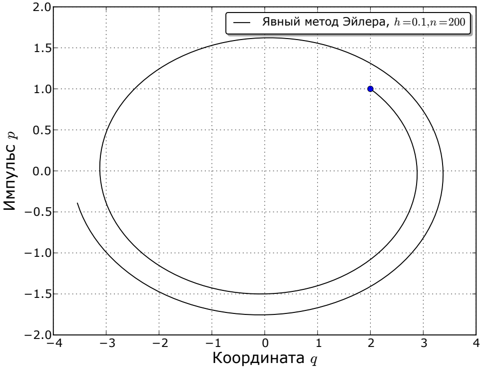


Иллюстрация проблемы

Метод Рунге–Кутты 3-его порядка:

$$
\begin{cases}
p_{k+1} = p_k - hq_k - \dfrac{1}{2}h^2 p_k + \dfrac{1}{6}h^3 q \\
q_{k+1} = q_k + hp_k - \dfrac{1}{2}h^2 q_k - \dfrac{1}{6}h^3 p
\end{cases}
$$

$$
J = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial p_{k+1}}{\partial p_k} & \dfrac{\partial p_{k+1}}{\partial q_k} \\ \dfrac{\partial q_{k+1}}{\partial p_k} & \dfrac{\partial q_{k+1}}{\partial q_k} \end{vmatrix} = 1 - \frac{h^4}{12} + \frac{h^6}{36}
$$

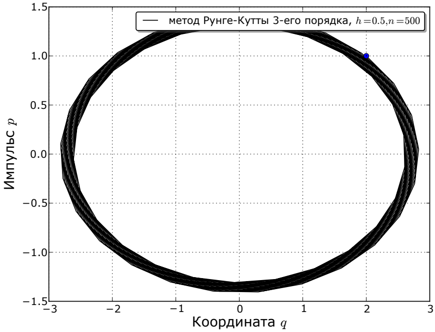


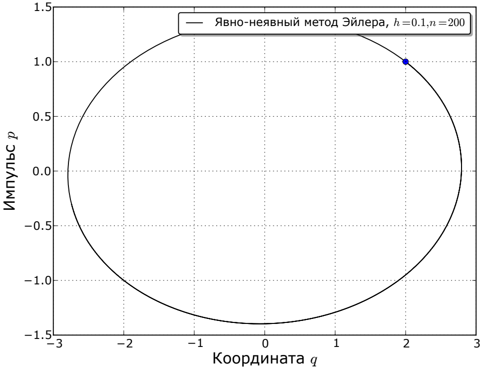
Иллюстрация проблемы

Явно-неявный метод Эйлера (1-ый порядок точности):

$$\begin{cases} p_{k+1} = p_k - hq_k, \\ q_{k+1} = q_k + hp_{k+1}. \end{cases}$$

Фазовый объем **сохраняется** т.к.:

$$J = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial p_{k+1}}{\partial p_k} & \dfrac{\partial p_{k+1}}{\partial q_k} \\ \dfrac{\partial q_{k+1}}{\partial p_k} & \dfrac{\partial q_{k+1}}{\partial q_k} \end{vmatrix} = 1$$



Выводы из рассмотренных примеров

- Некоторые классические численные методы дают искаженный фазовый портрет рассматриваемой задачи (полная энергия линейного осциллятора неограниченно уменьшается или же неограниченно увеличивается);
- Другие же методы несмотря на меньшую точность вычислений дают более адекватную качественную картину (т.е. ближе к непрерывной модели) рассматриваемой математической модели;
- Возникает задача нахождения условий, при которых качественные свойства гамильтоновой системы сохраняются численной схемой;
- Следующая задача — нахождение способов построения новых методов с указанными свойствами.

