

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский университет дружбы народов»

На правах рукописи

Баддур Али

**Исследование консервативных разностных схем в моделях
движения многих тел**

Специальность 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ.

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
Малых Михаил Дмитриевич

Москва — 2022

Оглавление

	Стр.
Введение	4
Глава 1. Метод конечных разностей для интегрирования динамических систем	9
1.1 Динамические системы	9
1.2 Метод конечных разностей	13
1.3 Пакет <code>fdm for Sage</code>	15
1.4 Метод Рунге-Кутты	19
1.5 Разностные схемы и алгебраические интегралы	24
1.6 Симплектические схемы Рунге-Кутты	28
1.7 Миметические разностные схемы	30
Глава 2. О методе Ричардсона-Калиткина	33
2.1 Введение	33
2.2 Основные определения	35
2.3 Апостериорные оценки ошибок	37
2.4 Обоснование метода Ричардсона-Калиткина	40
2.5 Учет нескольких членов в разложении u_h по степеням h	42
2.6 Компьютерные эксперименты	43
2.7 Обсуждение результатов экспериментов	45
2.8 Инструменты для оценки ошибки в пакете <code>fdm</code>	47
2.9 Заключение	49
Глава 3. Организация вычислений по симплектическим схемам Рунге-Кутты	51
3.1 Итерационный алгоритм для выполнения одного шага по схеме средней точки	51
3.2 Адаптация шага	53
3.3 Обобщение на случай произвольной симплектической схемы Рунге-Кутты	54
3.4 Тест: эллиптический осциллятор	58
3.5 Заключение	60

Глава 4. Семейство консервативных разностных схем для задачи многих тел	63
4.1 Постановка задачи	63
4.2 Рационализация задачи	65
4.3 Система с квадратичными интегралами	67
4.4 Заключение	71
Глава 5. Тестирование семейства консервативных разностных схем для задачи многих тел	73
5.1 Задача двух тел	73
5.2 Периодические решения задачи трех тел	78
5.2.1 Тест на решениях Лагранжа	78
5.2.2 Тест на решениях Эйлера	81
5.2.3 Хореографический тест	82
5.3 Непериодические решения задачи трех тел	83
5.3.1 Тест с «петельками»	83
5.3.2 Первый тест, в котором тела подлетают близко друг к другу	84
5.3.3 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу	96
5.4 Заключение	103
Заключение	104
Список литературы	105
Список рисунков	114

Введение

Задача многих тел на протяжении многих веков притягивает внимание исследователей. Математики XVIII-XIX веков стремились отыскать решение этой задачи в конечном виде. Для этого они искали алгебраических интегралы движения. Если динамическая система имеет достаточно много алгебраических интегралов, ее можно свести к квадратурам. В 1880-х годах Брунс доказал, задача многих тел не допускает других алгебраических интегралов движения, кроме десяти известных. Этих интегралов не достаточно для сведения задачи трех тел к квадратурам [1].

Это обстоятельство подтолкнуло к разработке численных методов интегрирования динамических систем. Наиболее простым для реализации численным методом интегрирования динамических систем является явный метод Рунге-Кутты. Этот метод сводит систему дифференциальных уравнений к системе алгебраических уравнений, описывающая переход с одного слоя по времени на другой. Однако, алгебраические интегралы не сохраняются на приближенных решениях. Это приводит к нарушению фундаментальных законов природы (например, закону сохранения энергии). Поэтому такие методы вносят в модель новые, несвойственные ей явления.

Использование разностных методов, сохраняющих все алгебраические интегралы движения рассматриваемой динамической системы, позволит правильно «определить характер динамического процесса, используя лишь грубые вычисления с большим шагом сетки» [2]. Это обстоятельство делает конструирование и исследование разностных схем, сохраняющих все алгебраические интегралы движения, одной из актуальных задач моделирования динамических систем. При этом такие исследования естественно выполнять методами компьютерной алгебры [3].

Разностные методы интегрирования динамических систем вошли в употребление в начале XX века. Именно тогда был сконструирован самый распространенный метод интегрирования динамических систем — явный метод Рунге-Кутты 4-го порядка (rk4). В то же время Рунге и Ричардсон предложили способы, позволяющие оценить точность приближенных решений путем сгущения сетки. Метод Ричардсона был применен в ряде практически важных задач Н.Н. Калиткиным, в школе которого был выработан целый ряд рекомендаций,

позволяющих оценить порядок аппроксимации и ошибку численного метода интегрирования дифференциальных уравнений [4—9]. Благодаря этому теоретические предсказания относительно нового численного метода можно быстро проверить. Однако следует помнить, что ни один из этих методов не может дать решения задачи Коши для задачи трех тел с заданной точностью и полиномиальной сложностью, напр., в постановке, предложенной в [10].

В конце 1980-х годов Сурисом [11; 12] и Купером [13] были предложены симплектические методы Рунге-Кутты, сохраняющие гамильтонову структуру задачи многих тел и как следствие фазовый объем, см. также [14]. Эти схемы хорошо зарекомендовали себя в задачах небесной механике, в том числе для расчетов траекторий спутников. На каф. ПИ и ТВ РУДН симплектическим схемам были посвящены две канд. дисс. — М.Н. Геворкяна (науч. рук. — Д.С. Кулябов, 2013) [2] и Юй Ин (науч. рук. — Л.А. Севастьянов, 2020) [15].

Купер доказал, что симплектические схемы сохраняют линейные и квадратичные интегралы движения динамической системы. К сожалению, полная механическая энергия является квадратичной функцией только в линейных задачах. Поэтому в нелинейных задачах, в том числе в задаче многих тел, полная механическая энергия не сохраняется на приближенных решениях, найденных по симплектическим схемам.

Первая разностная схема для задачи многих тел, сохраняющая все ее алгебраические интегралы движения, была предложена Д. Гринспенем в 1992 г. [16—19] и независимо от него и в несколько иной форме Симо и Гонсалесом [20], затем эта схема несколько раз переоткрывалась [21].

Систематический подход к построению схем, сохраняющих полную механическую энергию динамических систем, был предложен в 2016 г. [22; 23] и получил название метод квадратизации энергии (invariant energy quadratization method, сокр. IEQ). В этих работах было предложено ввести новые переменные, в которых энергия записывается как квадратичная функция и поэтому сохраняется на решении, найденном по любой симплектической схеме в силу теоремы Купера.

Для задачи многих тел неоднократно предлагалось ввести новые координаты, более удобные с той или иной точки зрения. При этом обычно стараются уменьшить число искомым функций и сохранить гамильтонову структуру задачи. Однако в ряде случаев, например, при исследовании простого столкновения тел, это стремление приводит к существенному усложнению построения [24, гл. 6]. Поэтому М.Д. Малых предположил, что квадратизации всех алгебраических ин-

тегралов задачи многих тел можно добиться путем увеличения числа искомых функций.

Этот подход сулит построение целого семейства консервативных разностных схем на основе хорошо изученных симплектических схем Рунге-Кутты, имеющих высокий порядок аппроксимации.

Целью данной работы проектирование и исследования разностных схем для моделей движения многих тел, сохраняющих все алгебраические интегралы движения.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

- Разработать метод проектирования разностных схем произвольного порядка аппроксимации, сохраняющих все алгебраические интегралы движения задачи многих тел.
- Разработать численный метод исследование моделей движения многих тел на основе спроектированных разностных схем и реализовать в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения компьютерных экспериментов.
- Протестировать реализацию путем вычисления порядков аппроксимации реализованных методов по методу Ричардсона-Калиткина на простейших тестовых примерах.
- Протестировать предложенную реализацию численного метода исследование моделей движения многих тел.

Для решения первой задачи используются симплектические схемы Рунге-Кутты, сохраняющие линейные и квадратичные интегралы, и концепция «квадратизации» энергии путем введения дополнительных переменных.

Ряд наработок студентов и аспирантов кафедры, связанные с решением обыкновенных дифференциальных уравнений по методу конечных разностей, собраны М.Д. Малых и Л. Гонсалесом в пакет `fdm for sage`, переданный в общественный доступ по адресу: <https://github.com/malykhmd/fdm>. Этот пакет был представлен на ИТТТМ'2022 [25]. Поэтому решение названных задач было выполнено путем добавления в этот пакет новых функций — оригинальной реализации неявного метода Рунге-Кутты, поддерживающего работы с таблицами Бутчера любого размера, и оригинальной реализации метода Ричардсона-Калиткина.

Научная новизна:

1. Предложен метод проектирования разностных схем произвольно большого порядка аппроксимации, сохраняющих все алгебраические интегралы движения задачи многих тел.
2. В пакет `fdm for sage` добавлены новые инструменты: реализация неявного метода Рунге-Кутты с адаптивным шагом и реализация метода Ричардсона-Калиткина.
3. Выполнено оригинальное исследование сохранения алгебраических интегралов движения задачи многих тел в плоских задачах 2 и 3 тел на схемах 2, 4 и 6 порядков аппроксимации.

Теоретическая и практическая значимость Разрабатываемые численные методы найдут применение в теоретических исследованиях динамических систем, богатых законами сохранения, но тем не менее не сводящихся к квадратурам, и особенно при исследовании задачи многих тел. Результаты диссертации могут быть использованы при создании учебных курсов по теме «Дифференциальные уравнения» и «Компьютерная алгебра».

Методология и методы исследования. В диссертации для вычисления приближенных решений использовались симплектические методы Рунге-Кутты, для апостериорной оценки совершаемых при этом ошибок — метод Ричардсона-Калиткина. Символьные и численные вычисления выполнялись в системе компьютерной алгебры Sage, созданные в рамках диссертационного исследования инструменты были интегрированы в пакет `fdm for sage`.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Разработан алгоритм расчета приближенного решения динамической системы по неявному методу Рунге-Кутты, этот алгоритм был реализован в системе Sage и протестирован.
2. Метод Ричардсона-Калиткина реализован в системе Sage и протестирован.
3. Для задачи многих тел предложена новая система переменных, в которой все алгебраические интегралы являются квадратичными функциями.
4. На основе симплектических схем Рунге-Кутты впервые разработан метод проектирования разностных схем произвольно большого порядка аппроксимации, сохраняющих все алгебраические интегралы движения задачи многих тел. Схемы до 6-го порядка выписаны явно, порядки аппроксимации протестированы по методу Ричардсона-Калиткина.

5. Предложенный численный метод исследования моделей движения многих тел реализован в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения компьютерных экспериментов.

Достоверность Обоснованность результатов диссертации опирается на строго обоснованные теоретические исследования, все оригинальные теоремы, используемые в тексте диссертации, и их доказательства были опубликованы в рецензируемых журналах. Везде, где это возможно, проводилось сравнение полученного численного решения с аналитическими решениями. Результаты находятся в соответствии с результатами, полученными другими авторами.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на международных конференциях РСА'2020 и РСА'2021, ПОМИ, Санкт-Петербург, всероссийских конференциях с международным участием ИТТМ'2019 и ИТТМ'2021, РУДН, а также на научных семинарах: по вычислительной и прикладной математике ЛИТ ОИЯИ (Дубна, сентябрь 2021 г.) и «Математические методы в естественных науках» под рук. проф. А.Н. Боголюбова (МГУ, март 2022 г.).

Личный вклад. Автор диссертации, работая в коллективе соавторов, доказал ряд теорем, необходимых для конструирования разностных схем, самостоятельно разработал и реализовал ряд основных функций пакета `fdm for sage`, в т.ч. `richardson`, `richardson_plot`, `irk` и `irk_adaptive`, провел серию численных экспериментов в Sage.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 8 печатных изданиях, 2 из которых изданы в журналах, включенных в Перечень ВАК/РУДН, 3 — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 3 — в тезисах докладов.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 5 глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 117 страниц, включая 50 рисунков. Список литературы содержит 97 наименований.

Глава 1. Метод конечных разностей для интегрирования динамических систем

1.1 Динамические системы

Рассмотрим математическую модель, основанную на системе обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, \dots, x_n), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (1.1)$$

которую называют динамической системой. Независимую переменную t будем интерпретировать как время, зависящие от нее переменные x_1, \dots, x_n — как координаты точки в n -мерном пространстве. В механических задачах правые части f_i являются рациональными функциями координат x_1, \dots, x_n или сводятся к такому виду заменой переменных. Мы будем рассматривать только автономные системы, то есть будем считать, что правые части дифференциальных уравнений не зависят явно от t .

Пример 1.1. Движение гироскопа [26] описывается системой 6 обыкновенных дифференциальных уравнений с квадратичной правой частью:

$$A\dot{p} = (B - C)qr + Mg(y_0\gamma'' - z_0\gamma'), \dots \quad (1.2)$$

и

$$\dot{\gamma} = r\gamma' - q\gamma'', \dots$$

Здесь p, q и r — координаты вектора угловой скорости относительно главных осей, проведенных через точку закрепления, $\gamma, \gamma', \gamma''$ — направляющие косинусы одной из главных осей, A, B, C — моменты инерции относительно главных осей, M — масса тела, а (x_0, y_0, z_0) — координаты центра тяжести.

Пример 1.2. Задача n тел [24] описывается системой уравнений из $3n$ дифференциальных уравнений второго порядка:

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \sum_{j=1}^n \gamma \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} (\vec{r}_j - \vec{r}_i), \quad i = 1, \dots, n \quad (1.3)$$

Здесь \vec{r}_i — радиус-вектор, проведенный в i -ое тело, а r_{ij} — расстояние между i -м и j -м телами. Если обозначить скорость i -го тела как

$$\vec{v}_i = (u_i, v_i, w_i) = (\dot{x}_i, \dot{y}_i, \dot{z}_i),$$

то систему (1.3) можно переписать как систему дифференциальных уравнений первого порядка относительно координат тел и их скоростей с алгебраической правой частью:

$$\dot{\vec{r}}_i = \vec{v}_i \quad m_i \dot{\vec{v}}_i = \sum_{j=1}^n \gamma \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} (\vec{r}_j - \vec{r}_i), \quad i = 1, \dots, n$$

Эту систему можно рационализировать, если добавить дополнительные переменные, см. 4.1.

Аналитическое исследование той или иной динамической системы начинают с отыскания ее симметрий и законов сохранения [27].

Пусть g — функция переменных x_1, \dots, x_n . Ее называют интегралом движения или инвариантом системы (1.1), если выражение

$$g(x_1(t), \dots, x_n(t)) = \text{Const} \quad (1.4)$$

для любого решения $x(t)$ этой системы. Само равенство называют законом сохранения. Для дифференцируемых выражений это определение эквивалентно выполнению уравнения в частных производных

$$\sum_{i=1}^n f_i \frac{\partial g}{\partial x_i} = 0,$$

которое обычно записывают короче как

$$Dg = 0,$$

приняв

$$D = \sum_{i=1}^n f_i \frac{\partial}{\partial x_i}.$$

Механические модели очень часто обладают несколькими интегралами движения. Часто эти интегралы являются алгебраическими функциями координат и скоростей.

Пример 1.3. Гироскоп (пример 1.1) обладает тремя законами сохранения. Закон сохранения полной механической энергии дает первый интеграл движения

$$Ap^2 + Bq^2 + Cq^2 = 2Mg(x_0\gamma + y_0\gamma' + z_0\gamma'') + \text{Const},$$

закон сохранения момента импульса дает второй интеграл

$$Ap\gamma + Bq\gamma' + Cr\gamma'' = \text{Const}$$

Сумма квадратов направляющих косинусов равна 1, что дает третий интеграл движения

$$\gamma^2 + \gamma'^2 + \gamma''^2 = 1. \quad (1.5)$$

Старые авторы полагали, что эти соотношения следует использовать для уменьшения числа неизвестных в рассматриваемой системе уравнений. Однако такого рода понижение порядка системы ведут к существенному усложнению ее правой части, в которой появляются радикалы.

Пример 1.4. Задача многих тел (пример 1.2) обладает 10 классическими интегралами задачи многих тел [24; 28], а именно:

1. законом сохранения импульса

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = \text{const}$$

2. законом сохранения момента импульса

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i \times \vec{r}_i = \text{const}$$

3. законом о движении центра масс (3 скалярных интеграла)

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{r}_i - t \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = \text{const}$$

4. законом сохранения энергии

$$\sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2} (u_i^2 + v_i^2 + w_i^2) - \gamma \sum_{i,j} \frac{m_i m_j}{r_{ij}} = \text{const},$$

Задача об отыскании всех алгебраических интегралов движения заданной динамической системы была сформулирована Брунсом [29] в конце XIX века.

В настоящее время известно, что всякий алгебраический интеграл задачи многих тел выражается алгебраически через 10 классических [1; 30], аналогичное утверждение справедливо и для задачи о вращении волчка [31]. Алгебраические интегралы динамических систем всегда выражаются алгебраически через интегралы рациональные [32]. Метод отыскания всех рациональных интегралов заданной динамической системы заданного порядка был предложен М.Н. Лагунтинским [33; 34] в 1911 г. и переоткрыт в начале 2000-х годов [35; 36]. Этот метод реализован в 2016 г. в системе компьютерной алгебры Sage М.Д. Малых и Юй Ин [37—41] и в 2018 г. С.А. Глазковым в системе Math Partner [42; 43].

Если интегралов движения оказывается достаточно для сведения системы дифференциальных уравнений к квадратурам, то в наших руках оказывается точное, или как еще говорят, аналитическое решение задачи.

Пример 1.5. Осциллятор Якоби

$$\dot{p} = qr, \quad \dot{q} = -pr, \quad \dot{r} = -k^2 pq \quad (1.6)$$

имеет два интеграла

$$p^2 + q^2 = c_1 \quad \text{и} \quad k^2 p^2 + r^2 = c_2. \quad (1.7)$$

Поэтому интегрирование уравнений сводится к обращению эллиптического интеграла

$$t + c_3 = \int \frac{dp}{\sqrt{(c_1 - p^2)(c_2 - k^2 p^2)}}.$$

По определению частное решение этой системы уравнений при начальных условиях

$$p = 0, \quad q = r = 1 \quad \text{при} \quad t = 0.$$

называют Якобиевыми эллиптическими функциями [44; 45] и обозначают так:

$$p = \operatorname{sn} t, \quad q = \operatorname{cn} t, \quad r = \operatorname{dn} t.$$

Эти функции являются однозначными аналитическими функциями t .

Однако для большинства интересных задач отыскать достаточное число законов сохранения не удастся и поэтому их приходится решать численно по методу конечных разностей.

1.2 Метод конечных разностей

Метод конечных разностей для построения приближенных решений обыкновенных дифференциальных уравнений был предложен Эйлером, который, однако, указал и на многие его недостатки. Во всеобщее употребление метод вошел в начале XX века во многом благодаря распространению арифмометров и был подробно описан в руководствах по численным методам того времени [46—48], современное изложение предмета дано в [49; 50].

Вслед за [15], примем самое широкое определение понятия разностной схемы как системы уравнений (1.1) описывает переход от значения x , взятый в некоторый момент времени t , к значению x , взятому в следующий момент времени $t + \Delta t$. Это новое значение будем далее обозначать как \hat{x} , а величина Δt именуется шагом.

Пусть $x = a$ — точка общего положения в \mathbb{R}^n или рассматриваемом подмножестве. Если в точке $x = \hat{x} = a$ и $\Delta t = 0$ выполнены условия теоремы о неявной функции, то система алгебраических уравнений, задающих разностную схему, допускает решение в виде степенного ряда

$$\hat{x} = s(x) + s'(x)\Delta t + s''(x)\Delta t^2 + \dots \quad (1.8)$$

В то же время точное решение системы дифференциальных уравнений (1.1) разлагается в степенной ряд

$$x(t + \Delta t) = x + f\Delta t + Df\Delta t^2 + \frac{1}{2!}D^2(f)\Delta t^3 + \dots \quad (1.9)$$

Будем говорить, что разностная схема аппроксимирует дифференциальное уравнение, если первые два члена в рядах (1.8) и (1.9) совпадают:

$$s(x) = x, \quad s'(x) = f(x).$$

Будем говорить, что разностная схема аппроксимирует дифференциальное уравнение с порядком аппроксимации r , если в рядах (1.8) и (1.9) совпадают первые $r + 1$ члены:

$$s(x) = x, \quad s'(x) = f(x), \dots, s^{(r+1)} = \frac{1}{r!}D^{(r)}(f).$$

Пример 1.6. Явная схема Эйлера описывается уравнением

$$\hat{x} - x = f(x)\Delta t,$$

из которого \hat{x} выражается явно:

$$\hat{x} = x + f(x)\Delta t.$$

Это решение совпадает с первыми двумя членами ряда (1.9) и поэтому схема имеет первый порядок аппроксимации.

Пример 1.7. Схема средней точки описывается уравнением

$$\hat{x} - x = f\left(\frac{\hat{x} + x}{2}\right)\Delta t. \quad (1.10)$$

Подставляя сюда

$$\hat{x} = g + g'\Delta t + g''\Delta t^2 + \dots,$$

имеем

$$g - x + g'\Delta t + g''\Delta t^2 + \dots = f\left(\frac{g + x + g'\Delta t + g''\Delta t^2 + \dots}{2}\right)\Delta t.$$

Сравнивая члены при разных степенях Δt , мы получим

$$\hat{x} = x + f\Delta t + \frac{1}{2}D(f)\Delta t^2 + \dots$$

Это решение совпадает с первыми тремя членами ряда (1.9) и поэтому схема имеет второй порядок аппроксимации.

Под приближенным решением задачи Коши

$$\frac{dx}{dt} = f(x), \quad x|_{t=0} = x^{(0)}, \quad (1.11)$$

найденным по некоторой разностной схеме, понимают последовательность точек

$$x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(m)}, \dots$$

n -мерного пространства, начальный элемент которой берется из начальных условий, а следующие элементы находятся рекуррентно:

$$x^{(m+1)} = \hat{x}^{(m)}, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

При этом $x^{(m)}$ интерпретируются как приближенные значения решения задачи Коши при $t = m\Delta t$.

Если схема аппроксимирует дифференциальное уравнение с порядком r , то можно доказать, что

$$x^{(m)} - x(m\Delta t) = c_m \Delta t^r + O(\Delta t^{r+1}), \quad (1.12)$$

где коэффициент c_m не зависит от шага Δt , и что

$$|x^{(m)} - x(m\Delta t)| \leq M_m \Delta t^r, \quad (1.13)$$

где константа M_m не зависит от шага Δt [50, ch. II.3].

1.3 Пакет `fdm` for Sage

Ввиду востребованности интегрирования дифференциальных уравнений при решении прикладных задач первые интеграторы были созданы на заре появления компьютерной техники [47]. Ряд удачных разработок был переписан на python и доступен в библиотеке SciLab [51]. Среди многочисленных альтернатив этому собранию, хочется выделить проект `nodepy` (<https://github.com/ketch/nodepy>), позволяющий проводить компьютерные эксперименты со схемами высокого порядка [52]. В то же время следует отметить, что системы компьютерной алгебры предоставляют весьма бедный инструментарий для работы с разностными схемами, напр., в Sage [53] имеется реализация метода Рунге-Кутты четвертого порядка, которая к тому же, очевидно, не писалась специально для Sage и не позволяет менять поле, над которым ведутся расчеты. С другой стороны разностные схемы — объект чисто алгебраический, поэтому создание инструментов для работы с ними в системах компьютерной алгебры представляется естественной задачей в рамках общего сближения численных и символьных методов, характерных для 2010-х годов.

В настоящее время в РУДН разрабатывается дополнение к Sage — пакет `fdm`, в котором собраны наработки последних лет, в том числе и выполненные в рамках настоящего диссертационного исследования. При его создании мы придерживались следующих общих принципов.

- Действия, которые могут быть выполнены аналитически, выполняются аналитически.
- Реализации методов не зависят от поля (\mathbb{R} , \mathbb{C}) и тем более от числа бит, отведенных на одно число.
- Численные решения рассматриваются как элементы нового класса, в определении которого предусмотрены инструменты для интерполяции и визуализации.

Цель проекта — создать удобную среду для численных экспериментов с ОДУ. Этот проект доступен для всех желающих на <https://github.com/malykhmd/fdm>.

Основные классы этого пакета написаны М.Д. Малых и Л. Гонсалесом, в него интегрирован код, написанный в рамках настоящего диссертационного исследования, а также ряд функций, написанных в рамках исследований, проведенных Юй Ин и Р. Байрамовым в РУДН. Опишем кратко его основные функции, следуя [25].

Чтобы стандартизировать задание начальной задачи (1.11), создан класс `InitialProblem`, для задания которого нужно указать x, f, x_0, T , где $x = [x_1, \dots, x_n]$ — список используемых переменных, $f = [f_1, \dots, f_n]$ — список правых частей, элементы которого являются символьными выражениями, $x_0 = [x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}]$ — список начальных данных. В качестве независимой переменной всегда выступает t . Напр., начальная задача

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = x_2, & \frac{dx_2}{dt} = -x_1, \\ x_1(0) = 0, & x_2(0) = 1 \end{cases} \quad (1.14)$$

на отрезке $0 < t < 10$ описывается так:

```
sage: var("t,x1,x2")
sage: pr1=Initial_problem([x1,x2],[x2,-x1],[0,1],10)
```

Численное решение представляет собой список точек, каждый элемент которого — список координат точки, причем первым идет значение t , а затем x_1, \dots, x_n в том порядке, в котором они идут в x . Целый ряд манипуляций с этим списком можно делать независимо от метода, которым он был получен, поэтому мы создали для него особый класс — `Numsol`. Для преобразования списка в элемент этого класса необходимо дополнительно указать список переменных $[t, x_1, \dots, x_n]$, порядок разностной схемы и шаг равномерной сетки или аналог этой величины для квазиравномерной сетки.