Симплектичность

Одношаговый численный метод называется симплектическим, если каждая его итерация сохраняет симплектическую дифференциальную 2-форму:

$$\tilde{\omega} = \tilde{\mathrm{d}}p_\alpha \wedge \tilde{\mathrm{d}}q^\alpha = \tilde{\mathrm{d}}p_1 \wedge \tilde{\mathrm{d}}q^1 + \tilde{\mathrm{d}}p_2 \wedge \tilde{\mathrm{d}}q^2 + \ldots + \tilde{\mathrm{d}}p_N \wedge \tilde{\mathrm{d}}q^N$$

Замечание

Симплектические численные методы «сохраняют» инварианты (первые интегралы) системы. Под сохранением инвариантов подразумевается тот факт, что погрешность их вычисления не растет со временем, а колеблется в малом промежутке.

Систематизация симплектических численных методов

- Накладывание дополнительных условий на коэффициенты методов типа Рунге-Кутты — симплектические методы Рунге–Кутты (Сан-Серна, Хайрер, Рут, Кенди, Расмус).
- Композиция нескольких симплектических численных методов для получения метода более высокого порядка (используются понятия *композиции* численных методов, *присоединенного* численного метода и *расщепления* гамильтонова векторного поля) — составные симплектические методы. (Йошида, Кеношида, Ласкар, МакЛохлан)
- Формулировка условий симплектичности на языке производящих функций и построение симплектических методов с помощью бесконечно малых канонических преобразований.
- Получение симплектических методов как частный случай вариационных численных методов.

Задача Коши для уравнений Гамильтона

Уравнения Гамильтона консервативной системы ($2N$ — уравнений в фазовом пространстве):

$$\begin{cases} \mathbf{p}'(t) = \mathbf{f}(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)), \\ \mathbf{q}'(t) = \mathbf{g}(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)), \\ \mathbf{p}(t_0) = \mathbf{p}_0,\ \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0. \end{cases}$$

$$\mathbf{q}(t) = \begin{bmatrix} q^1(t) \\ \vdots \\ q^N(t) \end{bmatrix} \text{ — обобщенная координата,}$$

$$\mathbf{p}(t) = [p_1(t), \dots, p_N(t)] \text{ — обобщенный импульс.}$$

Классическая запись для методов Рунге–Кутты

Задача Коши ($2N$ уравнений)

$$\begin{cases} \mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(\mathbf{y}(t), t), \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0. \end{cases}$$

Классическая запись схемы Рунге–Кутты (одношаговый, s–стадийный метод) для этой задачи

$$\begin{cases} \mathbf{k}_i = \mathbf{f}\left(\mathbf{y}_0 + h\sum\limits_{j=1}^{s} a_i^j \mathbf{k}_j, t_0 + hc_i\right), \\ \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h\sum\limits_{i=1}^{s} b^i \mathbf{k}_i;\ i, j = 1, \dots s, \end{cases}$$

Обозначения Батчера (Butcher) для методов Рунге–Кутты

Классическая запись

$$\begin{cases} \mathbf{k}_i = \mathbf{f}\left(\mathbf{y}_0 + h\sum\limits_{j=1}^{s} a_i^j \mathbf{k}_j, t_0 + hc_i\right), \\ \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h\sum\limits_{i=1}^{s} b^i \mathbf{k}_i;\ i,j = 1,\dots s. \end{cases}$$

Симметричная запись

$$\begin{cases} \mathbf{Y}_i(h) = \mathbf{y}_0 + \sum\limits_{j=1}^{s} h a_i^j \mathbf{f}(\mathbf{Y}_j, t_0 + c_j h), \\ \mathbf{y}_1(h) = \mathbf{y}_0 + h\sum\limits_{j=1}^{s} b^j \mathbf{f}(\mathbf{Y}_j, t_0 + c_j h),\ \ i,j = 1,\dots s. \end{cases}$$

Обозначения Батчера для методов Рунге–Кутты

Симметричная запись и таблица Батчера (Butcher):

$$
\begin{cases}
\mathbf{Y}_i(h) = \mathbf{y}_0 + \sum\limits_{j=1}^{s} h a_i^j \mathbf{f}(\mathbf{Y}_j, t_0 + c_j h),\\
\mathbf{y}_1(h) = \mathbf{y}_0 + h \sum\limits_{j=1}^{s} b^j \mathbf{f}(\mathbf{Y}_j, t_0 + c_j h), \quad i, j = 1, \ldots s.
\end{cases}
$$

$$
\begin{array}{c|cccccc}
c_1 & a_1^1 & a_1^2 & a_1^3 & \ldots & a_1^{s-1} & a_1^s \\
c_2 & a_2^1 & a_2^2 & a_2^3 & \ldots & a_2^{s-1} & a_2^s \\
c_3 & a_3^1 & a_3^2 & a_3^3 & \ldots & a_3^{s-1} & a_3^s \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
c_s & a_{s-1}^1 & a_{s-1}^2 & a_{s-1}^3 & \ldots & a_{s-1}^{s-1} & a_{s-1}^s \\
c_s & a_s^1 & a_s^2 & a_s^3 & \ldots & a_s^{s-1} & a_s^s \\
\hline
 & b^1 & b^2 & b^3 & \ldots & b^{s-1} & b^s
\end{array}
$$

Композиция методов Рунге–Кутты

Запишем два метода Рунге–Кутты в симметричном виде:

$$\Phi_1(h)\colon\ \begin{cases} Y_i = y_0 + h\displaystyle\sum_{j=1}^{s} a_i^j f(Y_j), \\ y_1 = y_0 + h\displaystyle\sum_{j=1}^{s} b^j f(Y_j), \\ i,j = 1,\ldots,s. \end{cases} \qquad \Phi_2(h)\colon\ \begin{cases} \widehat{Y}_i = y_0 + h\displaystyle\sum_{j=1}^{s} A_i^j f(\widehat{Y}_j), \\ y_1 = y_0 + h\displaystyle\sum_{j=1}^{s} B^j f(\widehat{Y}_j). \end{cases}$$

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

$$\Phi_2(h/2)\circ\Phi_1(h/2)\colon\ \begin{array}{c|ccc:ccc} & a_1^1 & \ldots & a_s^s & 0 & \ldots & 0 \\ & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & a_s^1 & \ldots & a_s^s & 0 & \ldots & 0 \\ \hdashline & b^1 & \ldots & b^s & A_1^1 & \ldots & A_1^s \\ & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & b^1 & \ldots & b^s & A_s^1 & \ldots & A_s^s \\ \hline & b^s & \ldots & b^s & B^1 & \ldots & B^s \end{array}.$$

Композиция методов РК и присоединенные методы

Использование композиции методов

Композиция численных методов позволяет избежав решения сложных условий порядка, получить метод более высокого порядка точности.

Замечание

Особенно часто используется композиция метода со своим присоединенным, позволяющая кроме повышения порядка получить симметричный метод.

Определение

Присоединенным методом $\Phi^*(h)$ метода $\Phi(h)$ называется обратное отображение метода $\Phi(h)$ взятое с инвертированным шагом $-h$ т.е.

$$\Phi^*(h) \overset{\text{def}}{=} \Phi^{-1}(-h).$$

Условие явности и диагональной неявности присоединенных методов РК

Теорема

Присоединенный метод $\Phi^*(h)$ явного метода Рунге–Кутты $\Phi(h)$ является диагонально неявным, если выполняется условие

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

Теорема

Присоединенный метод $\Phi^{d*}(h)$ диагонально неявного метода Рунге–Кутты $\Phi^d(h)$ является явным, если выполняется условие

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

Условие явности и диагональной неявности присоединенных методов РК

$$
\Phi(h):\quad
\begin{array}{c|cccccc}
 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
 & b^1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \ldots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \ldots & b^2 & 0 \\
\hline
 & b^1 & b^2 & b^3 & \ldots & b^{s-1} & b^s
\end{array},
\qquad
\Phi^*(h):\quad
\begin{array}{c|cccccc}
 & b^s & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
 & b^s & b^{s-1} & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & 0 \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \ldots & b^2 & b^1 \\
\hline
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-3} & \ldots & b^2 & b^1
\end{array}.
$$