Численные методы в этом пакете реализованы как функции, на вход которых подается начальная задача и дополнительные параметры, а на выходе которых — численное решение этой начальной задачи. Напр., написанная Госалесом функция `erk` дает решение начальной задачи по явному методу Рунге-Кутты с постоянным шагом, который можно задать при помощи опции `N`, равной числу точек, на которые делится интервал $[0, T]$.

```
| sage: s1=erk(pr1,N=20)
```

Среди функций, описанных в классе `Numsol`, выделим следующие.

Функция `list()` позволяет вывести численное решение как список точек:

```
| sage: s1.list()
| [[0, 0, 1],
|  [1/2, 0.479166666666667, 0.877604166666667],
|  [1, 0.841037326388889, 0.540588378906250],
5 |  [3/2, 0.997129793520327, 0.0714255615516945],
|  [2, 0.909310009744432, -0.415107988970883],
|  [5/2, 0.599108341961540, -0.800011547073341],
|  [3, 0.142441110884229, -0.989166214282915],
|  [7/2, -0.348968565260602, -0.936349423479272],
10 |  [4, -0.754923698992210, -0.654530051313969],
|  [9/2, -0.976153166672253, -0.212684027807919],
|  [5, -0.958587183034391, 0.281087670042776],
|  [11/2, -0.706572264048748, 0.706006735632144],
|  [6, -0.281795868823212, 0.958160329408860],
15 |  [13/2, 0.211813262546374, 0.975912684568377],
|  [7, 0.653513029788306, 0.754971183309922],
|  [15/2, 0.935282783249179, 0.349424196079155],
|  [8, 0.988240494879005, -0.141500203227015],
|  [17/2, 0.799481795261599, -0.597713071732398],
20 |  [9, 0.415224374490619, -0.907640509119668],
|  [19/2, -0.0705084361319803, -0.995510772082297],
|  [10, -0.538894075624010, -0.839879109227733]]
```

Функция `plot(u, v)` позволяет построить график зависимости символьного выражения v от символьного выражения u . Напр., для построения графика зависимости x_1 от t можно использовать конструкцию

```
| sage: s1.plot(t,x1)
```

Поддерживается большинство опций функции стандартных функций `point/line`, кроме тех, к которым можно обратиться через метод `show`. Напр., мы можем изменить цвет графика при помощи опции `color`, а рассматриваемый интервал по оси абсцисс при помощи опций `xmin/xmax` метода `show`. Так конструкция

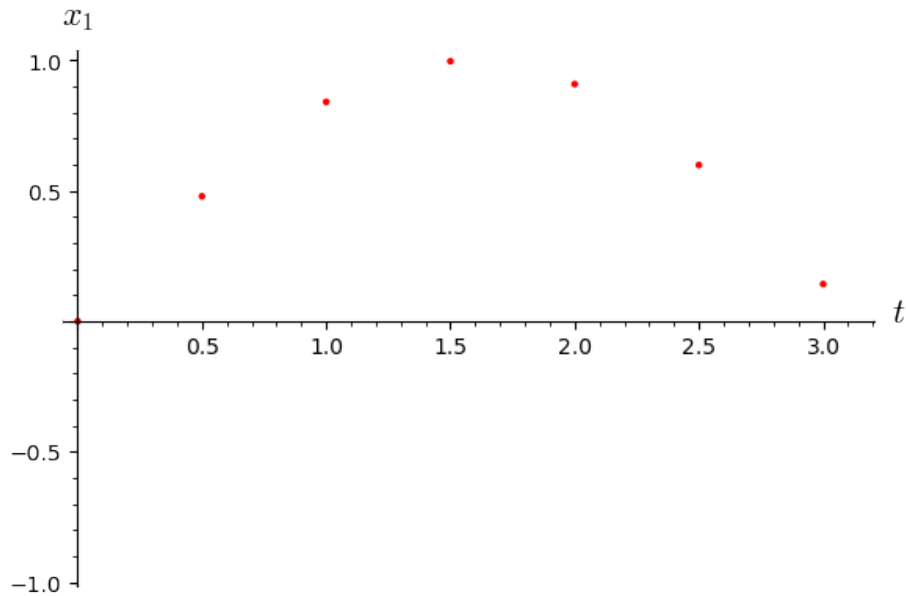


Рисунок 1.1 — График приближенного решения

```
| sage: s1.plot(t,x1, color='red').show(xmin=0,xmax=pi)
```

построит график приближенного решения в красном цвете на отрезке $0 < t < \pi$, см. рис. 1.1.

Функция `value(u, a)` позволяет найти значение символьного выражения u при $t = a$. Напр., конструкция

```
| sage: s1.value(x1,9.12)
| 0.303582697696811
```

дает значение x_1 при $t = 9.12$, которое отличается от точного значения $\sin 9.12$ на 0.0035. Если a не совпадает с узлами сетки по t , то используется интерполяция при помощи многочлена Тейлора, порядок интерполяции согласован с порядком разностной схемы.

Если система дифференциальных уравнений содержит много уравнений или используется схема высокого порядка, интерполяция по формуле Тейлора может оказаться излишне затратной. В этом случае рекомендуется использовать интерполяцию сплайнами. Напр., конструкция

```
| sage: s1.spline(x1,9.12)
```

дает аппроксимацию для x_1 в окрестности $t = 9.12$ по 5 точкам. Однако следует помнить, что эта интерполяция не согласована с порядком аппроксимации разностной схемы.

Функция `list(u)` позволяет найти все нули символьного выражения u на интервале $0 < t \leq T$. Вот, напр., нули x_1 .

```
sage: s1.zeros(x1)
[3.1430180411731743, 6.286036263964258, 9.429057230259955]
```

против точных значений

```
sage: [RR(pi)*i for i in [1,2,3]]
[3.14159265358979, 6.28318530717959, 9.42477796076938]
```

1.4 Метод Рунге-Кутты

Одним из наиболее часто используемым методом численного исследования динамических систем является явный метод, предложенный Карлом Рунге и Вильгельмом Куттой в начале прошлого века [46—48], современное изложение предмета дано в [49; 50]. Кратко опишем этот метод, следуя описанию, предложенному Бутчером в 1964 году [54].

Разностная схема из семейства схем Рунге-Кутты однозначно определяется заданием натурального числа s , именуемым числом стадий (stage), и таблицы Бутчера, имеющую следующую структуру:

$$\begin{array}{c|cccc}
 c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\
 c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\
 \hline
 & b_1 & b_2 & \cdots & b_s
 \end{array}$$

Матрица

$$A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{s \times s}$$

называется матрицей Рунге-Кутты, а столбцы

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_s \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_s \end{pmatrix}$$

называются соответственно весами и узлами Рунге-Кутты. Обычно предполагается, что

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}.$$

Обычно таблица Бутчера содержит много нулей, которые традиционно опускают, оставляя соответствующие места в таблице Бутчера пустыми.

Чтобы перейти от значения x к следующему значению \hat{x} по схеме Рунге-Кутты, заданной таблицей Бутчера, следует по заданной динамической системы (1.1) составить систему алгебраических уравнений

$$\vec{k}_i = \vec{f} \left(\vec{x} + \Delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} \vec{k}_j \right), \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (1.15)$$

и решить относительно вспомогательных переменных $\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_s$, именуемых наклонными. Затем вычислить \hat{x} по формуле

$$\hat{x} = \vec{x} + \Delta t \sum_{i=1}^s b_i \vec{k}_i. \quad (1.16)$$

Таким образом, при помощи алгебраических уравнений описан некоторый переход от \vec{x} к \hat{x} , то есть некоторая разностная схема в смысле определения, данного в разделе 1.2.

Схема Эйлера (пример 1.6) и схема средней точки (пример 1.7), рассмотренные выше, являются одностадийными схемами Рунге-Кутты.

Пример 1.8. Схема Эйлера

$$\hat{x} = x + f(x)\Delta t$$

может быть записана в виде

$$k = f(x),$$

$$\hat{x} = x + \Delta t k$$

Поэтому она принадлежит к семейству схем Рунге-Кутты и однозначно определяется таблицей Бутчера

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

Пример 1.9. Схема средней точки

$$\hat{x} = x + f\left(\frac{\hat{x} + x}{2}\right) \Delta t$$

может быть записана в виде

$$k = f\left(x + \frac{k}{2}\right),$$

$$\hat{x} = x + \Delta t k$$

Поэтому она принадлежит к семейству схем Рунге-Кутты и однозначно определяется таблицей Бутчера

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

Самой затратной операцией при применении метода Рунге-Кутты является решение системы алгебраических уравнений относительно наклонов. Если эта система алгебраических является линейной относительно наклонов, то эта трудность отпадает. Более того, в случае нелинейной системы дифференциальных уравнений для этого необходимо и достаточно выполнения условия

$$a_{ij} = 0, \quad i \leq j.$$

Схему, таблица Бутчера удовлетворяет этому условию, называют явной схемой Рунге-Кутты (explicit Runge-Kutta scheme, erk). На каждом шаге расчетов по явной схеме наклоны вычисляют по явным формулам:

$$\vec{k}_1 = \vec{f}(\vec{x}),$$

$$\vec{k}_2 = \vec{f}\left(\vec{x} + a_{21}\vec{k}_1 dt\right),$$

$$\dots$$

а по ним рассчитывают следующее значение \hat{x} опять же по явной формуле (1.16). В противном случае схему называют неявной (implicit Runge-Kutta scheme, irk).

Для работы с таблицами Бутчера в пакете `fdm` создан отдельный класс — `Butcher_tableau`, написанный М.Д. Малых и Л. Гонсалесом [25]. Для задания таблицы нужно указать порядок аппроксимации и саму таблицу в виде списка, первым элементом которой будет матрица a , а вторым — столбец b . Столбец c вычисляется по этим данным.

Коэффициенты таблиц Бутчера нельзя брать произвольными, они должны обеспечивать аппроксимацию произвольной динамической системы с некоторым порядком p . При этом, конечно, весьма желательно при заданном числе s иметь как можно больший порядок аппроксимации p .

Условия, выражающие, что s -стадийная схема имеет p -ый порядок аппроксимации, представляют собой систему алгебраических уравнений относительно элементов матрицы Бутчера. В наш пакет интегрирована функция `butcher_eqs(p, s)`, написанная Юй Ин [55], эта функция возвращает систему уравнений на элементы таблицы Бутчера по заданным порядку p и числу стадий s и опции `implicit`, которая может принимать два значения True/False. Напр., двустадийная явная таблица Бутчера имеет вид

$$\begin{array}{c|cc} c_0 & & \\ c_1 & a_{10} & \\ \hline & b_0 & b_1 \end{array}$$

Эта таблица задает разностную схему порядка $p = 2$, если ее коэффициенты удовлетворяют двум уравнениям, которые возвращает функция `butcher_eqs`:

```
| sage: butcher_eqs(2,2, implicit=False)
| [-b0 - b1 + 1, -2*a10*b1 + 1]
```

При этом остается некоторый произвол в выборе коэффициентов. Можно, напр., взять $a_{10} = 1$ и задать таблицу Бутчера следующим образом:

```
| sage: a10=1
| sage: b1 = 1/2/a10
| sage: b0=1-b1
| sage: B=Butcher_tableau(2, [[0,0],[a10,0]], [b0,b1])
```

Это дает таблицу

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

Многообразие всех явных таблиц Бутчера с двумя стадиями и порядком аппроксимации равным 2, представят собой линию в трехмерном аффинном пространстве, которое в [55] было предложено именовать многообразием Бутчера. При $p = 3$ получается уже несовместная система:

```
| sage: butcher_eqs(3,2, implicit=False)
| [-b0 - b1 + 1, -2*a10*b1 + 1, 1, -3*a10^2*b1 + 1]
```

Поэтому максимальный порядок, который могут иметь явные двухстадийные схемы, равен двум.

Реализация явного метода Рунге-Кутты в `fdm`, написанная Л. Гонсалесом [25], поддерживает работу с любыми явными таблицами Бутчера, для чего предусмотрена опция `tableau`. Напр., численное решение задачи (1.14) по явному методу Рунге-Кутты с построенной только-что таблицей Бутчера B следует использовать конструкцию:

```
sage: s2=erk(pr1,N=40, tableau=B)
```

Вопрос о том, как распорядиться оставшемся произволом в выборе элементов таблицы Бутчера, остается до сих пор нерешенным [50]. Любопытно заметить, что этим элементам можно придавать и комплексные значения, причем пакет `fdm` поддерживает работу и с такими таблицами Бутчера.

Пример 1.10. Положим $a_{10} = i$:

```
sage: a10=i
sage: b1 = 1/2/a10
sage: b0=1-b1
sage: Bi=Butcher_tableau(2, [[0,0], [a10,0]], [b0,b1])
```

Это дает таблицу

$$\begin{array}{c|cc} & i & i \\ \hline i & \frac{1}{2}i + 1 & -\frac{1}{2}i \end{array}$$

Для линейной задачи (1.14) результаты расчетов с вещественной таблицей B и мнимой B_i совпадают. Различие проявляется только в нелинейных задачах. Возьмем для примера осциллятор Якоби (пример 1.5) на отрезке $0 < t < 10$ и сравним результаты при $t = 10$:

```
sage: var("p,q,r,t")
sage: k=1/2
sage: pr2=Initial_problem([p,q,r], [q*r,-p*r,-k^2*p*q],
5 sage: erk(pr2, N=200, tableau=B, field=CC).list()[-1]
[10, 0.110646443410733, -0.993981036268121,
0.998488526720930]
sage: erk(pr2, N=200, tableau=Bi, field=CC).list()[-1]
10 [10,
0.111457845209401 - 0.000811190390574542*I,
-0.993887908064835 - 0.0000938446416060465*I,
0.998463284419687 + 0.0000254707261498003*I]
```

Видно, что мнимая добавка характеризует ошибку численного метода, но ошибку, обусловленную нелинейностью задачи.

Первые программы для решения систем уравнений для определения элементов таблицы Бутчера появились в 2000-х годах, чаще всего для этого использовали систему компьютерной алгебры Maple [56—60]. Большая коллекция таблиц Бутчера до 12 порядка аппроксимации была собрана П. Стоуном [61], который производил вычисления в системе Maple. Вычислять с нуля каждый раз таблицы Бутчера большого порядка весьма неразумно, поэтому в `fdm` имеется коллекция таблиц Бутчера, реализованная пока в виде списка `butchers_list`, который задан в файле `butchers_list.sage`. Эта коллекция в существенном основана на коллекции Стоуна.

1.5 Разностные схемы и алгебраические интегралы

Динамическая система, как правило, обладают несколькими алгебраическими интегралами движения, выражающими фундаментальные законы природы, и первым из них следует назвать закон сохранения энергии. Разностные схемы являются чисто алгебраической конструкцией, поэтому вполне возможно, что они тоже допускают алгебраические законы сохранения. Именно по этой причине важны именно алгебраические интегралы движения, а не трансцендентные. Вслед за [15] и по аналогии с определением 1.4 примем следующее.

Определение 1. Говорят, что разностная схема сохраняет выражение

$$g(x_1, \dots, x_n),$$

если из алгебраических уравнений, задающих эту разностную схему, следует, что

$$g(\hat{x}) = g(x).$$

Это определение означает, что на любом решении $x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)}, \dots$, найденном по рассматриваемой схеме, выражение

$$g(x^{(n)})$$

не зависит от n .

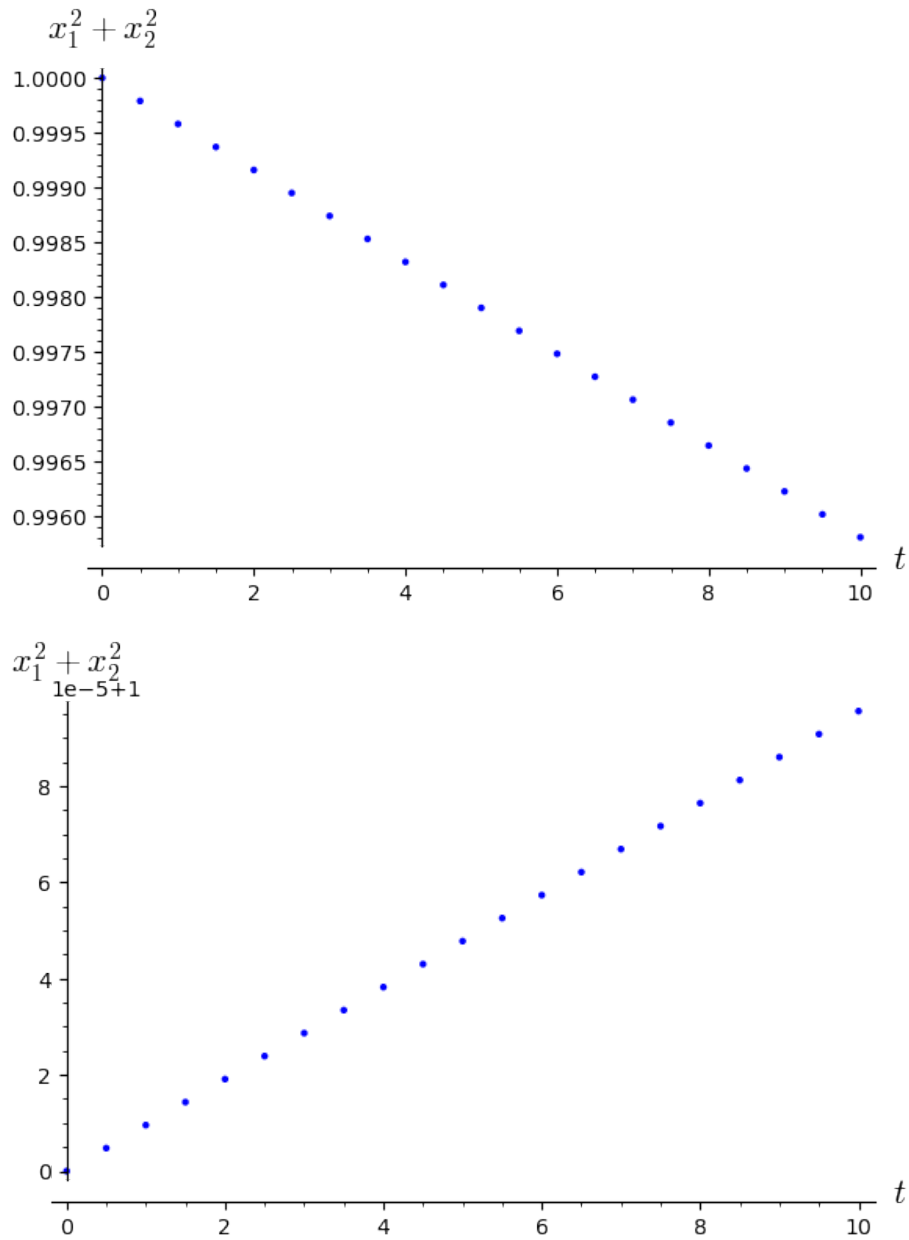


Рисунок 1.2 — Графики изменения $x_1^2 + x_2^2$ на приближенном решении задачи (1.14), найденном по стандартной схеме Рунге-Кутты 4-го порядка (сверху) и по схеме 6 порядка (снизу)

Явные разностные схемы Рунге-Кутты сохраняют линейные интегралы движения, но не сохраняют квадратичные. Более того, обычно интегралы движения на явных схемах Рунге-Кутты меняются монотонным образом.

Пример 1.11. Начальная задача (1.14) обладает алгебраическим интегралом

$$x_1^2 + x_2^2 = 1.$$

На рис. (1.2) показано, что величина $x_1^2 + x_2^2$ растет при использовании стандартной схемы Рунге-Кутты 4-го порядка, то есть 4-х стадийной схемы с таблицей

$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$		
1			1	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$

и убывает с заметно меньшим наклоном при использовании схемы Рунге-Кутты 6-го порядка с таблицей Бутчера

$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$						
$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{4}{9}$					
$\frac{1}{3}$	$\frac{7}{36}$	$\frac{2}{9}$	$-\frac{1}{12}$				
$\frac{5}{6}$	$-\frac{35}{144}$	$-\frac{55}{36}$	$\frac{35}{48}$	$\frac{15}{8}$			
$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{360}$	$-\frac{11}{36}$	$-\frac{1}{8}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{10}$		
1	$-\frac{41}{260}$	$\frac{22}{13}$	$\frac{43}{156}$	$-\frac{118}{39}$	$\frac{32}{195}$	$\frac{80}{39}$	
	$\frac{13}{200}$		$\frac{11}{40}$	$\frac{11}{40}$	$\frac{4}{25}$	$\frac{4}{25}$	$\frac{13}{200}$

Составить какую-нибудь разностную схему, сохраняющую заданный интеграл движения $g(x) = \text{const}$, не составляет никакого труда. В самом деле, заменим в схеме Эйлера для системы (1.1)

$$\hat{x}_i = x_i + f_i(x)\Delta t, \quad i = 1, \dots, n$$

последнее уравнение на

$$g(\hat{x}) = g(x).$$

В результате мы получим разностную схему

$$\begin{cases} \hat{x}_i = x_i + f_i(x)\Delta t, & i = 1, \dots, n-1 \\ g(\hat{x}) = g(x), \end{cases} \quad (1.17)$$

которая сохраняет заданный интеграл движения. На основе теоремы о неявной функции в диссертации Юй Ин [15] было показано, что эта схема аппроксимирует исходную динамическую систему.

Сходный подход был использован в [62] для построения разностных схем, аппроксимирующих гамильтонову систему

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, n,$$

и сохраняющую интеграл энергии

$$H(p, q) = \text{const.}$$

Именно, в [62] была предложено заменить дифференциальное уравнение разностным

$$\frac{\hat{q}_i - q_i}{\Delta t} = \frac{H(\hat{p}, q) - H(p, q)}{\hat{p}_i - p_i}, \quad \frac{\hat{p}_i - p_i}{\Delta t} = \frac{H(\hat{p}, q) - H(\hat{p}, \hat{q})}{\hat{q}_i - q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (1.18)$$

Если умножить первое уравнение на Δp_i , а второе — на Δq_i , то мы получим сохранение энергии

$$H(p, q) = H(\hat{p}, \hat{q})$$

как следствие уравнений схемы уравнение. Этим путем в [62] удастся конструировать консервативные схемы высокого порядка аппроксимации.

Однако сохранение одного выделенного интеграла движения не является самоцелью. Законы сохранения выражают фундаментальные законы природы, их нарушение при дискретизации задачи портит ее свойства.

При составлении схемы (1.17) предлагается нарушить все симметрии задачи ради сохранения интеграла g . Если исходная система состояла из нескольких идентичных частиц, то перестановка частиц была симметрией этой задачи. Схема Эйлера такого рода грубые симметрии сохраняет, но не модифицированная схема (1.17). Аналогичным образом, при составлении схемы (1.18) приходится выбрать асимметричный «шаблон» для аппроксимации частных производных гамильтониана. Таким образом, обе разностные схемы сохраняют заданный интеграл движения ценой нарушения наиболее очевидных свойств исходной динамической системы, а задача состоит не просто в построении консервативных разностных схем, но консервативных разностных схем, сохраняющих дискретные симметрии, включая t -симметрию.

1.6 Симплектические схемы Рунге-Кутты

Для системы с линейными и квадратичными интегралами конструировать консервативные схемы позволяет следующая теорема.

Теорема 1 (Купер [13], 1987). Схема Рунге-Кутты сохраняет все линейные интегралы движения динамической системы. Если коэффициенты a_{ij} и b_i ($i, j = 1, 2, \dots, s$) схемы Рунге-Кутты с s стадиями удовлетворяют уравнениям

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad i, j = 1, \dots, s. \quad (1.19)$$

она сохраняет и все квадратичные интегралы движения.

Замечание 1. Доказательство теоремы Купера в [14] проведено только для однородных квадратичных интегралов, однако без труда обобщается на неоднородные, напр, при помощи линейной замены.

Если коэффициенты таблицы Бутчера удовлетворяют (1.19), то соответствующий метод Рунге-Кутты называют симплектическим. Впервые такие методы были использованы для конструирования разностных схем, сохраняющих симплектическую структуру гамильтоновых систем [11; 12; 63–69]. Современное изложение предмета дано в [14; 70].

Отыскание элементов таблиц Бутчера с s стадиями, удовлетворяющих условиям (1.19) и гарантирующих аппроксимацию порядка p , сводится к решению систем нелинейных алгебраических уравнений, некоторые решения которой были найдены в 1990-х годах [14]. В Sage эта система была исследована Юй Ин [55].

Явных схем, удовлетворяющих условию (1.19), не существует. Неявные таблицы Бутчера с s стадиями, удовлетворяющие условию симплектичности (1.19) и имеющие порядок аппроксимации p образуют в аффинном пространстве некоторое многообразие, которое мы вслед за Юй Ин будем называть симплектическим многообразием Бутчера $S(s, p)$. При перестановке наклонов k_i неявная схема переходит в другую неявную схему, имеющую те же свойства (порядок аппроксимации, сохранение квадратичных интегралов). Поэтому рассматриваемая система уравнений на элементы Бутчера обладает дискретной симметрией, порожденной перестановками наклонов. Поэтому точки симплектического многообразия Бутчера можно разбить на системы по $s!$ точек в каждой. Точки, принадлежащие одной системе, дают различные таблицы Бутчера, но расчеты по

ним дают одно и то же численное решение. Поэтому такие таблицы не следует различать.