Условие явности и диагональной неявности присоединенных методов РК

$$
\Phi^{d}(h):\;
\begin{array}{c|cccccc}
 & b^1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^2 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^2 & b^1 \\
\hline
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s
\end{array}
,\quad
\Phi^{d*}(h):\;
\begin{array}{c|cccccc}
 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^s & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^s & b^{s-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & 0 & 0 \\
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-2} & \dots & b^2 & 0 \\
\hline
 & b^s & b^{s-1} & b^{s-3} & \dots & b^2 & b^1
\end{array}
.
$$

Раздельный метод Рунге–Кутты

$2N$ уравнений

$$\begin{cases} \mathbf{p}'(t) = \mathbf{f}(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)), \\ \mathbf{q}'(t) = \mathbf{g}(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)), \\ \mathbf{p}(t_0) = \mathbf{p}_0, \ \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mathbf{P}_i = \mathbf{p}_0 + h \sum\limits_{j=1}^{s} a_i^j \mathbf{f}(\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}_j), \\ \mathbf{Q}_i = \mathbf{q}_0 + h \sum\limits_{j=1}^{s} \hat{a}_i^j \mathbf{g}(\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}_j), \\ \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_0 + h \sum\limits_{j=1}^{s} b^j \mathbf{f}(\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}_j), \\ \mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_0 + h \sum\limits_{j=1}^{s} \hat{b}^j \mathbf{g}(\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}_j), \\ i, j = 1, \dots, s. \end{cases}$$

Раздельный метод Рунге–Кутты

Таблица Батчера

$$
\begin{array}{c|cccccc|cccccc}
c_1 & a_1^1 & a_1^2 & a_1^3 & \dots & a_1^{s-1} & a_1^s & \hat{a}_1^1 & \hat{a}_1^2 & \hat{a}_1^3 & \dots & \hat{a}_1^{s-1} & \hat{a}_1^s \\
c_2 & a_2^1 & a_2^2 & a_2^3 & \dots & a_2^{s-1} & a_2^s & \hat{a}_2^1 & \hat{a}_2^2 & \hat{a}_2^3 & \dots & \hat{a}_2^{s-1} & \hat{a}_2^s \\
c_3 & a_3^1 & a_3^2 & a_3^3 & \dots & a_3^{s-1} & a_3^s & \hat{a}_3^1 & \hat{a}_3^2 & \hat{a}_3^3 & \dots & \hat{a}_3^{s-1} & \hat{a}_3^s \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
c_s & a_s^1 & a_s^2 & a_s^3 & \dots & a_s^{s-1} & a_s^s & \hat{a}_s^1 & \hat{a}_s^2 & \hat{a}_s^3 & \dots & \hat{a}_s^{s-1} & \hat{a}_s^s \\
\hline
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & \hat{b}^1 & \hat{b}^2 & \hat{b}^3 & \dots & \hat{b}^{s-1} & \hat{b}^s
\end{array}
$$

Раздельный метод Рунге–Кутты

Таблица Батчера симплектического явного/диагонально неявного раздельного метода Рунге–Кутты

$$
\Psi(h):\quad
\begin{array}{c|cccccc|cccccc}
 & b^1 & 0 & & & & & 0 & & & & & \\
 & b^1 & b^2 & 0 & & & & \hat{b}^1 & 0 & & & & \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & 0 & & & \hat{b}^1 & \hat{b}^2 & 0 & & & \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & 0 & \hat{b}^1 & \hat{b}^2 & \hat{b}^3 & \dots & 0 & 0 \\
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & \hat{b}^1 & \hat{b}^2 & \hat{b}^3 & \dots & \hat{b}^{s-1} & 0 \\
\hline
 & b^1 & b^2 & b^3 & \dots & b^{s-1} & b^s & \hat{b}^1 & \hat{b}^2 & \hat{b}^3 & \dots & \hat{b}^{s-1} & \hat{b}^s
\end{array}
$$

Композиция раздельных методов Рунге–Кутты

Теорема

Пусть таблица Батчера раздельного метода Рунге–Кутты состоит из таблицы диагонально неявного метода $\Phi^d(h)$ и таблицы явного метода $\Phi(h)$. Тогда условия симплектичности раздельного метода Рунге–Кутты совпадают с условиями явности метода Φ_h^{d*} и диагональной неявности метода Φ_h^*

Составные симплектические методы

Уравнения Гамильтона можно записать в виде:

$$\dot{x}^\alpha(t) = \vec{X}_H x^\alpha(t), \quad x^\alpha(t) = (p_\alpha(t), q^\alpha(t))^T, \quad \alpha = 1, \dots, N$$

где $\vec{X}_H$ — гамильтоново векторное поле.