В Sage многообразия Бутчера $S(s,p)$ с максимально возможным p порядком при фиксированном числе стадий s были найдены Юй Ин чисто аналитическим путем при помощи стандартной функции `variety` при $s = 1,2,3$ [55]. Оказалось, что максимальный достижимый порядок равен $2s$, а само многообразие $S(s,2s)$ имеет размерность 0 и состоит из $s!$ точек, что дает в точности один симплектический метод с s стадиями максимального порядка.

Функция, написанная Юй Ин, интегрирована в наш пакет `fdm`. Функция `symplectic_tableau(s)` возвращает все симплектические таблицы Бутчера с s стадиями и с порядком аппроксимации $2s$. В теории она может решить задачу при всех s , но за разумное время она дает результаты при $s = 1,2,3$. При $s = 1$ она дает

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

Поэтому схема средней точки — простейший симплектический метод. При $s = 2$ получается две таблицы

$$\begin{array}{c|cc} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{3}} + \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{3}} + \frac{1}{4} \\ -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{3}} + \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{3}} + \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

и

$$\begin{array}{c|cc} -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{3}} + \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{3}} + \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{3}} + \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{3}} + \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

Первая из них соответствует т.н. методу Гаусса-Лежандра с 2 стадиями, вторая получается из нее очевидной перестановкой. При $s = 3$ получается 6 матриц, из которых первая

$$\begin{array}{c|ccc} -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{5}} + \frac{1}{2} & \frac{5}{36} & -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{15}} + \frac{5}{36} & -\sqrt{\frac{1}{15}} + \frac{2}{9} \\ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{5}} + \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{15}} + \frac{5}{36} & \frac{5}{36} & \sqrt{\frac{1}{15}} + \frac{2}{9} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{8} \sqrt{\frac{5}{3}} + \frac{5}{36} & -\frac{1}{8} \sqrt{\frac{5}{3}} + \frac{5}{36} & \frac{2}{9} \\ \hline & \frac{5}{18} & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} \end{array}$$

соответствует т.н. методу Гаусса-Лежандра с 3 стадиями. Таким образом, при малом числе стадий симплектическими схемами будут только схемы Гаусса-Лежандра, что было отмечено в [14]. Впервые эти схемы были выписаны Бутчером без какой-либо связи с условием (1.19), но в Sage их без труда и особой затраты времени можно вычислить прямо.

Существуют симплектические схемы с большим числом стадий, которые отличаются от схем Гаусса-Лежандра. Для их отыскания делают некоторые упрощающие предположения об устройстве искомой таблицы Бутчера с тем, чтобы уменьшить число неизвестных. Напр., этим путем была найдена 9-ти стадийная схема 6-го порядка в [71]. Разумеется, никто не утверждает, что так полученные таблицы имеют максимальный порядок.

Ключевой проблемой применения симплектических схем на практике является их неявность, которую можно преодолеть как численными, так и численно-аналитическими методами [55]. Очевидно, что ошибки в решении нелинейной системы алгебраических уравнений, описывающих один шаг в схеме, могут полностью нивелировать все преимущества предложенной схемы [72].

Избавиться от этой нелинейности путем выбора другой разностной схемы едва ли возможно. Дело в том, что консервативные разностные схемы для нелинейных задач, в том числе и схема средней точки почти всегда оказываются неявными. Это связано с геометрическими препятствиями на пути существования бирациональных отображений, описывающих шаги разностной схемы [73].

1.7 Миметические разностные схемы

В прошлом веке при проектировании разностных схем основное внимание уделяли близости точных и приближенных решений. Заманчивая возможность «определить характер динамического процесса с использованием только грубых вычислений с большим шагом сетки» по симплектической схеме была отмечена в [74]. Тем не менее, вопрос о сохранении качественных свойств точного решения остается недостаточно изученным.

Исторически первым рассматривался не вопрос о сохранении алгебраических интегралов, а вопрос о сохранении симплектической структуры гамильтоновых динамических систем. Из общих соображений можно было бы ожидать,

что сохранение симплектической структуры должно иметь следствием сохранение не только квадратичных, но и вообще всех алгебраических интегралов, или, во всяком случае, сохранение интеграла энергии, который далеко не всегда является квадратичным. Однако против такого обобщения теоремы Купера было предложено несколько контрпримеров [14], ниже мы убедимся в несохранении энергии и на конкретных примерах.

Тем не менее, некоторые примеры позволяют надеяться на то, что некоторые качественные и некоторые алгебраические свойства точных решения наследуются приближенными решениями, найденными по симплектическим схемам. Так простейшая схема из этого семейства — схема средней точки (пример 1.7). Эта схема не только сохраняет все квадратичные интегралы движения, но и симметрична относительно обращения времени и — в многочастичных задачах — относительно перестановок тел. В задачах о колебании маятников и вращении гироскопов все интегралы — квадратичные, поэтому эта схема позволяет провести дискретизацию, которая сохраняет все интегралы движения. В [75] рассматривались приближенные решения, найденные по этой схеме с постоянным шагом Δt . Эти решения наследуют важнейшие качественные свойства точного решения. Так для гармонического осциллятора для любого целого числа N можно подобрать шаг Δt так, что приближенное решение становится периодической последовательностью точек с периодом в N точек. Таким образом, приближенное решение имеет период Ndt , который, конечно, при $N \rightarrow \infty$ стремится к периоду точного решения. На фазовой плоскости вместо окружностей получаются правильные N -угольники. Сказанное, по крайней мере отчасти удастся распространить и на эллиптического осциллятора, и на систему гармонических осцилляторов.

В теории дифференциальных уравнений в частных производных дискретизации, наследующие некоторые свойства дифференциальных уравнений, называются миметическими (mimetic), то есть подражающими [76—79]. Поэтому представляется целесообразным рассматривать изучение консервативных разностных схем в контексте более общего и более важного вопроса о разработке миметических разностных схем для динамических систем, разумеется, уточняя саму концепцию подражания.

Заключение

Подводя итог краткому обзору численных методов, развитию которых посвящена настоящая диссертационная работа, заметим, что в центре нашего внимания связь между численными и символьными методами интегрирования динамических систем. В прошлые века отыскание алгебраических интегралов движения мыслилось как первый шаг к сведению динамических систем к квадратурам. Теперь известно, что это удастся сделать лишь в исключительно простых случаях. Тем не менее, разностные схемы, будучи системой алгебраических уравнений, вполне могут наследовать алгебраические интегралы движения. Для проектирования таких схем можно и нужно использовать системы компьютерной алгебры, а поэтому нужна интеграция символьных и численных методов решения алгебраических и дифференциальных уравнений, которую, на наш взгляд, удобно осуществить, например, в системе компьютерной алгебры Sage. Программы, написанные в рамках настоящего диссертационного исследования, так и в нескольких других исследованиях, выполненных на каф. ПИ и ТВ РУДН, объединены в пакет `fdm for Sage`, базовые функции которого были описаны в этой главе.

Изложенное подводит нас к нескольким проблемам: 1.) получение оценок точности приближенных решений и идентификации подвижных особых точек, эти оценки необходимы для верификации разрабатываемых методов, 2.) реализация неявного метода Рунге-Кутты в `fdm`, 3.) разработка методов конструирования схем, сохраняющих все, в т.ч. неквадратичные интегралы движения.

Глава 2. О методе Рунге-Кутты

2.1 Введение

В работах Рунге для оценок ошибок, возникающих при вычислении определенных интегралов по методу конечных разностей, было предложено сгущать сетку, а в работах Рунге схожий прием был применен к исследованию обыкновенных дифференциальных уравнений. Этот подход был систематически разработан в работах Н.Н. Кутты и его учеников [4—7] и будет далее называться методом Рунге, хотя, учитывая роль Кутты в его разработке, более правильным будет называть его методом Рунге-Кутты.

Сам метод — очень общий и универсальный, поэтому мы задались целью изложить его в общем виде, оторвав от конкретной реализации метода конечных разностей. Однако скоро стало ясно, что этот метод можно распространить и на методы, которые не являются конечно разностными, напр., на метод последовательных приближений, и даже на задачи, которые не связаны с дифференциальными уравнениями.

На наш взгляд, этот метод особенно просто описывается для одного класса задач механики и математической физики, когда приходится рассчитывать значительное число вспомогательных величин, хотя интересно лишь одно какое-то значение какой-то их комбинации.

Пример 2.1. На отрезке $[0, T]$ рассматривается динамическая система

$$\frac{dx}{dt} = f(x, y, t), \quad \frac{dy}{dt} = g(x, y, t),$$

с начальными условиями

$$x(0) = x_0, \quad y(0) = y_0.$$

Требуется найти значение выражения $x + y$ в точке $t = T$. Чтобы найти это значение численно, нам придется вычислить приближенно x и y на всем отрезке, чтобы потом сложить конечные значения.

Пример 2.2. Рассматривается задача многих тел, скажем, Солнечная система, и требуется выяснить, разлетается ли тела через 10 тысяч лет, или нет. Для ее решения достаточно вычислить сумму квадратов расстояний между телами и центром

масс системы через 10 тыс. лет. При этом координаты и скорости самих тел ровно через 10 тыс. лет никому не интересны.

Пример 2.3. Пусть K — единичный круг на плоскости. Найти первое собственное значение задачи

$$\Delta v + \lambda v = 0, \quad v|_{\partial K} = 0$$

Здесь в качестве искомого выступает собственное значение λ_1 . Мы не можем найти его численно, не найдя собственную функцию или корни определителя, то есть другие собственные значения.

Все эти задачи объединяет одно свойство: результатом решения является вещественное число u . Для решения такого рода задач применяются разнообразные численные методы. Для обоснования этих методов оценивают ошибки, которые совершаются в промежуточных выкладках при вычислении вспомогательных параметров, а потом их суммируют. Полученные таким путем априорные оценки ошибок оказываются огромными. Однако во многих случаях реальная ситуация много лучше, чем полученные таким путем прогнозы. На примере 2.1 это можно объяснить так: обычно допущенные при вычислении x и y ошибки имеют разные знаки и поэтому их вклады в выражение $x + y$ сокращаются. Оценив же ошибку в вычислении величины $x + y$ как сумму модулей ошибок в определении x и y , мы неизбежно и значительно завышаем оценку ошибки.

Не лишним будет заметить, что задачи, решение которых является просто вещественное число, рассматриваются в топологии \mathbb{R} . Это означает, что численное решение должно быть числом, которое близко к точному решению в этой топологии. Однако топология пространства, в котором принимают значения вспомогательные переменные не задана. Обычно численные методы строят так, чтобы эти вспомогательные переменные были найдены с большой точностью относительно какой-нибудь евклидовой нормы. Напр., чтобы найти $x + y$ в момент времени T , нужно найти приближение к паре функций $x(t), y(t)$ относительно нормы

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \sqrt{|x(t)|^2 + |y(t)|^2}.$$

В рассматриваемой ситуации такие требования излишне жесткими.

В настоящей работе мы опишем методику получения оценок ошибок, совершаемых при решениях задач этого класса в общем виде на основе метода Ричардсона-Калиткина [4], абстрагируясь от численного метода. На наш

взгляд такой подход позволяет хорошо увидеть основные идеи метода Калиткина, которые обычно оказываются спрятанными за подробностями используемых численных методов. Полвека применения метода Ричардсона-Калиткина на практике показало, что корректное применение метода Ричардсона-Калиткина требует вычисления не двух, а значительного большего числа приближенных решений для проверки гипотезы о преобладании главного члена в ошибке (см. ниже раздел 2.4). Мы обсудим одну возможную модификацию метода для одновременное использование всех этих решений для оценивая решения и ошибки, следуя в существенном [80].

2.2 Основные определения

Пусть дана задача \mathcal{P} , результатом решения которой является вещественное число u . Не будем конкретизировать эту задачу, пусть известно лишь, что эта задача корректна по Адамару, то есть имеет и притом единственное решение.

Не станем мы и конкретизировать численный метод решения этой задачи. Применение любого численного метода ее решения означает замену задачи \mathcal{P} другой корректной задачей \mathcal{P}_h , результатом решения которой является отображение $u_h : H \rightarrow \mathbb{R}$. Интерпретация множества H существенно зависит от используемого численного метода. В некоторых случаях представляет собой отрезок $(0, \infty)$, а в других образовано положительными рациональными числами. Напр., для метода конечных разностей это множество образовано допустимыми длинами шагов. Для дальнейшего это не важно, а важно, чтобы множество H было подмножеством вещественной прямой и чтобы 0 был предельной точкой для множества H .

По аналогии с обычными соглашениями, примем след.

Определение 2. Пусть $u_h : H \rightarrow \mathbb{R}$ — решение задачи \mathcal{P}_h . Если

$$\lim_{h \rightarrow 0} u_h = u,$$

то будем говорить, что задача \mathcal{P}_h аппроксимирует задачу \mathcal{P} . Если

$$u_h = u + \mathcal{O}(h^k),$$

то будем говорить, что порядок аппроксимации задачи \mathcal{P} задачей \mathcal{P}_h равен k .

В подавляющем большинстве случаев величина h имеет смысл шага дискретизации исходной задачи, а порядок k известен. Приведем несколько примеров.

Пример 2.4. Пусть задача \mathcal{P} состоит в отыскании значения интеграла

$$u = \int_{x=0}^1 \frac{dx}{1+x^2}.$$

Ее решение — число $u = \pi/4$, которое не известно нам точно. Для его вычисления разрежем отрезок $[0,1]$ на $N \in \mathbb{N}$ частей. Примем, что H образовано всевозможными числами, обратными к натуральным. Пусть u_h отображает это множество в \mathbb{R} , сопоставляя $h = \frac{1}{N}$ число

$$\sum_{n=0}^N \frac{h}{1+(nh)^2}.$$

Тогда

$$u_h = \frac{\pi}{4} + \mathcal{O}(h),$$

то есть порядок аппроксимации задачей, полученной по схеме Эйлера, равен 1.

Пример 2.5. Пусть задача \mathcal{P} состоит в отыскании значения $u = x(T)$ решения задачи Коши

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t), \quad x(0) = x_0$$

на отрезке $[0,T]$. Для ее решения можно использовать явную схему Эйлера. Разрежем отрезок $[0,T]$ на $N \in \mathbb{N}$ частей и примем $h = \frac{T}{N}$. Поставим этому числу в соответствие число $u_h = x_N$, которое вычисляется по рекуррентным формулам

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n, nh)h, \quad n = 0, \dots, N-1.$$

При этом, можно доказать априорную оценку для ошибки [50]:

$$|u - u_h| = |x(T) - x_N| \leq Ce^{aT}h,$$

где C, a — некоторые константы, зависящие только от f и начальных данных x_0 , но не от h и T . Отсюда сразу следует, что

$$u_h = x(T) + \mathcal{O}(h),$$

то есть порядок аппроксимации задачей, полученной по схеме Эйлера, равен 1.

В основном далее будет применяться метод конечных разностей, но это совершенно не обязательно.

Пример 2.6. Для вычисления $u = x(T)$ из примера 2.5 можно использовать метод последовательных итераций (метод Пикара). Пусть $N \in \mathbb{N}$ — число итераций, примем $h = \frac{1}{N}$ и поставим этому числу в соответствие число u_h , которое вычисляется следующим образом. Сначала вычисляется N функций по рекуррентным формулам

$$x_{n+1}(t) = \int_{\tau=0}^t f(x_n(\tau), \tau) d\tau, \quad n = 0, \dots, N-1,$$

а потом $u_h = x_N(T)$.

Задача \mathcal{P}_h должна быть проще исходной в том смысле, что имеется возможность вычислять значения отображения $u_h : H \rightarrow \mathbb{R}$ во всех точках H . На практике эта возможность ограничена как ростом трудоемкости вычислений при приближении к $h = 0$, так и увеличением роли ошибки округления.

Определение 3. Значение функции u_h в любой точке множества H будем называть приближенным решением задачи \mathcal{P} , а модуль разности между этим значением и решением задачи \mathcal{P} — ошибкой, совершенной при решении задачи \mathcal{P} по методу \mathcal{P}_h .

2.3 Апостериорные оценки ошибок

Метод Ричардсона-Калиткина можно отделить от метода конечных разностей, приняв следующее определение.

Определение 4. Пусть $u_h : H \rightarrow \mathbb{R}$ — решение задачи \mathcal{P}_h . Если существует такая константа $c \neq 0$, что

$$u_h = u + ch^k + \mathcal{O}(h^{k+1}),$$

то будем говорить, что ch^k — главный член ошибки аппроксимации задачи \mathcal{P} задачей \mathcal{P}_h .

Замечание 2. На практике обычно предполагают, что из оценки

$$u_h = u + \mathcal{O}(h^k),$$

следует существование константы c , такой что

$$u_h = u + ch^k + \mathcal{O}(h^{k+1}).$$

Как правило это можно обосновать. Но в определении 4 особо оговорено, что $c \neq 0$. Если же $c = 0$, то говорят о суперсходимости метода, ведь порядок аппроксимации оказывается больше предсказанного в теории. О при применении метода Ричардсона-Калиткина в случае суперсходимости см. ниже пример 2.15.

Суть метода Ричардсона-Калиткина сводится к следующему. Если отбросить $\mathcal{O}(h^{k+1})$, то

$$u_h = u + ch^k.$$

Величины u и c нам не известны, но зато мы можем вычислить u_h при любом значении h . Взяв два таких значения, скажем h_1 и h_2 , мы имеем систему двух линейных уравнений

$$u_h(h_1) = u + ch_1^k, \quad u_h(h_2) = u + ch_2^k,$$

разрешив которую относительно u и c , мы найдем некоторые оценки для этих величин. Мы говорим об оценках, а не о значениях, поскольку они получены путем отбрасывания $\mathcal{O}(h^{k+1})$.

Определение 5. Пусть $u_h : H \rightarrow \mathbb{R}$ — решение задачи \mathcal{P}_h и существует такая константа $c \neq 0$, что

$$u_h = u + ch^k + \mathcal{O}(h^{k+1}),$$

Для любых двух $h_1, h_2 \in H$ решение системы

$$u_h(h_1) = u + ch_1^k, \quad u_h(h_2) = u + ch_2^k$$

относительно u и c будем называть оценкой по Ричардсону-Калиткину для решения u задачи \mathcal{P} и коэффициента c при главном члене ошибки аппроксимации. Будем обозначать эти оценки как $\tilde{u}(h_1, h_2)$ и $\tilde{c}(h_1, h_2)$, мы будем ниже часто опускать указание на их зависимость от h_1, h_2 , если это не будет вносить неясности в изложении.

Пример 2.7. Рассмотрим начальную задачу

$$\dot{x} = -y, \quad \dot{y} = x, \quad x(0) = 1, \quad y(0) = 0$$

и пусть требуется найти $u = x(1)$. Аппроксимируем ее по явной схеме Эйлера и вычислим приближенное решение при $h_1 = 0.1$ и $h_2 = 0.01$:

$$u_h(h_1) = 0.5707904499, \quad u_h(h_2) = 0.543038634332351.$$

Решение системы

$$u_h(h_1) = u + ch_1, \quad u_h(h_2) = u + ch_2$$

дает оценку

$$\tilde{u} = 0.539955099269280$$

для

$$u = \cos 1 = 0.540302305868140,$$

и для коэффициента главного члена ошибки

$$\tilde{c} = 0.308353506307201.$$

Результат выглядит весьма разумным. При $h = 0.1$ мы имеем оценку для ошибки $\tilde{c}h = 0.0308$, в то время как сама ошибка равна 0.0304 . При $h = 0.01$ мы имеем оценку для ошибки $\tilde{c}h = 0.00308$, в то время как сама ошибка равна 0.0027 . Оценка для решения отличается от решения всего на $3.5 \cdot 10^{-4}$, что на порядок лучше результата при наименьшем шаге.

Оценки по Ричардсону можно выполнить и в задачах, для решения которых применяются другие численные методы, при этом для конкретных методов сами такие оценки хорошо известны, но под другими именами. Напр., таким способом оценивают ошибку при определении собственных значений по МКЭ [81].

Пример 2.8. Пусть требуется отыскать наименьшее собственное значение задачи

$$\Delta v + \lambda v = 0, \quad v|_{\partial K} = 0$$

в единичном круге K . Тогда в качестве ответа выступает число $u = \lambda_1$. Применим реализацию МКЭ в системе FreeFem++ [82], в качестве параметра h будет выступать величина $1/N$, где N — число точек, на которые делится окружность при

триангуляции. Тогда при использовании линейных элементов наименьшее собственное значение приближенной задачи

$$u_h = u + ch^2 + \mathcal{O}(h^3);$$

двусторонние оценки для ошибки были получены в канд. дисс. А.А. Панина [83; 84]. Возьмем на удачу $h_1 = 1/20$, а $h_2 = 1/100$, тогда

$$u_h(h_1) = 6.0173, \quad u_h(h_2) = 5.79292.$$

Решение системы

$$u_h(h_1) = u + ch_1^2, \quad u_h(h_2) = u + ch_2^2$$

дает оценку

$$\tilde{u} = 5.78357083333333$$

против точного значения

$$u = j_1^2 = 5.783185962946785,$$

а для коэффициента главного члена ошибки

$$\tilde{c} = 93.4916666666667.$$

Результат выглядит весьма разумным. При $h = 0.01$ мы имеем оценку для ошибки $\tilde{c}h^2 = 9.34 \cdot 10^{-3}$, в то время как сама ошибка равна $9.73 \cdot 10^{-3}$. Оценка для решения отличается от решения всего на $3.84 \cdot 10^{-4}$, что на порядок лучше результата при наименьшем h .

2.4 Обоснование метода Ричардсона-Калиткина

Обоснование метода Ричардсона-Калиткина состоит из двух частей:

1. во-первых, нужно доказать, что для используемого численного метода справедлива асимптотическая формула

$$u_h = u + ch^k + \mathcal{O}(h^{k+1}),$$

2. во-вторых, нужно обосновать возможность отбросить $\mathcal{O}(h^{k+1})$.

Первый шаг существенно зависит от используемого численного метода, напр., для метода Рунге-Кутты такую оценку нетрудно получить из оценок, приведенных в [49; 50]. Второй шаг, напротив, никак не связан с выбором численного метода. Рассмотрим его подробнее.

Чтобы можно было отбросить остаток $\mathcal{O}(h^{k+1})$, он должен быть существенно меньше главного члена ch^k . Для этого, прежде всего, должно быть $c \neq 0$, что было указано в определении 5. Далее рассматриваемые значения h должны быть достаточно малы. У нас нет никаких априорных данных для того, чтобы знать заранее насколько малые h мы должны взять. Наконец, на практике мы не можем брать h и слишком малыми, когда начинается сказываться ошибка округления при вычислении u_h .

Чтобы найти на практике подходящий интервал значений h , в работах Н.Н. Калиткина и его учеников [5—7] рекомендуется вычислить приближенные решения не при двух значениях h , а хотя бы при десятке значений, взятых во всем рассматриваемом диапазоне, и выделить в том диапазоне область значений шага, в которой с графической точностью ошибка является степенной функцией шага.

Мы «локализуем» эту рекомендацию следующим образом. Вычислим приближенные решения, постепенно уменьшая шаг, и обозначим соответствующие значения искомой величины u как u_1, \dots, u_N . Оценим ошибку

$$E(u) = u_n - u$$

как $u_n - u_N$ и построим по найденным точкам график зависимости ошибки $E(u)$ от h в двойном логарифмическом масштабе. Построенную линию будем называть диаграммой Ричардсона. В том диапазоне, где можно использовать оценку

$$E(u) = ch^k,$$

на графике должна получиться прямая с наклоном k . На практике же при слишком больших шагах этот график отличен от прямой из-за того, что отброшенное $\mathcal{O}(h^{k+1})$ все еще велико, а при слишком малых сказывается ошибка округления. Поэтому метод Ричардсона можно применять лишь в том диапазоне, где диаграмма Ричардсона является прямой с наклоном k .

Пример 2.9. Вернемся к примеру 2.7. Найдем приближенное решение по методу Рунге-Кутты 4-го порядка, взяв на отрезке $0 < t < 10$ $N = 2^n$ точек, $n = 0, 1, 2, \dots, 18$. На диаграмме Ричардсона 2.1 хорошо виден линейный участок

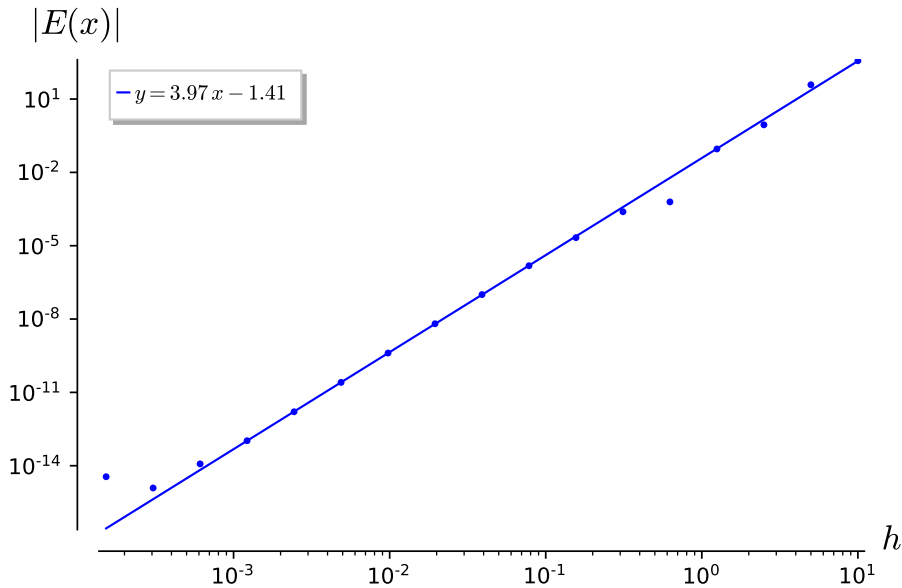


Рисунок 2.1 — Диаграмма Ричадсона для примера 2.9.

с наклоном, равным примерно 4, за которым следует горизонтальный участок, интерпретируемый как область, где ошибка округления мешает дальнейшему уточнению решения.

При таком подходе возникает несколько естественных вопросов. Во-первых, точки на прямую точно не ложатся никогда. Поэтому нужны количественные характеристики для участка, который мы будем считать прямым. Как их найти? Во-вторых, поскольку приближенные решения были найдены не при двух, а при многих значениях h , как их использовать для уточнения решения? В-третьих, в степенных рядах члены не обязаны образовывать монотонную последовательность, поэтому при больших h главный член может быть существенно меньше следующего за ним члена. Можно ли учесть эту возможность явно?

2.5 Учет нескольких членов в разложении u_h по степеням h

Простейшие ответы на эти вопросы можно найти, если принять во внимание следующие члены в разложении u_h по степеням h . Итак, допустим, что u_h разлагается в степенной ряд

$$u_h = u + c_1 h^k + c_2 h^{k+1} + \dots \quad (2.1)$$

Если мы проделали вычисления при N различных значениях для h , скажем, при $h = h_1, \dots, h_N$, то мы имеем возможность оценить значение u и $N - 1$ коэффициентов, отбросив все члены, начиная с $c_N h^N$.

Определение 6. Пусть решение $u_h : H \rightarrow \mathbb{R}$ задачи \mathcal{P}_h разлагается в степенной ряд (2.1), причем среди c_1, \dots, c_{N-1} имеются отличные от нуля. Для любых N значений $h_1, \dots, h_N \in H$ решение системы

$$u_h(h_n) = u + c_1 h_1^k + \dots + c_{N-1} h_n^{N+k-1}, \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (2.2)$$

относительно u и c_1, \dots, c_{N-1} будем называть оценкой для решения u задачи \mathcal{P} и первых коэффициентов c по N приближенным решениям. Будем обозначать эти оценки как \tilde{u} и \tilde{c}_1, \dots .

В результате решение системы (2.2) мы имеем: 1.) оценку \tilde{u} для значения точного решения, 2.) оценку $\tilde{c}_1 h^k$ для ошибки, пригодную при достаточно малых h , и дополнительную информацию о том, на сколько малы те члены, которые не учитывают в методе Рунге-Кутты.

Разумеется, как и в прошлом разделе отбрасывание членов, порядок которых равен $N+k$ или больше него, требует выполнения некоторых условий. Однако эти условия заметно менее стеснительные. Во-первых, одновременное обращение в нуль нескольких коэффициентов разложения кажется невероятной. Во-вторых, мы можем рассматривать достаточно большие значения h , при которых следующие члены разложения все еще заметны.

2.6 Компьютерные эксперименты

В наших тестах мы брали $N = 4$ и на удачу $h_1 \in \mathbb{Q} \cap H$, а остальные h_2, h_3, h_4 получали делением h_1 на 2, 3 и 4. Чтобы не вносить дополнительные ошибки округления, система (2.2) решается точно над полем \mathbb{Q} .

Начнем с простейшего линейного примера.

Пример 2.10. Будем решать задачу из примера 2.7 по методу Рунге-Кутты 4-го порядка с равномерным шагом h . При шаге $h_1 = 0.1$ получаем

$$u_h(0.1) = 0.540302967116884$$

против

$$\cos 1 = 0.540302305868140 \dots,$$

то есть 6 верных знаков после запятой. Вычислив еще три приближенных решения, мы получим оценку для $u = \cos 1$ совпадает с точным значением до 13 знака (предпоследнего). Оценка для коэффициентов разложения (2.1) позволяет оценить ошибку при $h = 0.1$ как

$$u_h - u = 0.007 \cdot 10^{-4} - 0.011 \cdot 10^{-5} + \dots = 6 \cdot 10^{-7},$$

как это и должно быть. Небезынтересно сравнить интерполяционные многочлены, которые получаются при начальном шаге $\Delta t = 0.1$ и $\Delta t = 0.01$: оценка для $u = \cos 1$ совпадает с полученной ранее с точностью до последнего знака, c_1 различается в пятом знаке, c_2 различаются на порядок, а c_3 — на два порядка. Мы увеличивали число бит, отводимых на вещественное число, и убедились в том, что отмеченные эффекты не связаны с ошибкой округления.

В процессе экспериментов мы сталкивались с ситуациями, когда оценки для коэффициентов получаются чудовищно завышенными.

Пример 2.11. Рассмотрим ту же систему

$$\dot{x} = -y, \quad \dot{y} = x, \quad x(0) = 1, \quad y(0) = 0,$$

но пусть требуется найти $u = x(0.3)$. При первом шаге $h_1 = 10^{-4}$ мы получили огромную оценку $\tilde{c} = 5 \cdot 10^{13}$, при этом разброс оценок очень высок. Однако сама оценка для $\cos 0.3$ совпадает с точным значением с очень высокой точностью и без труда можно подобрать такие значения для начального шага, при которых оценки для коэффициентов выглядят вполне разумными.

Применение стандартного метода Рундосона-Калиткина ($N = 2$) ведет в этом примере к еще менее приятным результатам. Возьмем $h_1 = 0.1$ и $h_2 = 0.05$ и оценим u и c_1 по методу Рундосона-Калиткина. Тогда оценка для ошибки $u_h - u$ будет равна $\tilde{c}_1 0.1^4 = 10^{-10}$, что много меньше фактической ошибки $u_h(0.1) - \cos(0.1)$, равной $2 \cdot 10^{-2}$.

Простейшее объяснение этих эффектов состоит в том, что в ряду

$$u_h = \cos 0.3 + c_1 h^4 + c_2 h^5 + \dots$$

коэффициент c_1 очень мал, а вот коэффициент при какой-то большой степени h , напротив, очень велик. Из-за этого, во-первых, при небольших шагах порядка $h =$

0.01 мы уже имеем значение, совпадающее с точным, а, во-вторых, не работают наши оценки, которые основаны на предположении о возможности отбрасывания старших членов.

Рассмотрим теперь простейший нелинейный пример.

Пример 2.12. Пусть требуется найти $u = x(1)$ для решения начальной задачи Вольтерры-Лотки

$$\dot{x} = (1 - y)x, \quad \dot{y} = -(1 - x)y, \quad x(0) = 0.5, \quad y(0) = 2$$

на отрезке $0 < t < 1$. Будем решать эту задачу по явной схеме Рунге-Кутты 4-го порядка и оценим решение по четырем шагам, начиная с $h_1 = 0.1$. Для u получается оценка

$$u = 0.302408337777406,$$

а для ошибки

$$u_h(h) - u = -0.002 \cdot \Delta t^4 + 0.00001 \cdot \Delta t^5 + \dots$$

При наименьшем шаге мы имеем ошибку 10^{-9} , то есть можем рассчитывать более чем на 9 знаков после запятой. Начав с $h_1 = 0.01$ мы получим другую оценку, в которой \tilde{u} отличается от найденного ранее значения в двух последних цифрах, а \tilde{c}_1 — в четвертом знаке.

2.7 Обсуждение результатов экспериментов

Проделанные эксперименты, прежде всего, свидетельствуют, что предложенное обобщение метода Ричардсона-Калиткина позволяет при весьма скромном числе шагов получать оценку для точного решения, совпадающую с ним с точностью до ошибки округления. При этом вместо 1 вычисления мы делаем 4-ре независимые, что совершенно не расходует время, поскольку вычисления производятся параллельно.

Разной в определении коэффициентов при степенях h тем больше, чем больше сама степень. Это не трудно объяснить. Все формулы получены в предположении, типичном для разного рода теорем о среднем: для любого $s > n$

найдется такая константа M_s , что

$$\left\| x - c_0 - \sum_{i=1}^s c_i h^{n+i-1} \right\| \leq M_s h^{n+s+1}$$

При решении задачи интерполяции мы решаем задачу

$$c_0 + \sum_{i=1}^s c_i h_j^{n+i-1} = b_j + \xi_j h_j^{n+s+1},$$

где b_j — значения x при $h = h_j$, а ξ_j — неизвестные нам величины, о которых мы знаем, что $|\xi_j| \leq M_s$.

Пусть для простоты $s = 2$.

$$c_0 + c_1 h_1^n = b_1 + \xi_1 h_1^{n+1}$$

$$c_0 + c_1 h_2^n = b_2 + \xi_2 h_2^{n+1}$$

По формулам Крамера

$$c_0 = \frac{b_2 h_1^n - b_1 h_2^n}{h_1^n - h_2^n} - (h_1 h_2)^n \frac{h_1 \xi_1 - h_2 \xi_2}{h_1^n - h_2^n},$$

и

$$c_1 = \frac{b_1 - b_2}{h_1^n - h_2^n} + \frac{h_1^{n+1} \xi_1 - h_2^{n+1} \xi_2}{h_1^n - h_2^n}$$

При $h_1 = h, h_2 = h/2$ ошибка в c_0 будет порядка $O(h^{n+1})$, а в c_1 — только порядка $O(h)$. С ростом s расхождение порядков будет все более заметным.

Разумеется, главная проблема в том, что ни s , ни M_s мы не знаем. Пример, в котором проявилась суперсходимость, заставляет думать, что бывают случаи, когда s нельзя взять таким, каким хочется. Но в таком случае, проблема применимости описанного метода сводится к классической проблеме теории степенных рядов: сколько членов нужно взять в ряде, чтобы иметь заданную точность? Ответить на него не трудно, если известны рекуррентные формулы для коэффициентов, а не оценки для коэффициентов, которые становятся тем хуже, чем больше степень.

В теории отмеченное обстоятельство, очевидно, является большой проблемой. Однако, на самом деле, все проблемные случаи сразу проявлялись в виде неадекватно больших коэффициентов. Таким образом, как практический рецепт описанное обобщение кажется вполне полезным.

2.8 Инструменты для оценки ошибки в пакете `fdm`

В пакете `fdm` численные методы решения ОДУ реализованы как функции, возвращающие приближенное решение. Как отмечалось выше в разделе 1.3, приближенное решение представляет собой особый класс, среди атрибутов которого таблица значений приближенного решения и порядок аппроксимации.

Допустим, что требуется вычислить значение некоторого символьного выражения u в заданной точке $t = a$. Если это значение не попало в таблицу значений приближенного решения, выполняется интерполяция по формуле Тейлора, порядок которой согласован с порядком аппроксимации. Поэтому интерполяция не вносит ошибку в оценку

$$E(u) = c\Delta t^k + \mathcal{O}(h^{k+1})$$

и допустимо применение метода Рунге-Кутты.

Функция `richardson(ns1, ns2, u, a)` по двум численным решениям `ns1`, `ns2`, символьному выражению u и числовому значению a возвращает оценку для $u|_{t=a}$ и ошибку этой оценки, найденную по методу Рунге-Кутты.

Пример 2.13. Будем решать задачу из примера 2.7 по методу Рунге-Кутты 4-го порядка.

```
sage: var("x, y, t")
sage: pr1=Initial_problem([x, y], [-y, x], [1, 0], 10)
sage: ns1=erk(pr1, N=2^5)
sage: ns2=erk(pr1, N=2^6)
5 sage: richardson(ns1, ns2, x, 10)
[-0.839092904338988, -0.0000149427914721019]
```

Таким образом,

$$\cos 10 \simeq -0.839092904338988,$$

а ошибка оценивается по Рунге-Кутты как -0.0000149427914721019 . Это вполне приемлемо по порядку величины, поскольку

$$-0.839092904338988 - \cos 10 = -0.0000213752625355390.$$

Перед применением метода Рунге-Кутты следует построить диаграмму Рунге-Кутты, линейный участок этой диаграммы соответствует диапазону шагов, в котором применим метод Рунге-Кутты.

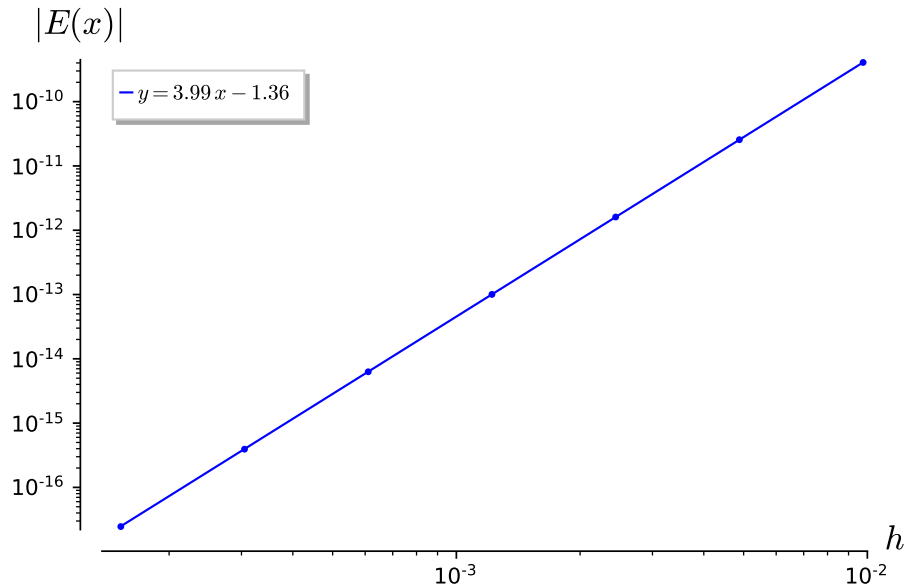


Рисунок 2.2 — Диаграмма Ричадсона для примера 2.14.

Для построения диаграммы Ричадсона служит функция `richardson_plot(L, u, a)`, которая по заданному списку L символьному выражению u и числовому значению a возвращает график зависимости ошибки $E(u|_{t=a})$ от шага в двойном логарифмическом масштабе. Для найденных точек этой зависимости по методу наименьших квадратов (МНК) определяется прямая, проходящая к этим точкам наиболее близко. Опции `nmin`, `nmax` позволяют исключить при применении МНК `nmin` первых точек списка и `nmax` последних точек списка.

Пример 2.14. В примере 2.9 диаграмма Ричадсона (рис. 2.1) была построена следующим образом.

```
sage: var("x, y, t")
sage: pr1=Initial_problem([x, y], [-y, x], [1, 0], 10)
sage: L=[erk(pr1, N=2^n) for n in range(18)]
sage: richardson_plot(L, x, 10, nmax=14, nmin=7)
```

По этой диаграмме 2.1 видно, что метод Ричадсона применим на интервале $\Delta t = 0.5$ до $\Delta t = 10^{-3}$, когда достигается ошибка округления 10^{-13} . Наклон прямой равен 4, как это и должно быть для метода 4-го порядка. При слишком больших шагах этот график отличен от прямой из-за того, что отброшенное $\mathcal{O}(h^5)$ все еще велико, а при слишком малых сказывается ошибка округления. В этом легко убедиться, если увеличить число битов, отведенных на десятичные дроби. В реализации методы Рунге-Кутты имеется опция `field`, которая позволяет работать в любом поле, которое можно задать в Sage. Напр., можно взять поле десятичных дробей с 300 битам, отведенными на одну дробь:

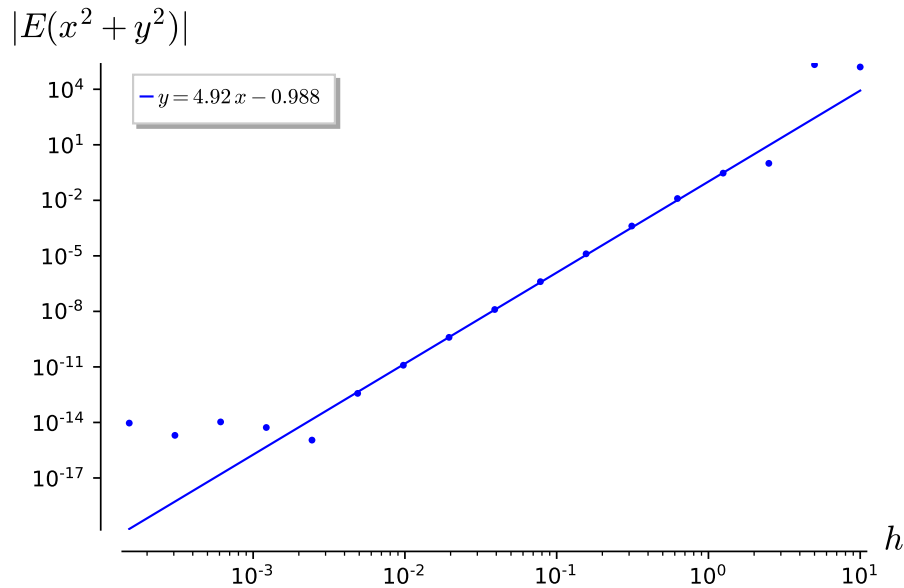


Рисунок 2.3 — Диаграмма Ричадсона для примера 2.15.

```
sage: L2=[erk(pr1, N=2^n, field=RealField(300))
for n in range(10,18)]
sage: richardson_plot(L2,x,10, nmax=4)
```

Результат представлен на рис. 2.2. Хорошо видно, что зависимость теперь стала линейной и при малых шагах.

Следует заметить, что для некоторых выражений u наклон может быть больше порядка аппроксимации. Это явление будем далее называть суперсходимостью.

Пример 2.15. Рассмотрим ту же начальную задачу, что и в предыдущем примере, но вычислим $u = x^2 + y^2$ при $t = 10$. Построим диаграмму Ричадсона для этого выражения:

```
sage: richardson_plot(L,x^2+y^2,10, nmax=14, nmin=5)
```

По этой диаграмме 2.3 видно, что наклон равен не 4, а 5. Это очевидно связано с тем, что в данном случае u является интегралом движения линейной системы.

2.9 Заключение

Метод Ричардсона-Калиткина мы описали как метод оценки численных методов решения любой корректной задачи \mathcal{P} , результатом решения которой яв-

ляется вещественное число u . При этом не важна предметная область этой задачи. Задать численный метод решения задачи \mathcal{P} — значит задать множество $H \subset \mathbb{R}$, для которого 0 является предельной точкой, и отображение $u_h : H \rightarrow \mathbb{R}$, значения которого имеет возможность вычислять конструктивно. Этот метод дает решение задачи \mathcal{P} , если

$$\lim_{h \rightarrow 0} u_h = u.$$

Если существуют такие $k \in \mathbb{N}$ и числа c_1, \dots, c_N , среди которых имеются отличные от нуля, что

$$u_h = u + ch^k + \dots c_N h^{k+N} + \mathcal{O}(h^{k+N+1}),$$

то по N значениям отображения u_h можно оценить точное решение исходной задачи и коэффициенты c_1, \dots, c_N , характеризующие ошибку численного метода. Примеры показывают, что эти оценки тем хуже, чем выше номер коэффициента, но в целом они достаточно точно характеризуют численный метод. Значения u_h вычисляются независимо, поэтому вычисление таких задача допускает естественное распараллеливание.

В нашем пакете `fdm for sage` мы ограничились классическим вариантом метода Рундсона-Калиткина, когда удерживается только главный член. У нас имеются две функции для оценки ошибки численных методов. Первая из них позволяет построить диаграмму Рундсона, по виду которой можно оценить диапазон изменения шага, в котором применим метод Рундсона-Калиткина, а вторая — найти значение заданного символьного выражения в заданной точке.

Глава 3. Организация вычислений по симплектическим схемам Рунге-Кутты

Симплектические схемы Рунге-Кутты, в том числе простейшая из них — схема средней точки (пример 1.7) — неявные, при вычислении приближенного решения по таким схемам на каждом шаге приходится решать систему алгебраических уравнений. Если задача — нелинейная, то эта система тоже нелинейная и для ее решения придется использовать тот или иной численный метод.

Избавиться от нелинейности путем выбора другой разностной схемы едва ли возможно. Дело в том, что консервативные разностные схемы для нелинейных задач, в том числе и схема средней точки почти всегда оказываются неявными. Это связано с геометрическими препятствиями на пути существования бирациональных отображений, описывающих шаги разностной схемы [73].

3.1 Итерационный алгоритм для выполнения одного шага по схеме средней точки

Для того, чтобы сделать шаг по схеме средней точки

$$\hat{x} - x = f\left(\frac{\hat{x} + x}{2}\right) \Delta t \quad (3.1)$$

необходимо решить эту систему уравнений относительно \hat{x} при заданном числовом значении x и Δt . Искомое решение по самому своему смыслу должно быть близко к x , поэтому вполне естественно использовать тот или иной итерационный метод решения систем нелинейных уравнений. Мы будем использовать метод простых итераций.

Согласно этому методу, начиная с $\hat{x}^{(0)} = x$ строят последовательность

$$\hat{x}^{(n+1)} = x + f\left(\frac{\hat{x}^{(n)} + x}{2}\right) dt, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2)$$

Если эта последовательность имеет предел \hat{x} , то он является корнем системы уравнений (3.1).

К сожалению, на практике весьма неудобно использовать оценки для $\|\hat{x}^{(n)} - \hat{x}\|$, поскольку они весьма громоздки, особенно, для систем уравнений с более

чем одной неизвестной. Вместо них мы будем использовать одно из двух условий окончания итераций:

1. счет оканчивается, если $|\hat{x}^{(n+1)} - \hat{x}^{(n)}|$ становится меньше некоторого заданного числа ε ,
2. счет оканчивается, если $|u(\hat{x}^{(n+1)}) - u(\hat{x}^{(n)})|$ становится меньше некоторого заданного числа ε , где u — изобарный интеграл движения или конечное множество таких интегралов.

Из общих соображений мы полагали, что первое условие будет приводить к излишне затратным вычислениям и поэтому проводили первые компьютерные эксперименты, используя второе. В конце концов, мы используем схему средней точки для того, чтобы сохранить интегралы движения, поэтому мы и будем следить не за малостью $|\hat{x}^{(n+1)} - \hat{x}^{(n)}|$, а за тем, чтобы приращение интегралов движения не покидало заданной границы. Однако в ряде случаев оказалось, что первое условие ничуть не более затратно. Напротив, проигрывая по эффективности в начале вычислений, оно дает преимущество далее. Поскольку первый подход больше соответствует тому, что в теории называется схемой средней точки, мы выбрали именно его для реализации в `fdm`.

Алгоритм 1 (шаг схемы средней точки). **Вход:** правые части уравнений f_1, \dots, f_n , начальные условия x_1, \dots, x_n , взятые в поле вещественных чисел \mathbb{R} , список квадратичных интегралов, шаг по времени dt , точность сохранения интегралов $\varepsilon > 0$.

Выход: значения $x = (x_1, \dots, x_n)$ в момент времени, отличный от начального на Δt .

Расчеты. Принять для начала

$$\hat{x} = x + f(x)dt$$

и

$$\hat{x}' = x + f\left(\frac{\hat{x} + x}{2}\right) dt.$$

До тех пор, пока

$$|\hat{x}' - \hat{x}| \geq \varepsilon,$$

вычислять:

$$\hat{x} = \hat{x}'$$

и

$$\hat{x}' = x + f\left(\frac{\hat{x} + x}{2}\right) \Delta t.$$

Количество шагов в описанном цикле будем называть числом итераций. Если метод последовательных приближений сходится, то алгоритм должен завершиться за конечное число действий.

Однако сказанное верно лишь при условии организации счета без ошибок округления, напр., в поле \mathbb{Q} , но не в реализации поля \mathbb{R} , которая представляет собой множество десятичных дробей с плавающей запятой, на хранение которых отведено фиксированное число бит. Поэтому в представленных ниже вычислениях мы ограничили число итераций числом $N = 10^3$.

Алгоритм 1 позволяет сделать шаг по разностной схеме, при котором интегралы движения из нашего списка меняются в пределах ошибки величины ε .

3.2 Адаптация шага

При проведении численных экспериментов мы часто сталкивались с расходимостью метода. Условие сходимости, как известно, сводится к тому, что

$$f\left(\frac{\hat{x}^{(n)} + x}{2}\right) dt$$

должно быть сжимающим отображением, то есть

$$\left\| f\left(\frac{x'' + x}{2}\right) dt - f\left(\frac{x' + x}{2}\right) \Delta t \right\| \leq q \Delta t \|x'' - x'\|,$$

где величина $q dt$, которая характеризует скорость сходимости, должна быть меньше 1. Отсюда ясно, что сходимость имеет место при достаточно малых шагах.

Прикинуть величину такого шага можно при помощи следующего нестроого размышления. В силу теоремы о среднем разность, стоящую справа можно оценить через норму градиента

$$\nabla_y f\left(\frac{y + x}{2}\right),$$

вычисленного в окрестности рассматриваемой точки $\hat{x} = x$. Мы не знаем размер этой окрестности, однако для первых опытов можем без обоснования заменить этот градиент на градиент, вычисленный в точке $y = x$. В таком случае,

$$q = \frac{1}{2} \|\nabla f\|.$$

Здесь градиент не что иное как матрица Якоби

$$J = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right).$$

Поэтому последовательность (3.2) сходится, если

$$dt < 2\|J\|^{-1}, \quad (3.3)$$

где используется спектральная норма для матрицы Якоби.

В задаче многих тел указанный Якобиан меняется в весьма широких пределах, поэтому при вычислении по схеме средней точки мы делаем шаг длины

$$\Delta t = \frac{h}{\|J(x)\|}, \quad (3.4)$$

где h — параметр, характеризующий малость шага. Иными словами, мы используем квазиравномерную сетку по времени и h — параметр, который мы используем при применении метода Рунге-Кутты вместо Δt .