Определение

Векторное поле $\vec{X}$ на симплектическом многообразии называется *гамильтоновым* если:

$$\tilde{\omega}(\vec{X}, \cdot) = -\tilde{\mathrm{d}}H(\cdot)$$

где H — функция Гамильтона.

Решение уравнений Гамильтона представимо в виде:

$$x^\alpha(t) = \exp(t\vec{X}_H)(p_{0\alpha}, q_0^\alpha)^T = \exp(t\vec{X}_H)x_0^\alpha = \varphi_H(t)x_0^\alpha.$$

Если $H = H_1 + H_2$, то $\vec{X}_H = \vec{X}_{H_1} + \vec{X}_{H_2}$, но

$$\exp(t\vec{X}_H) = \exp(t(\vec{X}_{H_1} + \vec{X}_{H_2})) \neq \exp(t\vec{X}_{H_1})\exp(t\vec{X}_{H_2}),$$

однако

$$\exp(t(\vec{X}_{H_1} + \vec{X}_{H_2})) = \prod_{k=1}^{n} \exp(a_k t\vec{X}_{H_1})\exp(b_k t\vec{X}_{H_2}) + o(t^n) =$$

$$= \prod_{k=1}^{n} \varphi_{H_1}(a_k t)\varphi_{H_2}(b_k t) + o(t^n).$$

Расщепление гамильтонова векторного поля

Например для $n = 1$ получим композицию:

$$x^\alpha(t) = \varphi_{H_1}(a_1 t)\varphi_{H_2}(b_1 t)x_0^\alpha + o(t),$$

$a_1 = 1,\ b_1 = 1$. Фиксируя шаг $t = h$, получим численную схему первого порядка:

$$x_1^\alpha = \Phi_{H_1}(h)\Phi_{H_2}(h)x_0^\alpha.$$

- Представляем гамильтониан в виде $H = H_1 + H_2$,
- находим решения $\varphi_{H_1}(t)$ и $\varphi_{H_2}(t)$ канонических уравнений для H_1 и для H_2,
- находим композицию
$$\Phi_{H_1}(h)\Phi_{H_2}(h)$$
или
$$\Phi_{H_1}\left(\frac{1}{2}h\right)\Phi_{H_2}(h)\Phi_{H_1}\left(\frac{1}{2}h\right).$$

Составные методы: основная идея

Для методов более высокого порядка можно составлять композиции вида

$$
SABA_{2m}: \quad
\begin{aligned}
s = 2 &: \quad \underbrace{A_1 B_1}\, A_2\, \underbrace{B_1 A_1} \\
s = 4 &: \quad \underbrace{A_1 B_1 A_2 B_2}\, A_3\, \underbrace{B_2 A_2 B_1 A_1} \\
s = 6 &: \quad \underbrace{A_1 B_1 A_2 B_2 A_3 B_3}\, A_4\, \underbrace{B_3 A_3 B_2 A_2 B_1 A_1} \\
s = 8 &: \quad \underbrace{A_1 B_1 A_2 B_2 A_3 B_3 A_4 B_4}\, A_5\, \underbrace{B_4 A_4 B_3 A_3 B_2 A_2 B_1 A_1} \\
s = 2m &: \quad \underbrace{A_1 B_1 A_2 B_2 \dots A_m B_m}\, A_{m+1}\, \underbrace{B_m A_m \dots B_2 A_2 B_1 A_1}
\end{aligned}
$$

где $A_i = \Phi_{H_2}(a_i h)$ и $B_i = \Phi_{H_1}(b_i h)$.