3.3 Обобщение на случай произвольной симплектической схемы Рунге-Кутты

Предложенный алгоритм удалось без труда распространить на случай произвольного метода Рунге-Кутты. На каждом его шаге, нужно решить систему уравнений

$$\vec{k}_i = \vec{f} \left(\vec{x} + \Delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} \vec{k}_j \right), \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (3.5)$$

относительно наклонов k_1, \dots, k_s , то есть ns скалярных неизвестных. Метод простых итераций подразумевает, что в качестве первого приближения берут наклон

$$k_i^{(1)} = f(x), \quad (3.6)$$

а затем вычисляют следующие приближения рекуррентно:

$$\vec{k}_i^{(n+1)} = \vec{f} \left(\vec{x} + \Delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} \vec{k}_j^{(n)} \right), \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (3.7)$$

Вычисления будем проводить вплоть до того момента, пока не станет верно

$$|\vec{k}_i^{(n+1)} - \vec{k}_i^{(n)}| \leq \varepsilon$$

Исследовать сходимость метода представляется излишне трудной задачей. В наших экспериментах мы использовали тот же квазиравномерный шаг, что и в методе средней точки.

Описанный алгоритм реализован в пакете `fdm` в виде двух функций — `irk` и `irk_adaptive`, в первой используется постоянный шаг, во второй — адаптивный. В дальнейшем всюду используется вторая.

Единственным аргументом этой функции является начальная задача, описанная в стандартном для пакета `fdm` виде (см. раздел 1.4). Помимо него имеются следующие опции:

- `h` — адаптивный шаг, по умолчанию $h = 10^{-1}$,
- `eps` — параметр, характеризующий требуемую близость двух последовательных итераций, по умолчанию $\varepsilon = 10^{-10}$,
- `M` — максимальное число итераций, по умолчанию равно 10^2 , при его превышении расчеты останавливаются и выдается `'error: the simple iteration method does not converge'`,
- `tableau` — таблица Бутчера, записанная в стандартном для пакета `fdm` виде (см. раздел 1.4),
- `field` — поле, в котором ведутся вычисления, по умолчанию стандартная реализация \mathbb{R} в Sage,
- `v` — выводить прогресс вычислений, по умолчанию `False`, эта функция полезна в тех случаях, когда вычисления занимают много времени.

Функция возвращает численное решение начальной задачи в стандартном для пакета `fdm` виде (см. раздел 1.4).

Рассмотрим внутреннее устройство функции. В первых ее строках

```
[f, x, x0, T]=problem.list()
t0=0
ans=[[t0]+x0]
a=tableau.a(field=field)
5 b=tableau.b(field=field)
c=tableau.c(field=field)
s=tableau.number_of_stages()
```

извлекаются необходимые для дальнейшего

- список переменных x ,

- список f правых частей ОДУ, его элементами служат символьные выражения от x, t ,
- числа x_0, t_0, T из поля `field`, характеризующие начальную задачу и отрезок, на котором она рассматривается,
- списки a, b, c элементов таблицы Бутчера,
- число стадий s .

Здесь же создается список `ans` точек приближенного решения и в него записывается начальная точка. Затем в символьном виде вычисляется якобиан правой части

```
| jac=jacobian(f,x)
```

Следует особо подчеркнуть, что производные считаются один раз и в символьном виде, что отличает нашу реализацию от реализаций на чистом Python, разработчики которых не имели возможности выполнять дифференцирование без ошибок округления, часто весьма значительных.

Затем следует цикл по времени:

```
| while t0<T:
|     dt=field(h/jac.subs([t==t0]+[i==j for [i,j] \
|         zip(x,x0)]).norm())
|     k=[problem.subs(f,[t0]+x0) for i in range(s)]
5 |     delta = oo
|     i=0
|     while delta>eps:
|         (...)
|         t0=t0+dt
10 |     x0=[x0_ + sum([b_*k_ for [b_,k_] in zip(b,k_)])*dt \
|         for [x0_,k_] in zip(x0,zip(*k))]
|     ans.append([t0]+x0)
```

Здесь t_0 используется как текущее время, а x_0 — текущее значение для x . На каждом шаге вычисляется подходящий шаг Δt по формуле (3.4), причем используется найденное ранее символьное выражение для якобиана, и наклон \vec{k} по формуле (3.6) и определяются значения вспомогательных величин $i = 0$ и $\delta = \infty$. Решение системы нелинейных уравнений (3.5) реализовано в виде цикла `while delta>eps`. После чего делается шаг по времени и определяется новое значение для x_0 по формуле (1.16). Эти значения добавляются в список `ans` и так до тех пор, пока $t_0 < T$. По достижению этого значения возвращается численное решение начальной задачи.

Остается рассмотреть подробнее решение системы (3.5):

```
| while delta>eps:
```

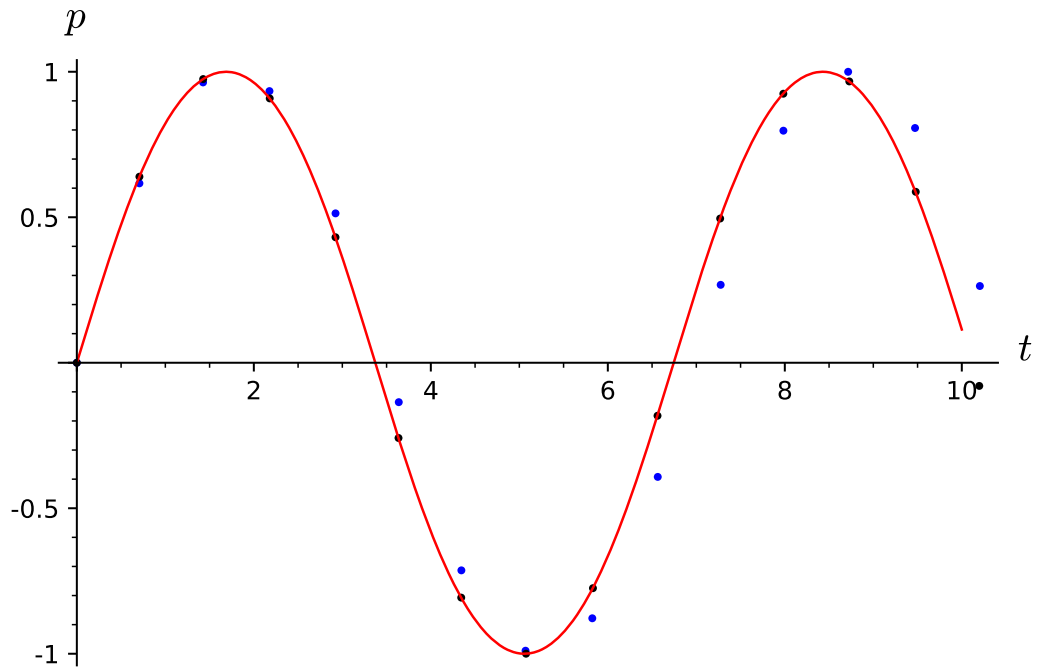



Рисунок 3.1 — Эллиптический синус при $k = 1/2$, найденные по схеме средней точки (синие точки) и по симплектической схеме 4-го порядка (черные точки) с адаптивным шагом $h = 1$ и по алгоритму, встроенному в Sage (сплошная линия).

```

kk = [problem.subs(f, [t0 + c[m]*dt] \
    + [x0_ + sum([a_*k_ for [a_, k_] in zip(a[m], k_)]])*dt \
    for [x0_, k_] in zip(x0, zip(*k))] for m in range(s)]
5 delta=(matrix(kk)-matrix(k)).norm()
if i>M:
    print('error: (...)')
    break
i=i+1
10 k=kk

```

Здесь в первой строке вычисляется следующая итерация по формуле (3.7), затем вычисляется норма разности предыдущей и следующей итераций, обозначенная как δ . Вычисления ведутся до тех пор, пока $\delta > \varepsilon$ и прерываются, если число итераций i превосходит M .

3.4 Тест: эллиптический осциллятор

В качестве теста рассмотрим осциллятор Якоби (пример 1.5). Система (1.6) при начальных условиях

$$p = 0, \quad q = r = 1 \text{ при } t = 0$$

имеет точное решение, которое дается эллиптическими функциями Якоби

$$p = \operatorname{sn}(t, k), \quad q = \operatorname{cn}(t, k), \quad r = \operatorname{dn}(t, k).$$

Численный алгоритм вычисления этих функций встроен в Sage, что дает нам возможность легко сравнить численное решение с точным. Для определенности возьмем $k = 1/2$ и будем опускать зависимость решения от этого параметра и рассмотрим начальную задачу на интервале $0 \leq t \leq 10$.

В нашем пакете `fdm` имеются одностадийная симплектическая схема, схема средней точки, 2-х и 3-х стадийные симплектические схемы, соответствующие методу Гаусса-Лежандра с 2 и 3 стадиями, они были указаны в разделе 1.6. Вычисления по этим трем схемам при $h = 1$ не срываются. Решение, найденное по схеме средней точки, заметно отличается от точного, а решение, найденное по двухстадийной схеме, напротив, совпадает с точным с графической точностью, см. рис. 3.1.

Как отмечалось в примере 1.5 система (1.6) имеет два квадратичных интеграла движения (1.7), которые в силу теоремы 1 должны сохраняться точно на численном решении, найденном по симплектической схеме Рунге-Кутты. Поскольку на каждом шаге мы решаем систему нелинейных алгебраических уравнений (3.5) по методу последовательных приближений, в нашей системе интегралы сохраняются не точно, но с ошибкой, величина которой зависит от выбора опции `eps`, в наших экспериментах равной 10^{-10} . Во всех наших экспериментах, даже в случае схемы средней точки, интегралы 1.7 сохраняются с точностью до 10^{-11} (см. рис. 3.2). Следует подчеркнуть, что в случае схемы средней точки графики приближенного и точного решений отличаются друг от друга весьма заметно, а интегралы движения все равно сохраняются с указанной точностью. Таким образом, сохранение интегралов движения не связана со сходимостью приближенного решения к точному, и является еще одним независимым свойством разнотонной схемы.

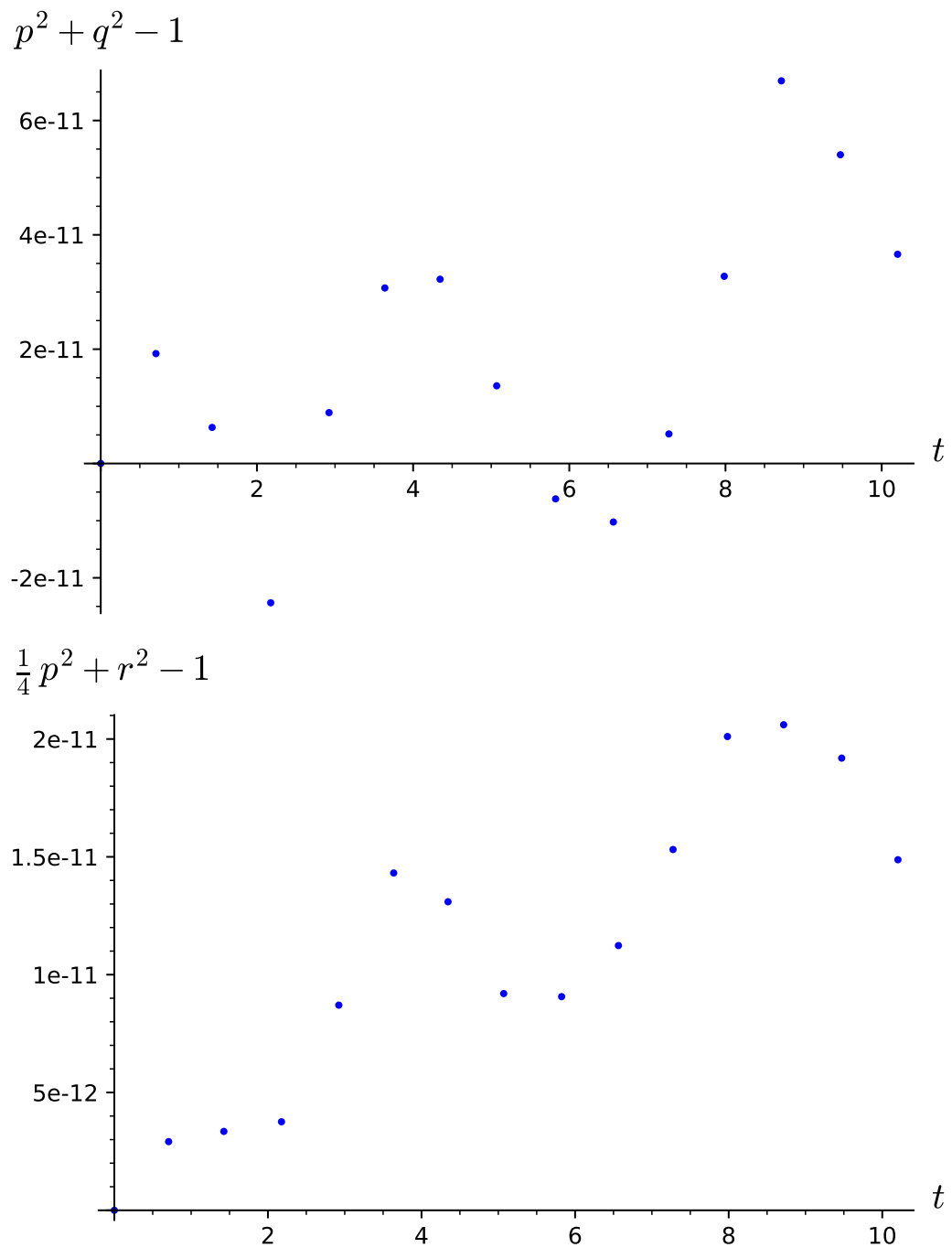


Рисунок 3.2 — Квадратичные интегралы осциллятора Якоби. Вычисления выполнены при $k = 1/2$ по схеме средней точки с шагом $h = 1$.

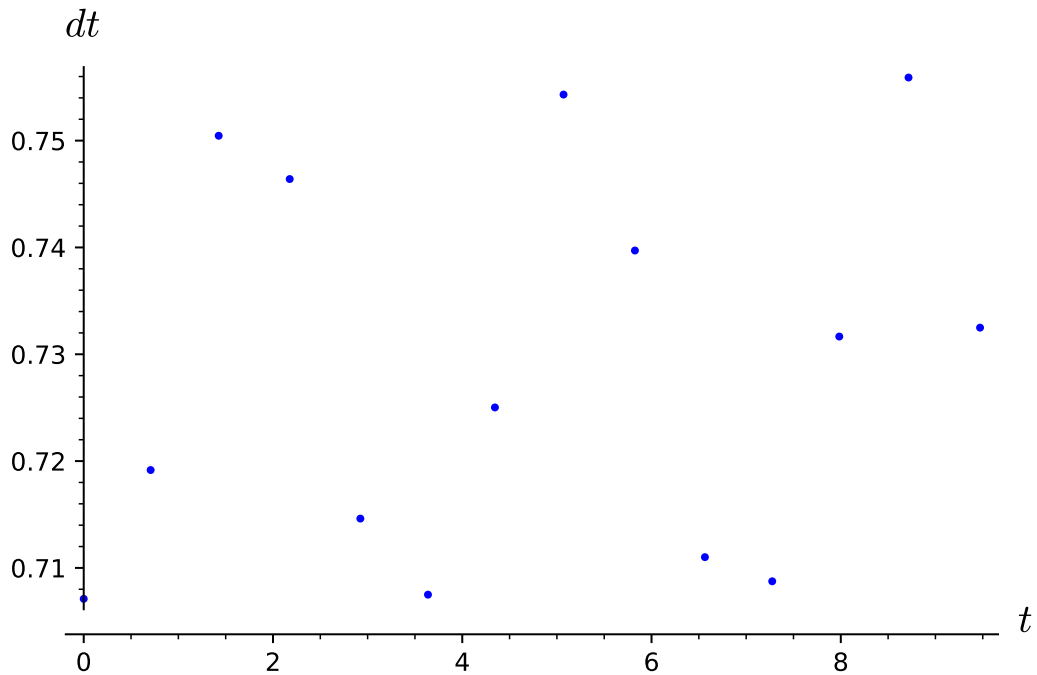


Рисунок 3.3 — Шаг для вычислений при $k = 1/2$ по схеме средней точки при $h = 1$.

Чтобы не иметь трудностей, связанных с расходимостью метода последовательных приближений, мы используем адаптивный шаг, характеризуемый параметром h . Реальный шаг Δt при этом зависит от времени, см. рис. 3.3. В данном случае, это значение почти постоянное, $\Delta t \simeq 0.7$ при $h = 1$. Впрочем так и должно быть, ведь в тестовой задаче нет никаких особенностей.

Диаграммы Ричардсона для p при $t = 10$, построенные для трех рассматриваемых схем (рис. 3.4, 3.5 и 3.6) подтверждают, что схема с s стадиями имеет порядок $2s$, как и было отмечено в разделе 1.6. На схеме с 3-мя стадиями мы выходим на ошибку округления уже при $h = 0.3$.

Таким образом, результаты наших компьютерных экспериментов подтверждают, что наша реализация симплектических схем Рунге-Кутты дает правильные порядки аппроксимации и сохраняет квадратичные интегралы движения.

3.5 Заключение

В настоящей главе представлена оригинальная реализация неявного, в т.ч. симплектического метода Рунге-Кутты с произвольной таблицей Бутчера, инте-

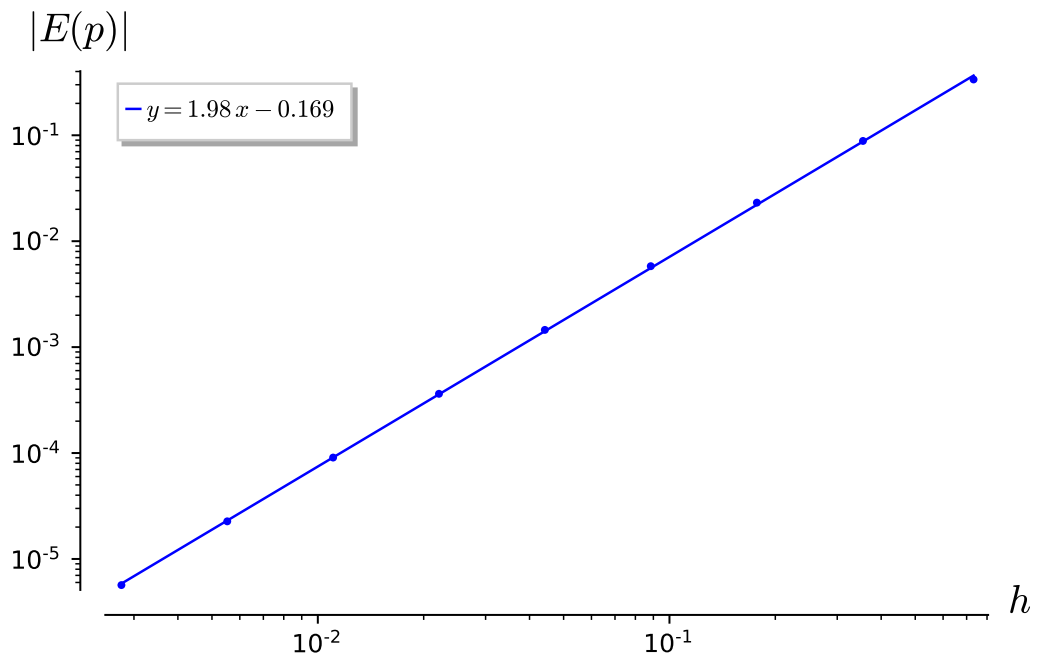


Рисунок 3.4 — Диаграмма Ричардсона для вычисления $p(10)$ в задаче об осцилляторе Якоби при $k = 1/2$ по схеме средней точки.

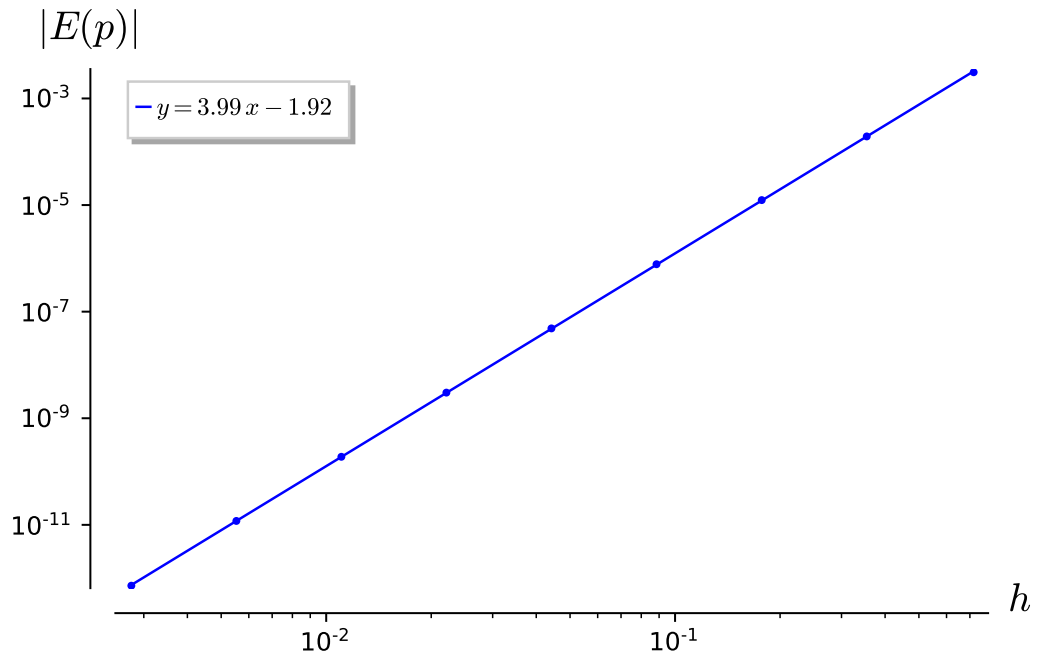


Рисунок 3.5 — Диаграмма Ричардсона для вычисления $p(10)$ по симплектической схеме с двумя стадиями.

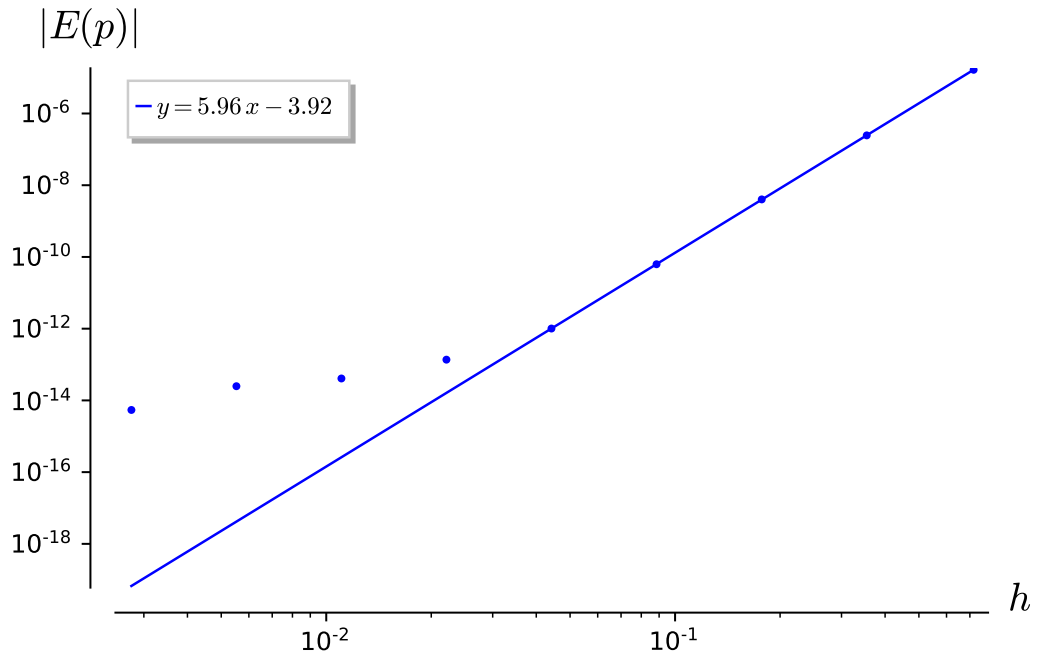


Рисунок 3.6 — Диаграмма Ричардсона для вычисления $p(10)$ по симплектической схеме с 3 стадиями.

гированная в ПО для решения обыкновенных дифференциальных уравнений — пакет `fdm for sage`, которое разрабатывается на каф. ПИ и ТВ РУДН. Дано описание использованных алгоритмов, в т.ч. решения системы нелинейных уравнений на каждом шаге вычисления приближенного решения и адаптации шага. Реализация протестирована на простейшей нелинейной динамической системе — осцилляторе Якоби. Показано, что предложенная реализация симплектических схем Рунге-Кутты дает правильные порядки аппроксимации и сохраняет квадратичные интегралы движения.

Глава 4. Семейство консервативных разностных схем для задачи многих тел

4.1 Постановка задачи

Классическая задача n тел (пример 1.2) состоит в отыскании решений автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \sum_{j=1}^n \gamma \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} (\vec{r}_j - \vec{r}_i), \quad i = 1, \dots, n \quad (4.1)$$

Здесь \vec{r}_i — радиус-вектор, проведенный в i -ое тело, а r_{ij} — расстояние между i -м и j -м телами. Обозначим для краткости координаты скорости i -го тела как $\dot{x}_i = u_i$, $\dot{y}_i = v_i$ и $\dot{z}_i = w_i$ и будем соединять их в вектор \vec{v}_i .