Составные методы: пример

Линейный осциллятор: $H(p,q) = \dfrac{1}{2}p^2 + \dfrac{1}{2}q^2$. Гамильтоново векторное поле $\vec{X}_H = -q\dfrac{\partial}{\partial p} + p\dfrac{\partial}{\partial q} = \vec{X}_U + \vec{X}_T$.

$$\begin{bmatrix} p(t) \\ q(t) \end{bmatrix} = \exp(t\vec{X}_U)\begin{bmatrix} p_0 \\ q_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -t \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} p_0 \\ q_0 \end{bmatrix} \Rightarrow \varphi_U(t) = \begin{bmatrix} 1 & -t \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} p(t) \\ q(t) \end{bmatrix} = \exp(t\vec{X}_T)\begin{bmatrix} p_0 \\ q_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ t & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} p_0 \\ q_0 \end{bmatrix} \Rightarrow \varphi_T(t) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ t & 1 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} p(t) \\ q(t) \end{bmatrix} = \exp(t\vec{X}_H)\begin{bmatrix} p_0 \\ q_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{bmatrix}\begin{bmatrix} p_0 \\ q_0 \end{bmatrix} \Rightarrow \varphi_H(t) = \begin{bmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{bmatrix}.$$

$$\varphi_H(t) \neq \varphi_U(t)\varphi_T(t)$$

Проведено сравнение следующих методов

- ✓ Симплектические раздельные методы Рунге–Кутты — `SPRK`,
- ✓ симплектические методы Рунге–Кутты–Нюстрема — `SRKN`,
- ✓ симплектические составные методы — `SABA`,
- ✓ симплектические симметричные составные методы с симметричными стадиями (методы Йошиды) — `SS`,

Задача Кеплера

$$H(p_x, p_y, q^x, q^y) = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) - \frac{1}{\sqrt{(q^x)^2 + (q^y)^2}} = T(p_x, p_y) + U(q^x, q^y).$$

$r \stackrel{\text{not}}{=} \sqrt{((q^x)^2 + (q^y)^2)}$. Уравнения Гамильтона имеют вид:

$$\begin{cases} \dot{p}_x = \dfrac{q^x}{r^3}, \\ \dot{p}_y = \dfrac{q^y}{r^3}, \\ \dot{q}^x = p_x, \\ \dot{q}^y = p_y. \end{cases}$$