Эта задача 10 независимых алгебраических интегралов движения (пример 1.4) и в силу теоремы Брунса [29; 30] всякий другой алгебраический интеграл выражается через эти 10. Девять из них являются квадратичными функциями относительно координат тел и их скоростей и t , поэтому симплектические схемы сохраняют их точно, но не сохраняют самый важный интеграл — интеграл энергии, то есть дискретизация вносит в задачу диссипацию. Достоинства и недостатки симплектических интеграторов в их применении к расчетам в задаче многих тел на большие времена многократно обсуждались [85]. Однако, возвращаясь к интересующему нас вопросу, при наличии численной диссипации надеяться на наследование качественных свойств точного решения не приходится.

Первая разностная схема для задачи многих, сохраняющая все классические интегралы движения, была предложена Д. Гринспеном в 1992 г. [16—19] и независимо от него и в несколько иной форме Симо и Гонсалесом [20; 21].

Как уже отмечалось в разделе 1.5, задача состоит в построении консервативных разностных схем, сохраняющих важнейшие свойства исходной динамической системы, к числу которых следует отнести ее дискретные симметрии. Неудачные примеры, рассмотренные в разделе 1.5, подсказывают разумную формулировку задачи о построении консервативных разностных схем для задачи многих тел.

Задача 1. Для задачи многих тел составить разностную схему, которая сохраняет все ее алгебраические интегралы точно и инвариантна относительно перестановок тел и обращении времени.

Всем выписанным свойствам, кроме важнейшего — сохранения полной механической энергии, удовлетворяет, например, простейшая из симплектических схем Рунге-Кутты (раздел 1.6) — схема средней точки (пример 1.7). Поэтому простейшая возможность решить задачу 1 — придумать замену переменных, после которой все интегралы станут квадратичными. В сказанном можно увидеть метод квадратизации энергии (invariant energy quadratization method, сокр. IEQ), который был недавно предложен в [22; 23] и применен к задаче двух тел (проблеме Кеплера) в [86].

В прошлые времена всячески старались делать замены, сохраняющие симплектическую структуру задачи многих тел. В частности при исследовании простого столкновения двух тел стремились отыскать не просто регуляризующее преобразование, но каноническое преобразование и на этом основании считали знаменитую теорему Вейерштрасса о простом столкновении весьма трудной [28]. Однако в 1967 году Бурде [24, гл. 6] указал простой способ получения регуляризующего преобразования, но при этом он отказался от симплектической структуры задачи и ввести дополнительные переменные.

М.Д. Малых [87] предложил ввести новые переменные таким образом, чтобы в новой задаче все алгебраические интегралы стали квадратичными, ради чего можно пожертвовать гамильтоновой структурой системы. Это приводит нас к следующей задаче.

Задача 2. Для системы (4.1) построить другую систему, содержащую дополнительные переменные, и обладающую следующими свойствами:

1. новая система имеет достаточное число алгебраических интегралов движения, чтобы выразить дополнительные переменные через координаты тел,
2. при некотором выборе значений констант в этих интегралах решения новой системы совпадают с решениями исходной,
3. новая система имеет интегралы движения, которые с учетом связи между дополнительными переменными и координатами тел переходят в 10 классических интегралов задачи многих тел,

4. все названные интегралы движения новой системы являются квадратичными функциями относительно координат и скоростей тел, а также дополнительных переменных.

4.2 Рационализация задачи

Прежде всего, избавимся от иррациональностей путем введения новых переменных r_{ij} , связанных с координатами уравнением

$$r_{ij}^2 - (x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2 = 0$$

Дифференцируя это соотношение по t , мы получим уравнение

$$r_{ij}\dot{r}_{ij} = (x_i - x_j)(u_i - u_j) + (y_i - y_j)(v_i - v_j) + (z_i - z_j)(w_i - w_j)$$

или

$$r_{ij}\dot{r}_{ij} = (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j)$$

Перейдем от исходной системы $3n$ уравнений 2-го порядка к системе уравнений 1-го порядка относительно неизвестных

$$x_1, \dots, z_n, u_1, \dots, w_n, r_{12}, \dots, r_{n-1,n}$$

Эта система состоит из трех связанных подсистем: системы для координат

$$\dot{\vec{r}}_i = \vec{v}_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (4.2)$$

системы для скоростей

$$m_i\dot{\vec{v}}_i = \sum_{j=1}^n \gamma \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} (\vec{r}_j - \vec{r}_i), \quad i = 1, \dots, n \quad (4.3)$$

и системы для расстояний

$$\dot{r}_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j), \quad i, j = 1, \dots, n; i \neq j. \quad (4.4)$$

Всякое решение задачи многих тел удовлетворяет этой системе, однако не всякое решение этой новой системы дифференциальных уравнений удовлетворяет соотношению

$$r_{ij}^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2$$

и, следовательно, не является решением задачи многих тел. Поэтому, вообще говоря, новая система может иметь меньше интегралов, чем исходная. В данном случае можно прямо доказать, что классические интегралы задачи многих тел продолжаются на новую систему дифференциальных уравнений.

Теорема 2 (Али Баддур, 2021 [87]). Система (4.2)-(4.4) обладает 10 классическими интегралами задачи многих тел и дополнительными интегралами

$$r_{ij}^2 - (x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2 = \text{const.}$$

Доказательство. Проверим выполнение теоремы прямым вычислением.

1. Закон сохранения импульса

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = \text{const}$$

выполняется, поскольку

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = \sum_{i=1}^n m_i \dot{\vec{v}}_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \gamma \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) = 0.$$

2. Закон сохранения момента импульса

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i \times \vec{r}_i = \text{const}$$

выполняется, поскольку

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i \times \vec{r}_i = \sum_{i=1}^n m_i \dot{\vec{v}}_i \times \vec{r}_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \gamma \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \times \vec{r}_i = 0.$$

3. Закон о движении центра масс

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{r}_i - t \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = \text{const}$$

выполняется, поскольку

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n m_i \vec{r}_i - t \sum_{i=1}^n m_i \dot{\vec{v}}_i = \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i - \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = 0.$$

4. Закон сохранения энергии

$$\sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2} |\vec{v}_i|^2 - \gamma \sum_{i,j} \frac{m_i m_j}{r_{ij}} = \text{const}$$

выполняется, поскольку

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2} (u_i^2 + v_i^2 + w_i^2) &= \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i \cdot \dot{\vec{v}}_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \gamma \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} \vec{v}_i \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \\ &= \gamma \sum_{ij} \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} (\vec{v}_i \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i) + \vec{v}_j \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)) \\ &= \gamma \sum_{ij} \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} (\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \end{aligned}$$

и, в силу (4.4),

$$\frac{d}{dt} \sum_{i,j} \frac{m_i m_j}{r_{ij}} = - \sum_{i,j} \frac{m_i m_j}{r_{ij}^2} \dot{r}_{ij} = - \sum_{i,j} \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j)$$

5. Выполнение новых законов сохранения

$$r_{ij}^2 - (x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2 = \text{const}$$

следует из уравнений (4.4):

$$\frac{d}{dt} (r_{ij}^2 - (x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2) = 2r_{ij}\dot{r}_{ij} - 2(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j) = 0$$

□

Замечание 3. Разумеется, от классических вычислений мы должны были отклониться только при доказательстве сохранения энергии и новых интегралов, ведь только в этих двух случаях мы пользовались системой (4.4).

Теперь мы имеем автономную систему с рациональной правой частью все интегралы которой — квадратичные, кроме одного — рационального интеграла

$$\sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2} (u_i^2 + v_i^2 + w_i^2) - \gamma \sum_{i,j} \frac{m_i m_j}{r_{ij}} = \text{const}$$

выражающего закон сохранения энергии.

4.3 Система с квадратичными интегралами

Чтобы избавиться от знаменателей в законе сохранения энергии, введем новые дополнительные переменные ρ_{ij} , связанные с уже введенными уравнениями

$$r_{ij} \rho_{ij} = 1.$$

Заметим, что это соотношение — опять квадратичное, что и позволит в дальнейшем получить вместо него квадратичный интеграл.

Дифференцируя это соотношение по t , получим

$$r_{ij}\dot{\rho}_{ij} + \rho_{ij}\dot{r}_{ij} = 0$$

или

$$\dot{\rho}_{ij} = -\frac{\rho_{ij}}{r_{ij}^2}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j).$$

Перейдем от системы (4.2)-(4.4) к системе уравнений 1-го порядка относительно неизвестных

$$x_1, \dots, z_n, u_1, \dots, w_n, r_{12}, \dots, r_{n-1,n}, \rho_{12}, \dots, \rho_{n-1,n}$$

Эта система состоит из трех связанных подсистем: системы для координат

$$\dot{\vec{r}}_i = \vec{v}_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (4.5)$$

системы для скоростей

$$m_i \dot{\vec{v}}_i = \sum_{j=1}^n \gamma \frac{m_i m_j \rho_{ij}}{r_{ij}^2} (\vec{r}_j - \vec{r}_i), \quad i = 1, \dots, n \quad (4.6)$$

системы для расстояний

$$\dot{r}_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j), \quad i, j = 1, \dots, n; i \neq j. \quad (4.7)$$

и системы для обратных расстояний

$$\dot{\rho}_{ij} = -\frac{\rho_{ij}}{r_{ij}^2} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j), \quad i, j = 1, \dots, n; i \neq j. \quad (4.8)$$

Правая часть в (4.6) подобрана таким образом, чтобы выполнялась следующая теорема.

Теорема 3 (Али Баддур, 2021 [87]). Система (4.5)-(4.8) обладает 10 классическими интегралами задачи многих тел, а именно:

1. закон сохранения импульса

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = \text{const}$$

2. закон сохранения момента импульса

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i \times \vec{r}_i = \text{const}$$

3. закон о движении центра масс (3 скалярных интеграла)

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{r}_i - t \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = \text{const}$$

4. закон сохранения энергии

$$\sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2} (u_i^2 + v_i^2 + w_i^2) - \gamma \sum_{i,j} m_i m_j \rho_{ij} = \text{const}$$

и дополнительными интегралами

$$r_{ij}^2 - (x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2 = \text{const}, \quad i \neq j \quad (4.9)$$

и

$$r_{ij} \rho_{ij} = \text{const}, \quad i \neq j. \quad (4.10)$$

Доказательство. Проверим выполнение теоремы прямым вычислением.

1. Закон сохранения импульса

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = \text{const}$$

выполняется, поскольку

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = \sum_{i=1}^n m_i \dot{\vec{v}}_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \gamma \frac{m_i m_j \rho_{ij}}{r_{ij}^2} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) = 0.$$

2. Закон сохранения момента импульса

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i \times \vec{r}_i = \text{const}$$

выполняется, поскольку

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i \times \vec{r}_i = \sum_{i=1}^n m_i \dot{\vec{v}}_i \times \vec{r}_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \gamma \frac{m_i m_j \rho_{ij}}{r_{ij}^2} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \times \vec{r}_i = 0.$$

3. Закон о движении центра масс

$$\sum_{i=1}^n m_i \vec{r}_i - t \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = \text{const}$$

выполняется, поскольку

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n m_i \vec{r}_i - t \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i - \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i = 0.$$

4. Закон сохранения энергии, взятый в форме

$$\sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2} |\vec{v}_i|^2 - \gamma \sum_{i,j} m_i m_j \rho_{ij} = \text{const},$$

выполняется, поскольку

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2} (u_i^2 + v_i^2 + w_i^2) &= \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i \cdot \dot{\vec{v}}_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \gamma \frac{m_i m_j \rho_{ij}}{r_{ij}^2} \vec{v}_i \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \\ &= \gamma \sum_{ij} \frac{m_i m_j \rho_{ij}}{r_{ij}^2} (\vec{v}_i \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i) + \vec{v}_j \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)) \\ &= \gamma \sum_{ij} \frac{m_i m_j \rho_{ij}}{r_{ij}^2} (\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \end{aligned}$$

и, в силу (4.8),

$$\frac{d}{dt} \sum_{i,j} m_i m_j \rho_{ij} = - \sum_{i,j} \frac{m_i m_j \rho_{ij}}{r_{ij}^2} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j)$$

5. Выполнение закона сохранения

$$r_{ij}^2 - (x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2 = \text{const}$$

следует из уравнений (4.7):

$$\frac{d}{dt} (r_{ij}^2 - (x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2) = 2r_{ij} \dot{r}_{ij} - 2(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j) = 0$$

6. Выполнение закона сохранения

$$r_{ij} \rho_{ij} = \text{const}$$

следует из уравнений (4.7)-(4.8):

$$\frac{d}{dt} r_{ij} \rho_{ij} = \dot{r}_{ij} \rho_{ij} + r_{ij} \dot{\rho}_{ij} = \frac{\rho_{ij}}{r_{ij}} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j) - r_{ij} \frac{\rho_{ij}}{r_{ij}^2} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j) = 0$$

Поскольку дифференциальные уравнения рассматриваемой системы были получены путем дифференцирования соотношений (4.9) и (4.10), появление указанных дополнительных интегралов очевидно. \square

Вообще говоря, нельзя исключить того, что расширенная система (4.5)-(4.8) имеет и другие алгебраический интегралы, функционально независимые с перечисленными в теореме 3. Однако всякое решение задачи многих тел является решением расширенной системы (4.5)-(4.8), поэтому всякий алгебраический интеграл движения расширенной системы остается постоянным на решениях задачи многих тел. В силу теоремы Брунса на многообразии

$$r_{ij}^2 - (x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2 = 0, \quad r_{ij}\rho_{ij} = 1, \quad i \neq j,$$

этот интеграл выражается алгебраически через классические интегралы задачи многих тел.

4.4 Заключение

Согласно теореме 3, автономная система дифференциальных уравнений (4.5)-(4.8), содержащая $n(n - 1)$ дополнительных переменных r_{ij} и ρ_{ij} , обладает следующими свойствами:

1. эта система имеет квадратичные интегралы движения

$$r_{ij}^2 - (x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2 = \text{const}$$

и

$$r_{ij}\rho_{ij} = \text{const}.$$

которые позволяют выразить дополнительные переменные r_{ij} и ρ_{ij} через координаты тел,

2. если выбрать константы в этих интегралах таким образом, что

$$r_{ij}^2 - (x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2 = 0$$

и

$$r_{ij}\rho_{ij} = 1,$$

решения новой системы совпадают с решениями исходной,

3. новая система имеет квадратичные интегралы движения, которые с учетом связи между дополнительными переменными и координатами тел переходят в 10 классических интегралов задачи многих тел.

Таким образом, построенная система обладает всеми свойствами, перечисленными в задаче 2. Поскольку все классические интегралы задачи многих тел, равно как и дополнительные интегралы в новых переменных — квадратичные, любая симплектическая разностная схема Рунге-Кутты, в том числе простейшая из них — схема средней точки — сохраняет все эти интегралы точно.

Автономная система дифференциальных уравнений (4.5)-(4.8) сохраняет симметрию исходной задачи относительно перестановок тел и обращения времени. Как уже отмечалось выше, схема средней точки инварианта относительно перестановок тел и обращения времени.

На каждом шаге схемы будут определяться новые значения не только для координат и скоростей тел, но и для вспомогательных величин r_{ij} и ρ_{ij} . Если в начальный момент были заданы только координаты и скорости тел, а вспомогательные переменные определены равенствами

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}, \quad \rho_{ij} = \frac{1}{r_{ij}},$$

то эти равенства сохраняются точно (может быть, с точностью до знаков у радикала) из-за того, что вспомогательные интегралы (4.9) и (4.10) — квадратичные и сохраняются при вычислении по схеме средней точки точно. Поэтому величины r_{ij} и ρ_{ij} не теряют своего исходного смысла расстояний между телами и обратных расстояний между телами.

Поэтому схема средней точки, записанная для системы (4.5)-(4.8), обладает всеми свойствами, перечисленными в задаче 1. Таким образом, цель, поставленная в начале главы, достигнута.

Замечание 4. Схема Гринспена представляет собой своего рода комбинацию метода средней точки и метода дискретных градиентов [88; 89] и при этом сохраняет ряд симметрий исходной задачи, что было особо отмечено уже в первой работе Д. Гринспена [16]. Эта схема схожа со схемой 2-го порядка, которая получается у нас при применении схемы средней точки к расширенной системе. Конечно, наша схема содержит больше переменных и сохраняет структуру средней точки. Попытка исключения этих переменных приведет к очень громоздкой системе и не сулит никаких преимуществ. Сохранение же структуры схемы средней точки упрощает разработку численного алгоритма ее применения.

Глава 5. Тестирование семейства консервативных разностных схем для задачи многих тел

В прошлой главе было построено семейство разностных схем, сохраняющих все алгебраические интегралы движения задачи многих тел. Поскольку это семейство получается путем квадратизации энергии, для расчетов по этим схемам можно использовать нашу реализацию неявного метода Рунге-Кутты, описанную в главе 3. Протестируем эту схему на конкретных примерах и посмотрим, наследуются ли другие алгебраические свойства задачи многих тел, следуя [87; 90].

5.1 Задача двух тел

Рассмотрим прежде всего задачу двух тел [91]. Для краткости будем считать, что их массы и гравитационная постоянная, после приведения размерных

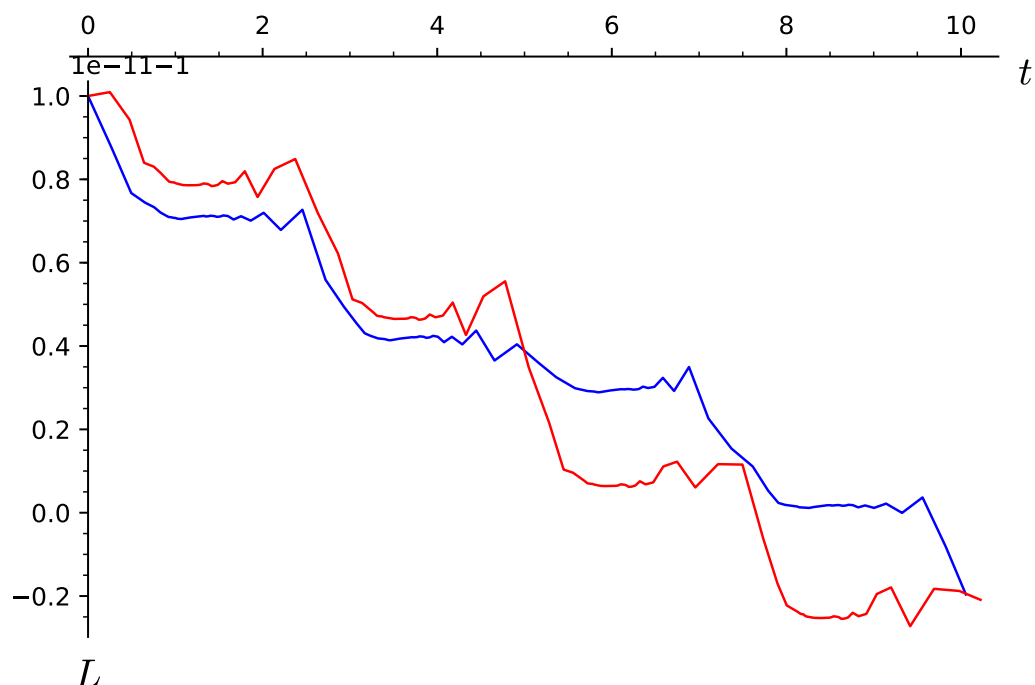


Рисунок 5.1 — Задача двух тел. Изменение интеграла L при расчетах по схеме средней точки с адаптивным шагом $h = 1$ при введении дополнительных переменных (синий) и без введения дополнительных переменных (красный).

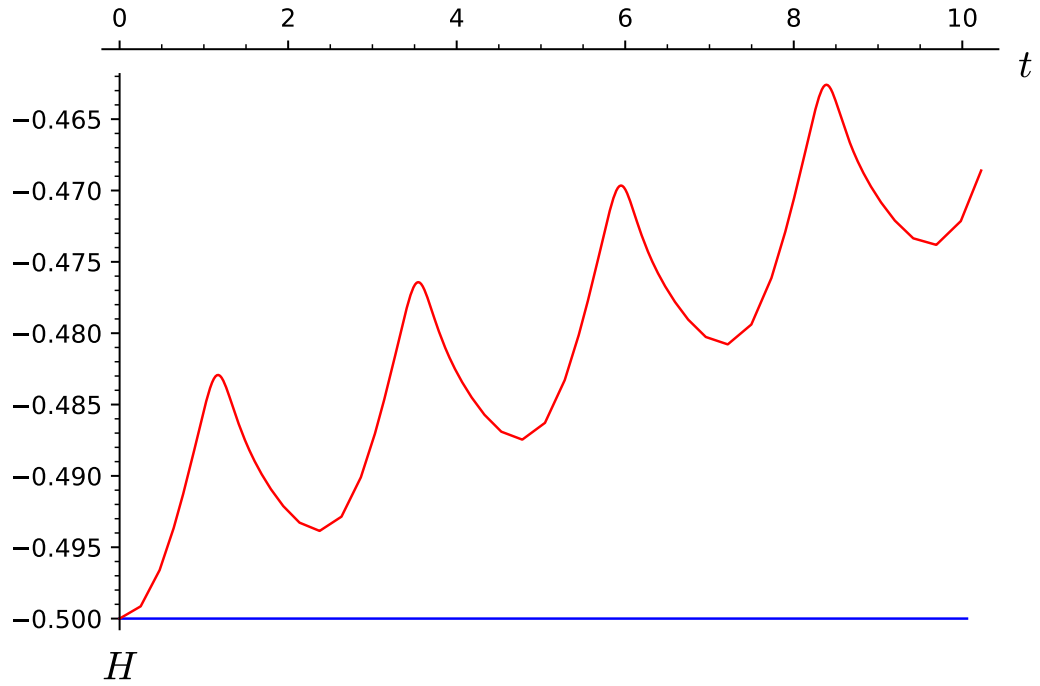


Рисунок 5.2 — Задача двух тел. Изменение интеграла H при расчетах по схеме средней точки с адаптивным шагом $h = 1$ при введении дополнительных переменных (синий) и без введения дополнительных переменных (красный).

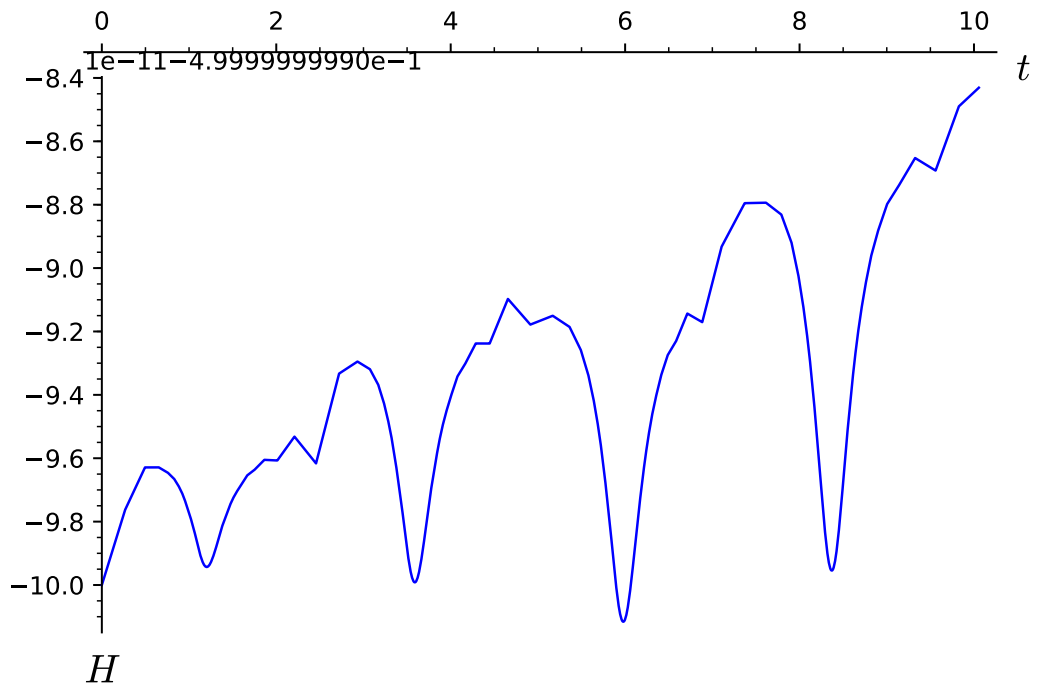


Рисунок 5.3 — Задача двух тел. Изменение интеграла H при расчетах по схеме средней точки с адаптивным шагом $h = 1$ при введении дополнительных переменных.

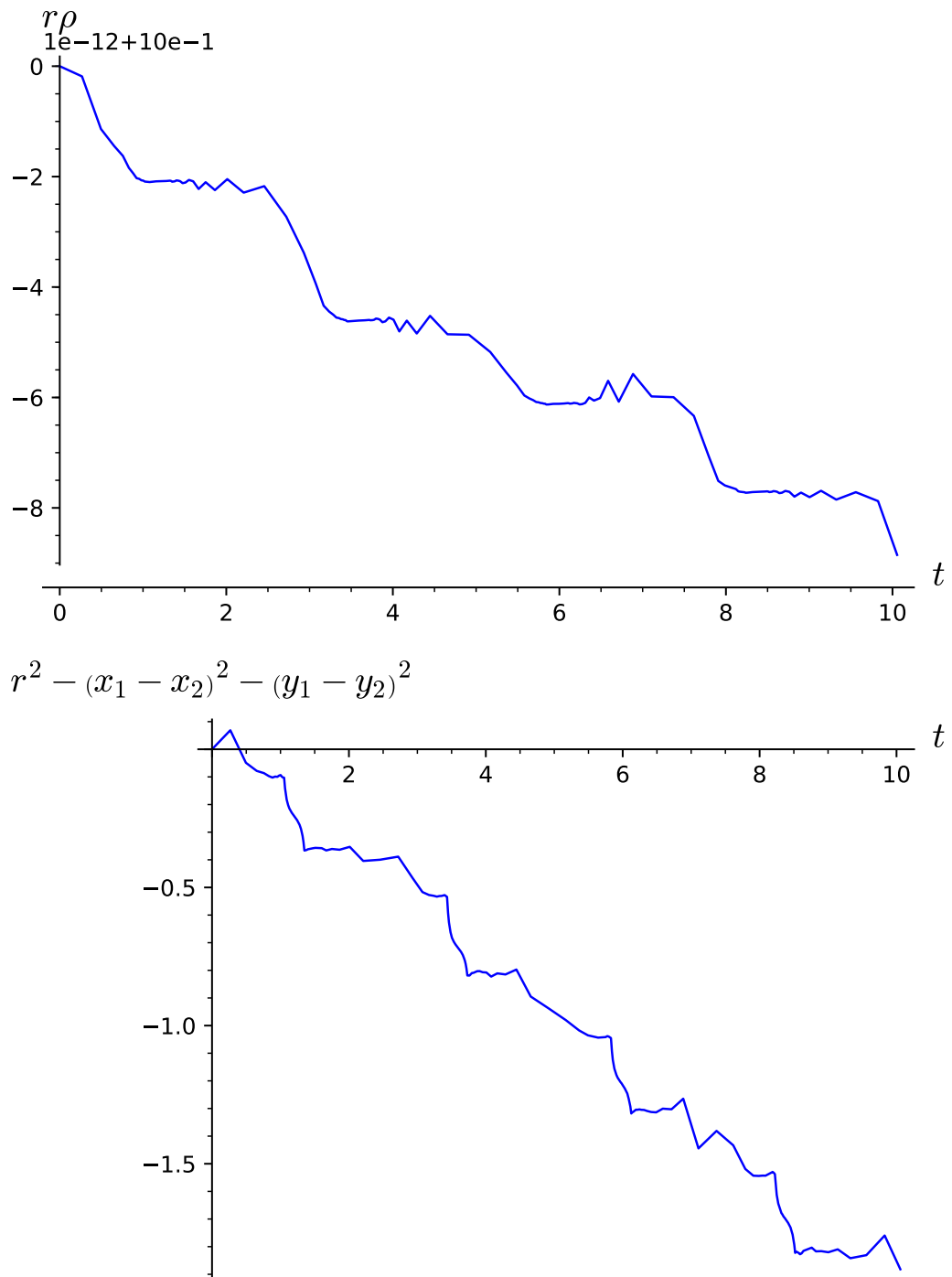


Рисунок 5.4 — Задача двух тел. Изменение интегралов, выражающих связи между исходными и дополнительными переменными, при расчетах по схеме средней точки с адаптивным шагом $h = 1$.

множителей, равны 1. Поместим первое тело в начало координат, а второе — в точку $(1,0)$ и придадим второму телу скорость $\vec{v} = (0,1)$.

Сравним численные решения, полученные по схеме средней точки, примененной к исходной системе (4.1), и по той же схеме, но записанной к системе (4.2)-(4.4) с дополнительными переменными. Возьмем приметный шаг $h = 1$ и $\varepsilon = 10^{-10}$.

Система двух тел имеет 4 линейные интеграла движения, а именно

$$U = u_1 + u_2, \quad V = v_1 + v_2$$

и

$$X = x_1 + x_2 - (u_1 + u_2)t, \quad Y = y_1 + y_2 - (v_1 + v_2)t,$$

один квадратичный

$$L = u_1 y_1 - v_1 x_1 + u_2 y_2 - v_2 x_2$$

и интеграл энергии

$$H = (u_1^2 + u_2^2 + v_1^2 + v_2^2)/2 - 1/r$$

В силу теоремы 1 Купера линейные и квадратичные интегралы сохраняются в любом случае. Это подтверждает компьютерный эксперимент: изменение линейных интегралов остается на уровне ошибки округления, а изменения квадратичного интеграла L остаются в пределах 10^{-11} как при введении дополнительных переменных, так и без их введения, см. рис. 5.1.

Интеграл энергии не сохраняется, если не ввести дополнительные переменные, что хорошо видно на рис. 5.2. Если же ввести дополнительные переменные, то изменение интеграла энергии остается в пределах 10^{-10} (масштаб рис. 5.2 не позволяет заметить это изменение, поэтому этот же график представлен в другом масштабе на рис. 5.3).

Как отмечалось в прошлой главе, при введении новых переменных возникают связи, выражающиеся квадратичными интегралами

$$r^2 = (x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2, \quad r\rho = 1.$$

Они тоже сохраняются на уровне 10^{-11} , см. рис. 5.4. Таким образом, компьютерный эксперимент подтверждает, что предложенный прием дает решение задачи 2.

Помимо интегралов задача двух тел обладает еще одной алгебраической структурой — траектории движения тел в системе отсчета, связанной с центром

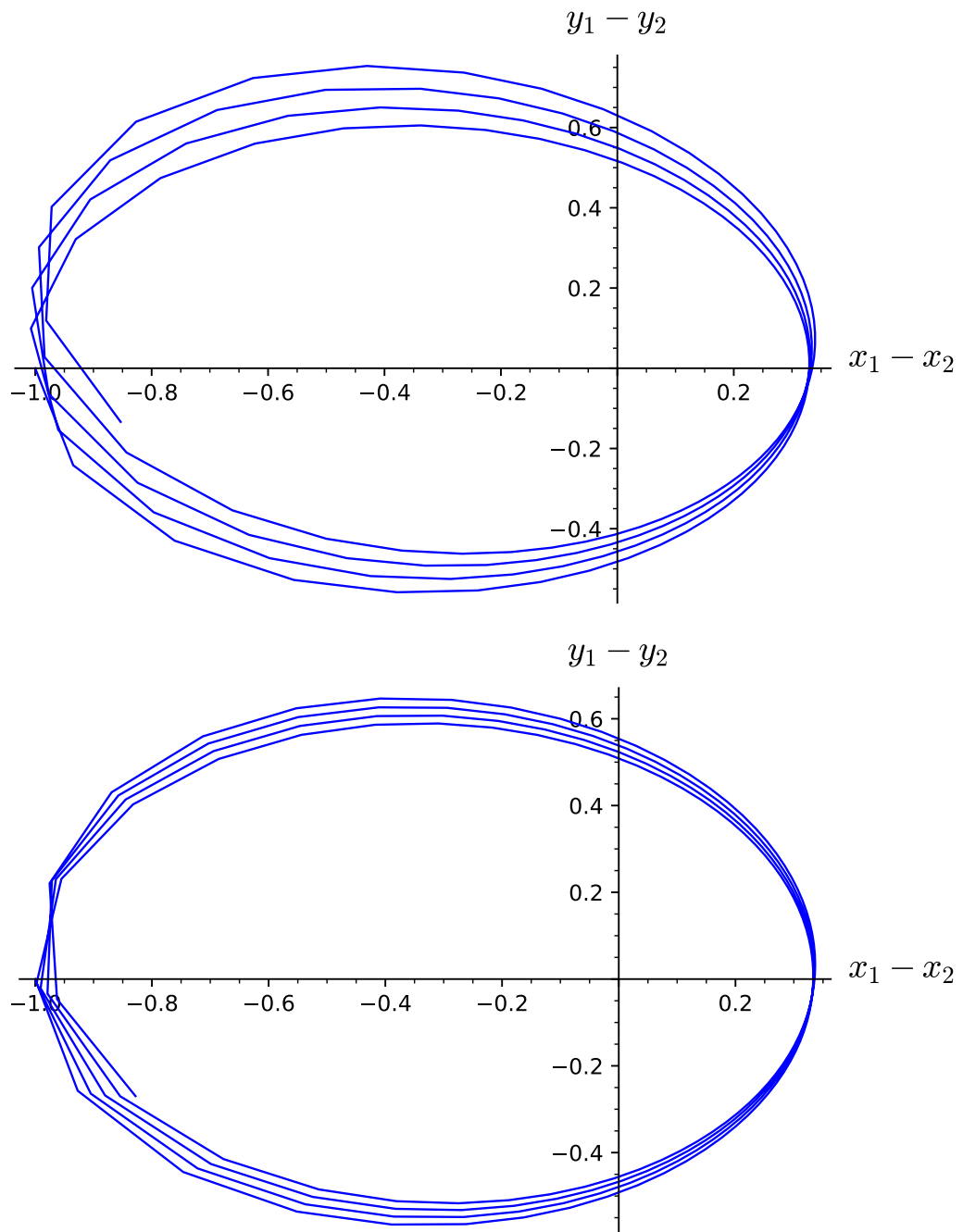


Рисунок 5.5 — Задача двух тел. Траектория движения точки с координатами $(x_1 - x_2, y_1 - y_2)$ при расчетах по схеме средней точки с адаптивным шагом $h = 1$ при введении дополнительных переменных (внизу) и без введения дополнительных переменных (вверху).

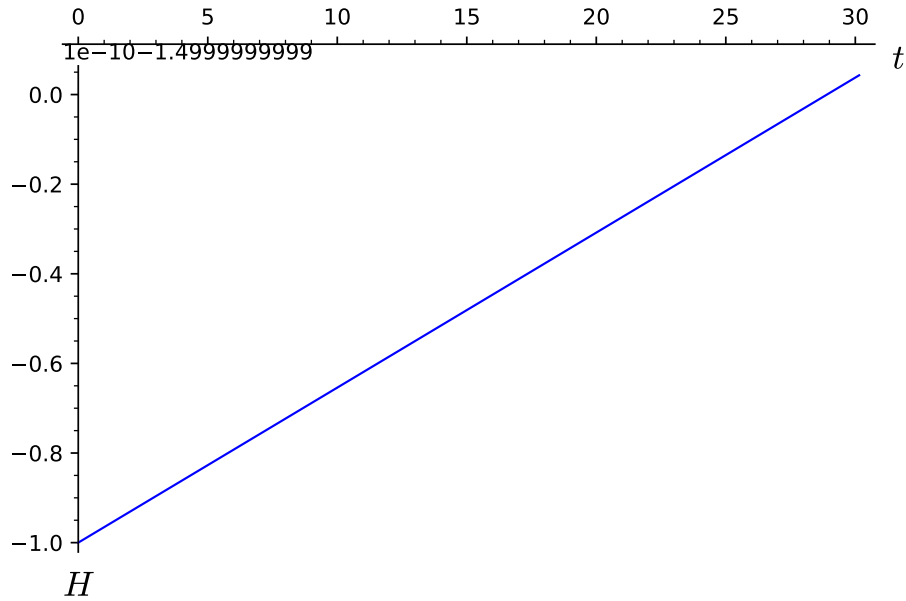


Рисунок 5.6 — Тест Лагранжа, схема средней точки, шаг $h = 1$. График изменения полной механической энергии.

масс, являются коническими сечениями. Из общих соображений можно было бы ожидать, что сохранение всех алгебраических интегралов приведет и к сохранению этой структуры. Однако, как видно на рис. 5.5, траектория точки $(x_1 - x_2, y_1 - y_2)$ не является замкнутой и может быть описана как медленно вращающийся эллипс. Причем это верно в равной мере и для системы без дополнительных переменных, и для системы с дополнительными переменными. Таким образом, сохранение одной алгебраической структуры (всех алгебраических интегралов) не влечет сохранения алгебраичности траекторий.

5.2 Периодические решения задачи трех тел

5.2.1 Тест на решениях Лагранжа

Обратимся теперь задачу трех тел [24]. Как и в прошлых тестах, будем считать, что их массы и гравитационная постоянная, после приведения размерных множителей, равны 1.

Как хорошо известно еще со времен Эйлера [24], плоская задача имеет два семейства частных решений, которые можно описать в элементарных функциях.

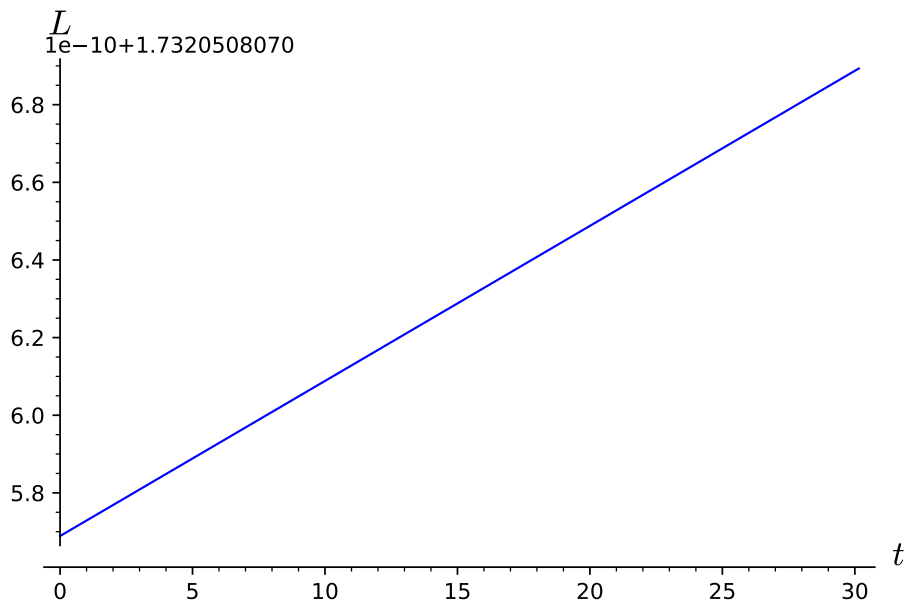


Рисунок 5.7 — Тест Лагранжа, схема средней точки, шаг $h = 1$. График изменения момента импульса системы.

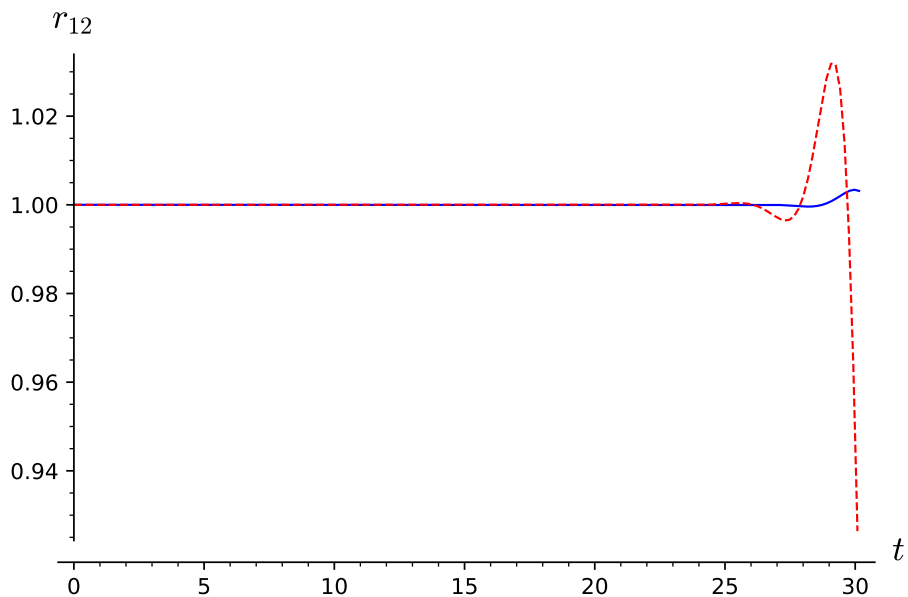


Рисунок 5.8 — Тест Лагранжа. График изменения расстояния r_{12} , вычисления по схеме средней точки (синий сплошной) и двухстадийной схеме (красный пунктир), $h = 1$.

Первое из них, традиционно связываемое с именем Лагранжа, можно описать так: тела образуют правильный треугольник со сторонами фиксированной длины a , который вращается вокруг центра масс с постоянной скоростью.

Мы взяли $a = 1$ и вполне приметный адаптивный шаг $h = 1$ и нашли приближенные решения по схемам с 1 и 2 стадиями. Прежде всего следует заметить, что интегралы движения сохраняются в пределах $\pm 10^{-10}$ для обеих схем, см. рис. 5.6, 5.7. Примерно до $t = 28$ траектории совпадали с кругом, но затем отличие стало весьма заметным. Этот переход хорошо виден на рис. 5.8. При этом, что особенно удивительно, эффект значительно сильнее выражен на схеме 4-го порядка, а не на схеме 2-го порядка.

Чтобы понять причины этого странного эффекта мы увеличили число бит, отводимых на десятичные дроби с 64 до 300. Эффект полностью пропал, расстояния между телами стали равными 1 с точностью до $\pm 10^{-77}$. Таким образом, накопление ошибки округления не влияет на сохранение интегралов движения, но влияет на сохранение расстояний между телами. Это явление весьма опасно, поскольку ошибка округления приводит к «развалу» решения без нарушения законов сохранения. Не ясно, как его можно идентифицировать, минуя тяжелый в вычислительном отношении анализ по методу Ричардсона (гл. 2).

После увеличения числа битов, отводимых на число, мы заметили, что расстояния между точками остаются постоянными на уровне ошибки округления. М.Д. Малых [92] удалось строго доказать, что на решении, полученном по схеме средней точки с введением дополнительных переменных, при выбранных начальных условиях расстояния между телами сохраняются точно. Таким образом, приближенное решение наследует свойство периодичности точного решения Лагранжа.

Замечание 5. Это наблюдение позволило сформулировать конечный разностный аналог задачи Лагранжа: используя схему средней точки, найти все приближенные решения задачи трёх тел на плоскости, в которой расстояния между телами не изменяются. В [92] было показано, что эта задача решается чисто алгебраическими методами. Доказаны две теоремы, сводящие эту задачу к изучению свойств схемы средней точки для системы связанных осцилляторов.

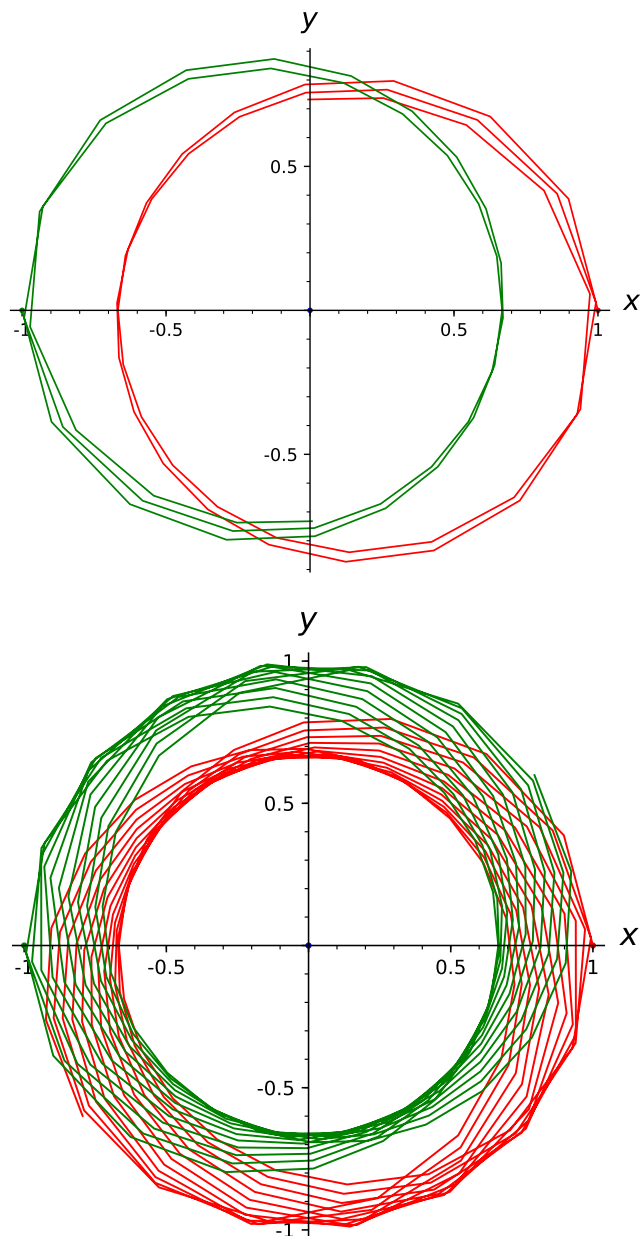


Рисунок 5.9 — Тест Эйлера, максимально возможный шаг. Траектории трех тел при $0 < t < 10$ и $0 < t < 50$.

5.2.2 Тест на решениях Эйлера

Обратимся теперь ко второму семейству частных решений, которые можно описать в элементарных функциях и традиционно связывается с именем Эйлера. В этом случае три тела все время лежат на одной прямой.

Мы взяли простейший вариант, когда первое тело покоится, а два других описывают окружности равных радиусов. Для этого в начальный момент времени взяты следующие условия: тела лежат на прямой Ox , первое тело — в нуле, вто-

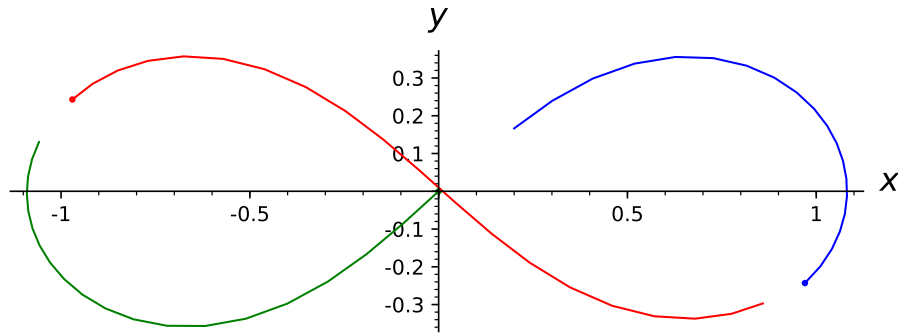


Рисунок 5.10 — Хореографический тест. Траектории трех тел при $0 < t < 4$, точками отмечены начальные положения.

рое — точке $x = 1$, третье — в точке $x = -1$. Первое тело покоится, а начальные скорости двух других тел направлены по оси Oz и равны соответственно 1 и -1 . В этом случае первое тело остается на месте, а два другие движутся по окружностям.

Для вычисления приближенного решения, мы взяли нарочито грубый шаг. Тем не менее, первое тело стоит на месте с точностью до ошибки округления, а два других тела лежат на одной прямой, поскольку

$$|x_2y_3 - x_3y_2|$$

равна нулю с той же точностью. Однако траектории не являются окружностями (рис. 5.9). За один оборот точки ложатся на слегка приплюснутый овал, который немного поворачивается с каждым оборотом тела. В итоге при больших временах траектории двух тел заполняют кольцо. Таким образом, круговые траектории точного решения превращаются в овалы. Таким образом, здесь повторяется та же особенность, которую мы уже подметили в задаче двух тел: сохранение всех алгебраических интегралов не влечет сохранения алгебраичности траекторий.

5.2.3 Хореографический тест

В 1993 году Мур (Chris Moore) открыл в рамках численного эксперимента новое частное периодическое решение задачи трех тел, при котором три тела выписывают восьмерку [93], позже этому было дано обоснование [94; 95]. В отличие от классических тестов, здесь начальные данные известны только приближенно. Мы будем использовать значения, которые были найдены численно Симо (Simó)

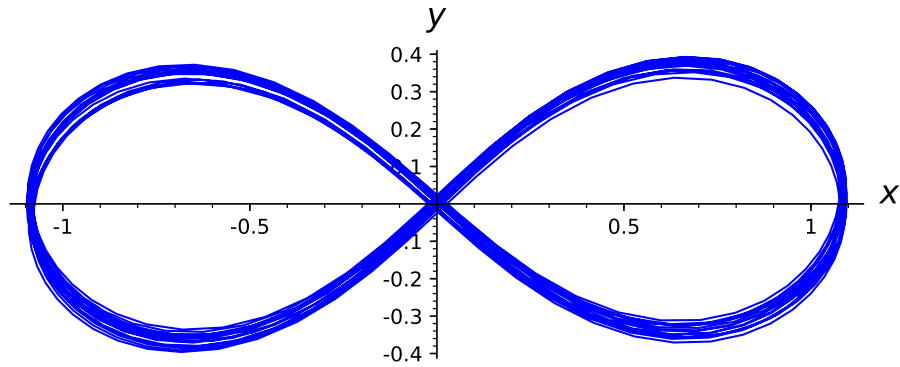


Рисунок 5.11 — Хореографический тест. Траектория 1-го тела при $0 < t < 200$.

и приведены в статье [94]. Сейчас не ясно, является ли эта восьмерка алгебраической кривой, сходство с лемнискатой Бернулли только внешнее [96].

Мы вычислили приближенное решение по этим начальным данным. Прежде всего отметим, что восьмерка действительно получается (рис. 5.10). Однако на грубом шаге заметно, что со временем эта восьмерка движется (рис. 5.11). Таким образом, надеяться на наследование этим решением периодичности не приходится.