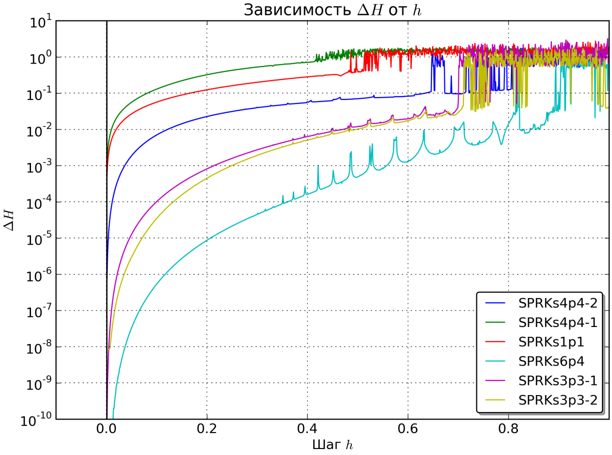


Рис. : Раздельные методы Рунге–Кутты

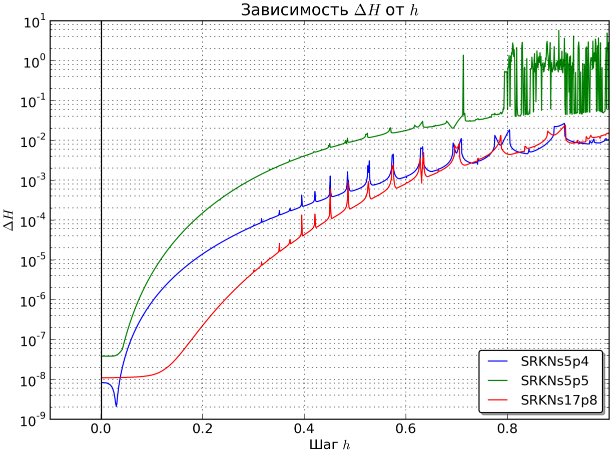


Рис. : Методы Рунге–Кутты–Нюстрёма

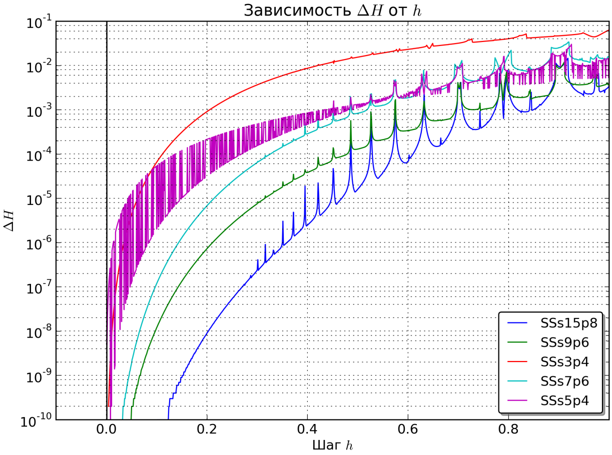


Рис. : Составные методы типа SS

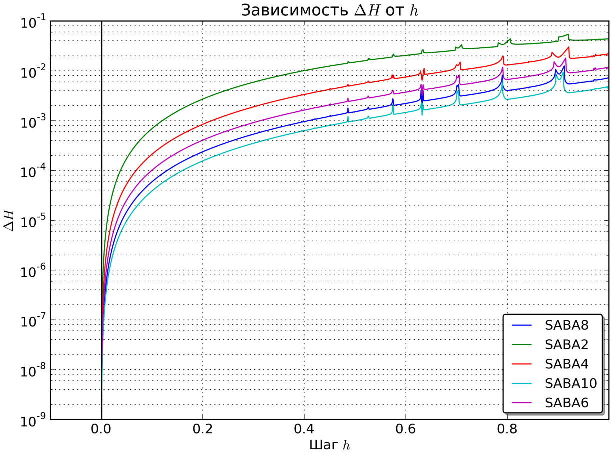
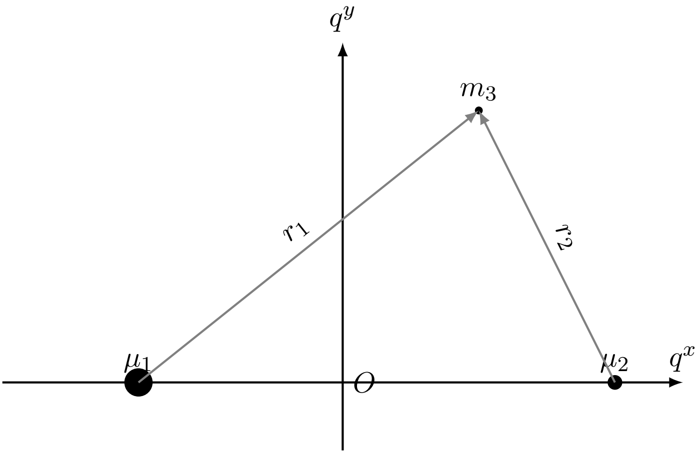


Рис. : Составные методы типа SABA

Ограниченная задача трех тел



Ограниченная задача трех тел

Синодические координаты

$$H(p_x, p_y, q^x, q^y) = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + q^y p_x - q^x p_y - F(q^x, q^y),$$

где

$$F(q^x, q^y) = \frac{\mu_1}{r_1} + \frac{\mu_2}{r_2},$$

$$r_1 = \sqrt{(q^x - \mu_2)^2 + (q^y)^2},\ r_2 = \sqrt{(q^x + \mu_1)^2 + (q^y)^2},\ \ \mu_1 + \mu_2 = 1.$$

$$\frac{\partial^2 H}{\partial p_\alpha \partial q^\beta} \neq 0, \forall \alpha, \beta = x, y$$

Расщепление вида $H = H_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + H_2(\mathbf{q})$

$$H(p_x, p_y, q^x, q^y) = \underbrace{\frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + q^y p_x - q^x p_y}_{H_1(p_x, p_y, q^x, q^y)} \underbrace{-F(q^x, q^y)}_{H_2(q^x, q^y)}$$

Уравнения для H_1:

$$\begin{cases} \dot{p}_x = p_y, \\ \dot{p}_y = -p_x, \\ \dot{q}^x = p_x + q^y, \\ \dot{q}^y = p_y - q^x, \end{cases} \qquad \begin{cases} p_x(t) = p_{x0}\cos t + p_{y0}\sin t, \\ p_y(t) = p_{y0}\cos t - p_{x0}\sin t, \\ q^x(t) = q_0^x \cos t + q_0^y \sin t + t(p_{x0}\cos t + p_{y0}\sin t), \\ q^y(t) = q_0^y \cos t - q_0^x \sin t + t(p_{y0}\cos t - p_{x0}\sin t). \end{cases}$$

Расщепление вида $H = H_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + H_2(\mathbf{q})$

Запишем базовые методы $\Phi^2(b_i h) \circ \Phi^1(a_i h)$ для составных методов типа $S(a_i h)$:

$$\Phi^1(a_i h): \begin{cases} p_{\frac{1}{2}x} = p_{0x} \cos a_i h + p_{0y} \sin a_i h, \\ p_{\frac{1}{2}y} = p_{0y} \cos a_i h - p_{0x} \sin a_i h, \\ q^x_{\frac{1}{2}} = q^x_0 \cos a_i h + q^y_0 \sin a_i h + a_i h (p_{0x} \cos a_i h + p_{0y} \sin a_i h), \\ q^y_{\frac{1}{2}} = q^y_0 \cos a_i h - q^x_0 \sin a_i h + a_i h (p_{0y} \cos a_i h - p_{0x} \sin a_i h). \end{cases}$$

$$\Phi^2(b_i h): \begin{cases} p_{1x} = p_{\frac{1}{2}x} + b_i h \dfrac{\partial F}{\partial q^x} \left(q^x_{\frac{1}{2}}, q^y_{\frac{1}{2}} \right), \\ p_{1y} = p_{\frac{1}{2}y} + b_i h \dfrac{\partial F}{\partial q^y} \left(q^x_{\frac{1}{2}}, q^y_{\frac{1}{2}} \right), \\ q^x_1 = q^x_{\frac{1}{2}}, \quad q^y_1 = q^y_{\frac{1}{2}}. \end{cases}$$

Результаты выносимые на защиту

- ✓ Сформулированы и доказаны утверждения, касающиеся связи условий диагональной неявности и явности присоединенного метода к методы Рунге–Кутты с условиями симплектичности раздельных методов Рунге–Кутты.
- ✓ Показана связь между составными методами и методами Рунге–Кутты для гамильтониана вида $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + U(\mathbf{q})$.
- ✓ На основе численных моделей линейного осциллятора и задачи двух тел дана оценка точности сохранения физически значимых инвариантов симплектическими численными методами.
- ✓ Записаны несводимые к методам семейства Рунге–Кутты симплектические численные методы для ограниченной задачи трех тел типа $SABA$ и SS.

Основная литература

- Сурис Ю.Б. *Гамильтоновы методы типа Рунге-Кутты и их вариационная трактовка.* // Математическое моделирование. — 1990. — Т. 2, № 4. — С. 78–87.
- Candy J., Rozmus W. *A symplectic integration Algorithm for separable Hamiltonian Functions* // Journal of computational physics. — 1991. — Vol. 92, No 1. — Pp. 230–256.
- Yoshida H. *Construction of higher order symplectic integrators* // Physics Letters A. — 1990. — Vol. 150, No 5-7. — Pp. 262–268.
- Hairer E., Lubich C., Wanner G. *Geometric numerical integration: structurepreserving algorithms for ordinary differential equations.* Springer series in computational mathematics. — Springer, 2006
- Sanz-Serna J., Calvo M. *Numerical Hamiltonian Problems.* — 1 edition. — London: Chapman and Hall, 1994