5.3 Непериодические решения задачи трех тел

5.3.1 Тест с «петельками»

Среди различных начальных данных, которые мы использовали, чтобы протестировать нашу программу, мы нашли один весьма любопытный вариант, когда на траекториях появляются малые петельки. Мы взяли

$$x_1(0) = 0, \quad x_2(0) = 1, \quad x_3(0) = 2, \quad y_1(0) = 0, \quad y_2(0) = 0, \quad y_3(0) = 0$$

и

$$u_1(0) = 0, \quad u_2(0) = 1, \quad u_3(0) = 1, \quad v_1(0) = 0, \quad v_2(0) = 1, \quad v_3(0) = 2$$

Как видно на рис. 5.12, траектория третьего тела сначала имеет ряд приметных точек. Первая из них визуально походит на точку возврата (рис. 5.13, верхний), хотя, как видно на рис. 5.16, скорость в ней мала, но не равна нулю. Затем эти

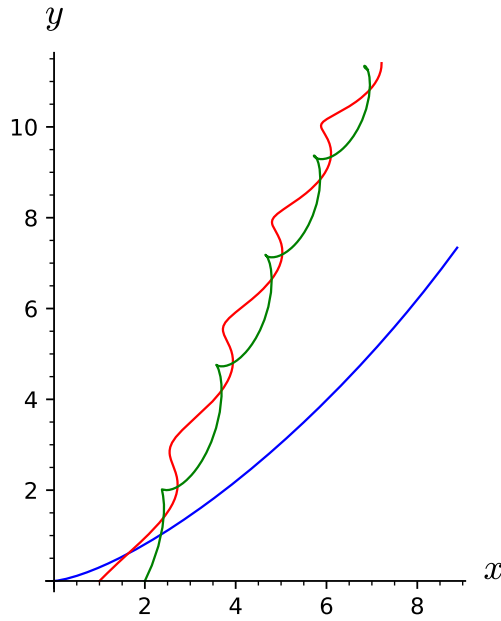


Рисунок 5.12 — Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Траектории трех тел при $0 < t < 2$.

точки превращаются в малые петли (рис. 5.13, нижний). Поэтому этот тест мы будем далее называть тестом с петельками.

Наш алгоритм существенно уменьшал шаг в петельках (см. рис. 5.23), что позволило описать их весьма подробно. При этом шаг опускался до значений порядка $\Delta t = \cdot 10^{-2}$. Интегралы движение сохранялись в ожидаемых пределах порядка 10^{-12} , определяемых параметром ε , см. рис. 5.25 и 5.27.

Следует заметить, что петельки хорошо описываются даже явным методом Рунге-Кутты, однако при этом на каждой петельке скачком меняются энергия и импульс системы, см. 5.26 и 5.28.

5.3.2 Первый тест, в котором тела подлетают близко друг к другу

Во всех рассмотренных выше тестах тела оставались на значительном расстоянии друг от друга, поэтому не возникало вычислительной особенности, весьма характерной для задачи многих тел, — прохождению тел вблизи друг друга. Конечно, нельзя считать, что в этот момент происходит истинное соударение, поскольку по теореме Вейерштрасса соударение в задаче многих тел при произвольных начальных данных невероятно [28].

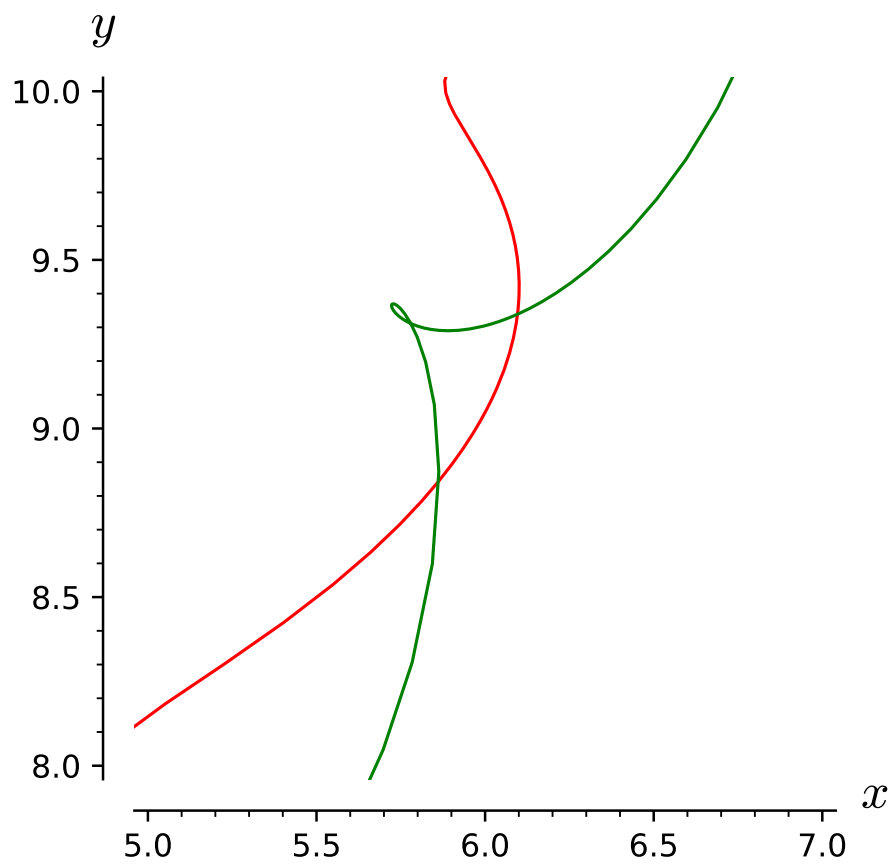
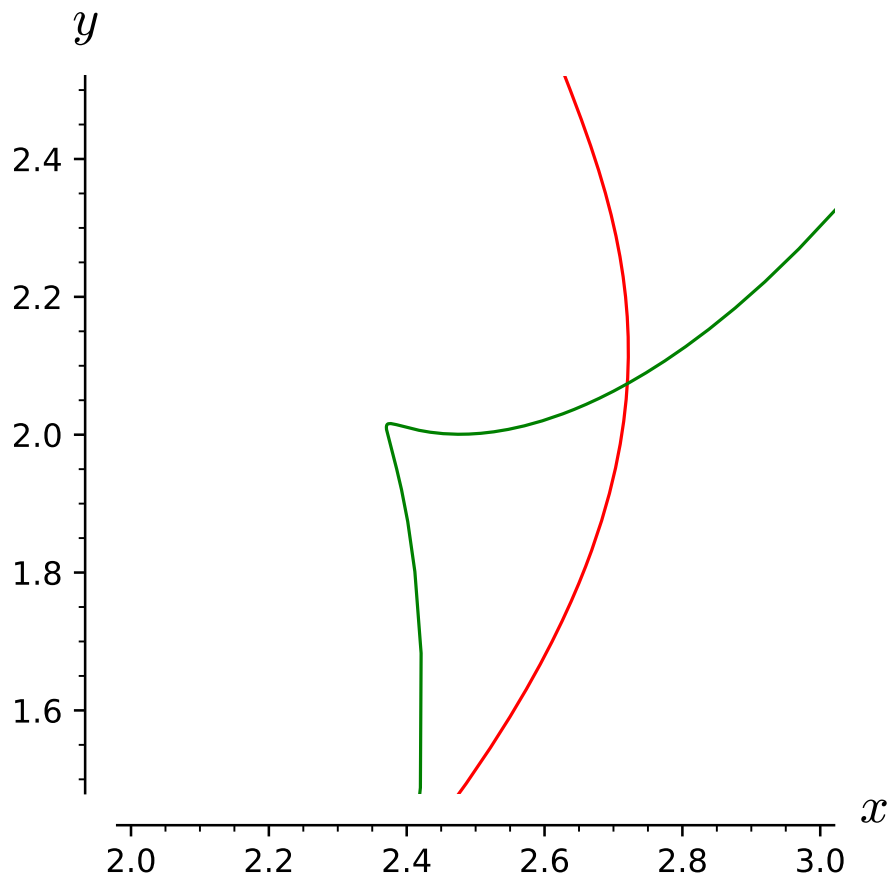


Рисунок 5.13 — Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Траектории трех тел при $0 < t < 2$, увеличенный график двух петелек.

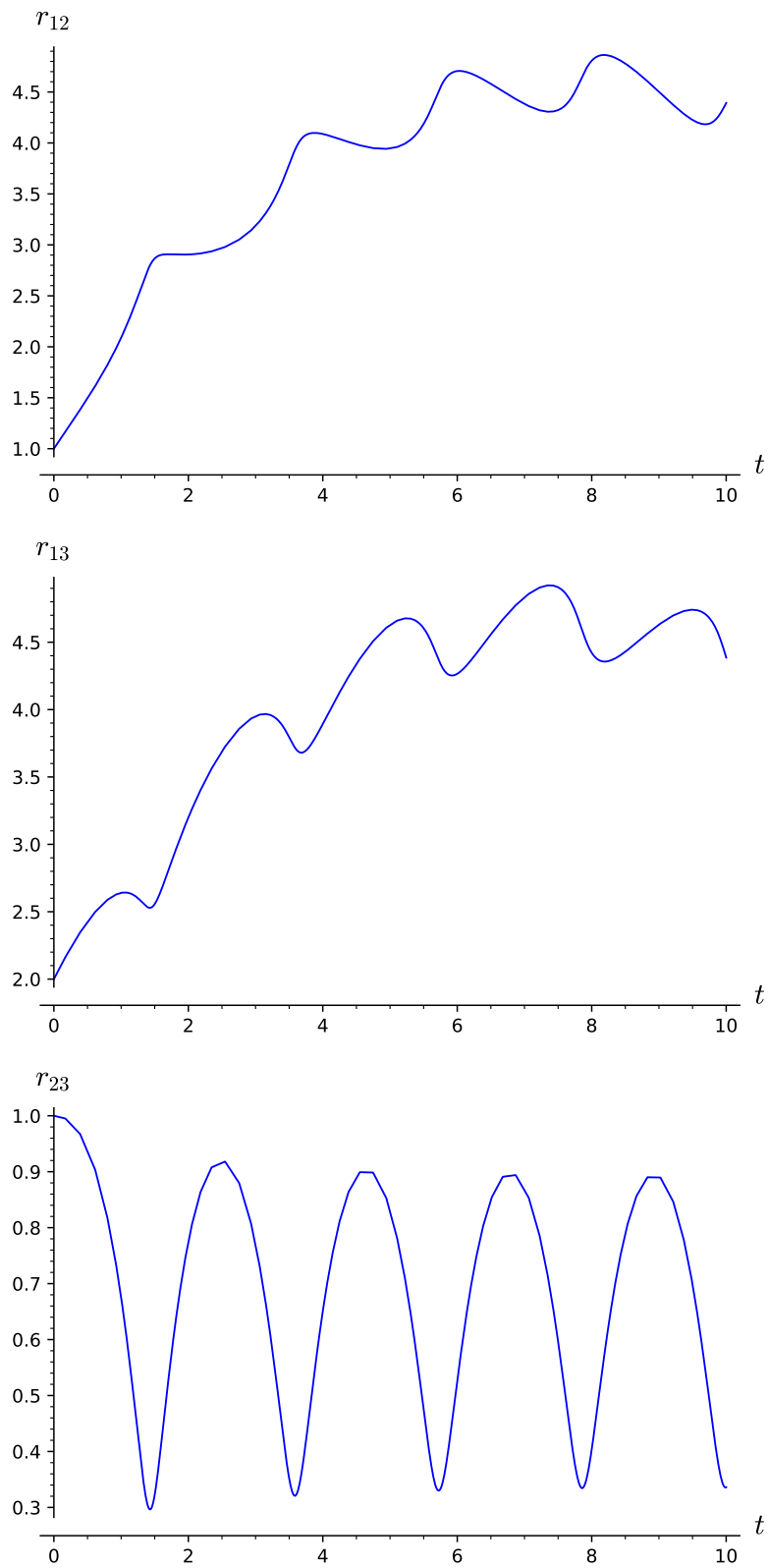


Рисунок 5.14 — Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Графики изменения расстояний между телами.

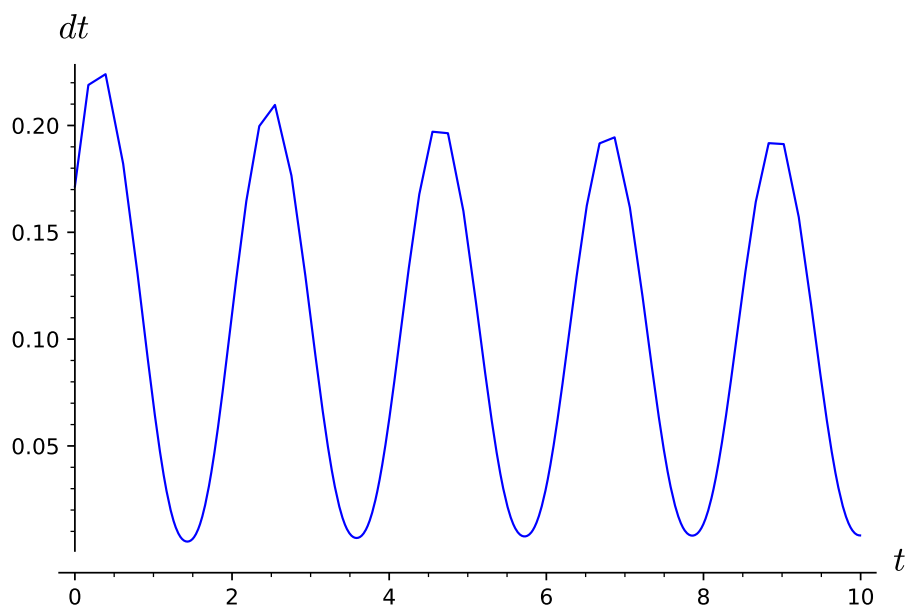


Рисунок 5.15 — Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения шага Δt .

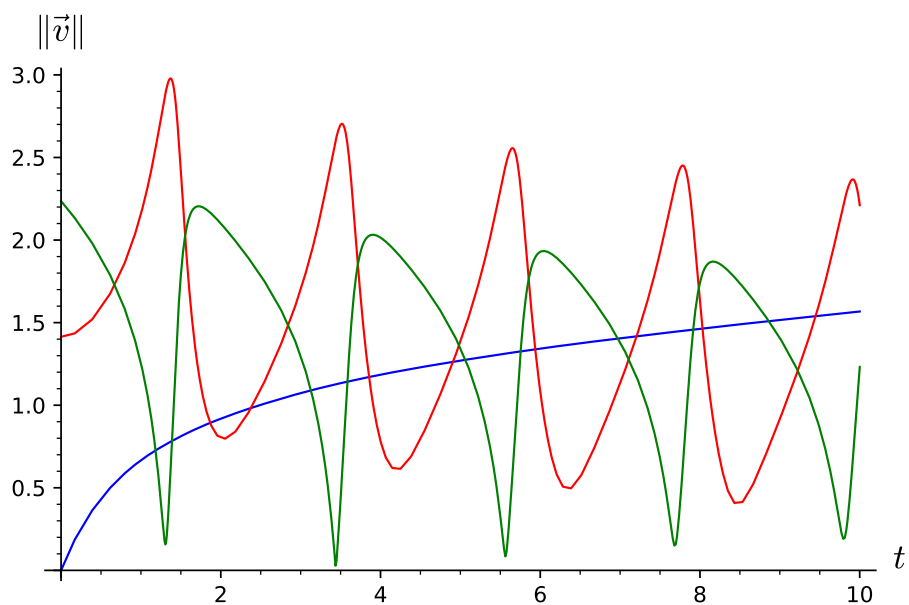


Рисунок 5.16 — Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения скоростей тел.

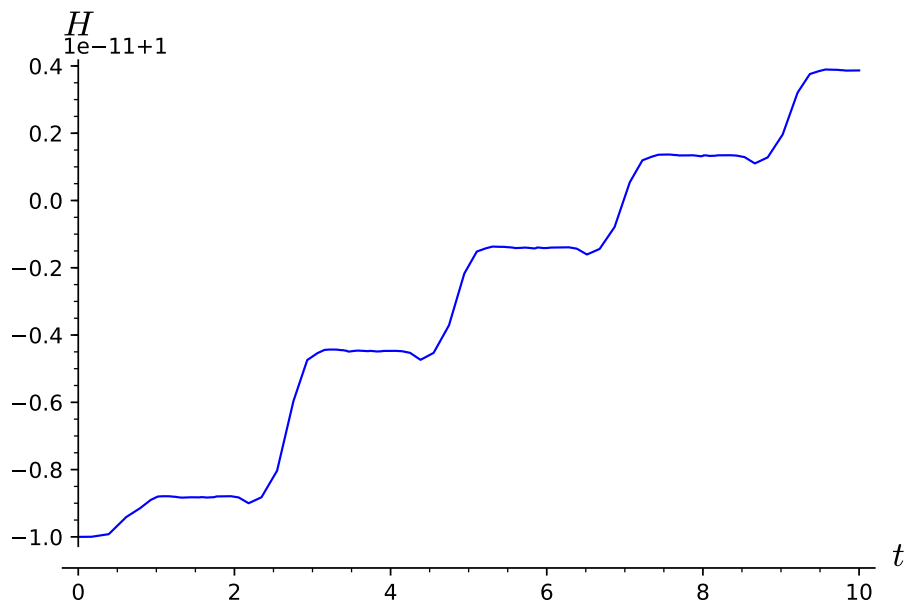


Рисунок 5.17 — Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения полной механической энергии.

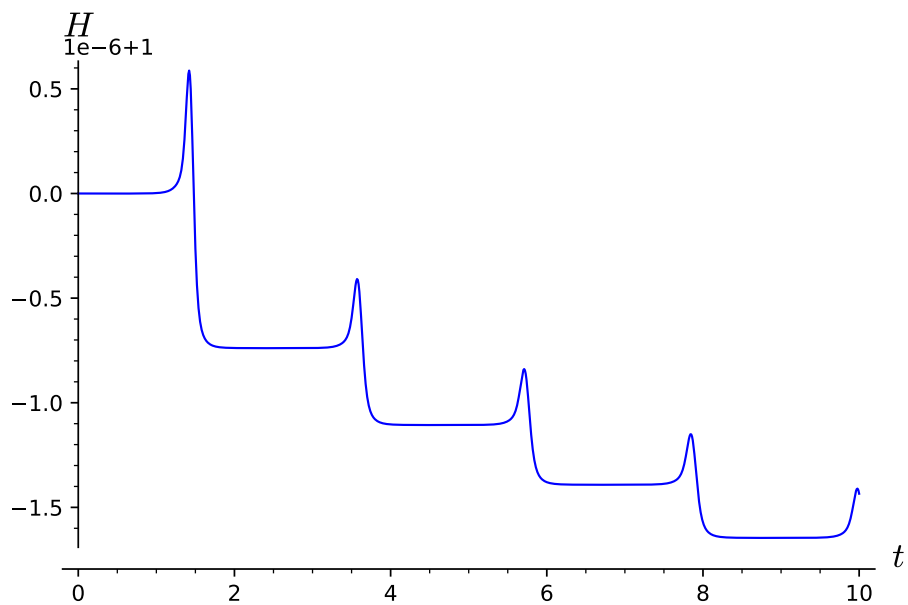


Рисунок 5.18 — Тест с петельками, явная схема Рунге-Кутты, шаг $\Delta t = 1/100$. График изменения полной механической энергии.

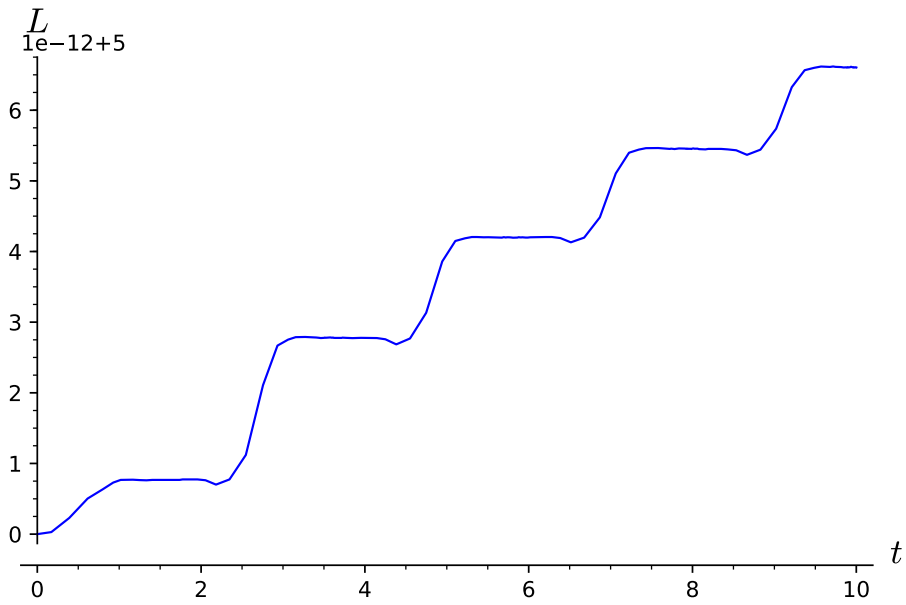


Рисунок 5.19 — Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения момента импульса системы.

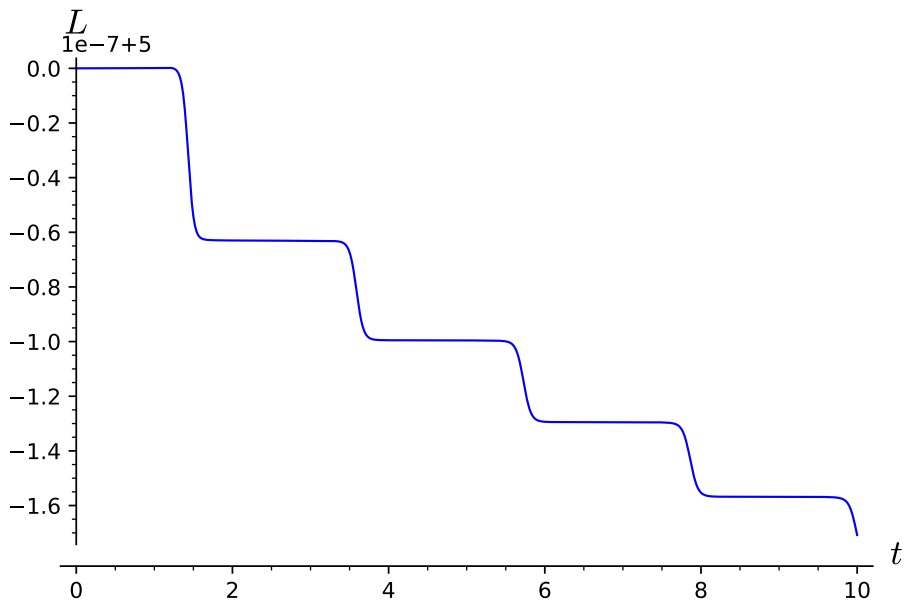


Рисунок 5.20 — Тест с петельками, явная схема Рунге-Кутты, шаг $\Delta t = 1/100$. График изменения момента импульса системы.

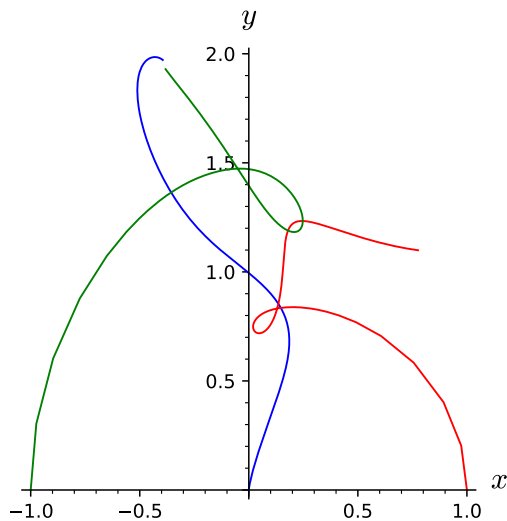


Рисунок 5.21 — Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Траектории трех тел при $0 < t < 2$.

Поскольку мы не знаем решения этой начальной задачи, традиционный подход к анализу решения задачи многих тел предлагает следить за изменением этих алгебраических интегралов движения, за полной механической энергией, в первую очередь. Заметив такое изменение, мы можем, вслед за автором большой статьи на Хабре [97], воскликнуть: «на более поздних этапах в системе происходят некие события, в результате которых резко подсакивают ошибки в основных параметрах системы (полной энергии, импульса и его момента)». При расчетах по нашей схеме ничего такого не может произойти в принципе. Однако, чем ближе тела подходят друг к другу, тем больше становится якобиан, и тем меньше становится шаг Δt .

Рассмотрим, напр., начальные данные, которые получаются заметным возмущением начальных данных, используемых в тесте Эйлера — мы увеличим скорость третьего тела в полтора раза. Иными словами, пусть в начальный момент тела лежат на прямой Ox , первое тело — в нуле, второе — точке $x = 1$, третье — в точке $x = -1$. Первое тело покоится, а начальные скорости двух других тел направлены по оси Oz и равны соответственно 1 и $-3/2$. Найдем численное решение этой начальной задаче по симплектической схеме с 2 стадиями и приметным шагом $h = 1$.

Траектории тел представлены на рис. 5.21. В процессе счета выясняется, что тела несколько раз проходят близко друг к другу (рис. 5.22). При этом наш алгоритм существенно уменьшал шаг при приближении тел друг к другу (см. рис. 5.23), что обеспечивало сходимость итерационного метода. При этом шаг

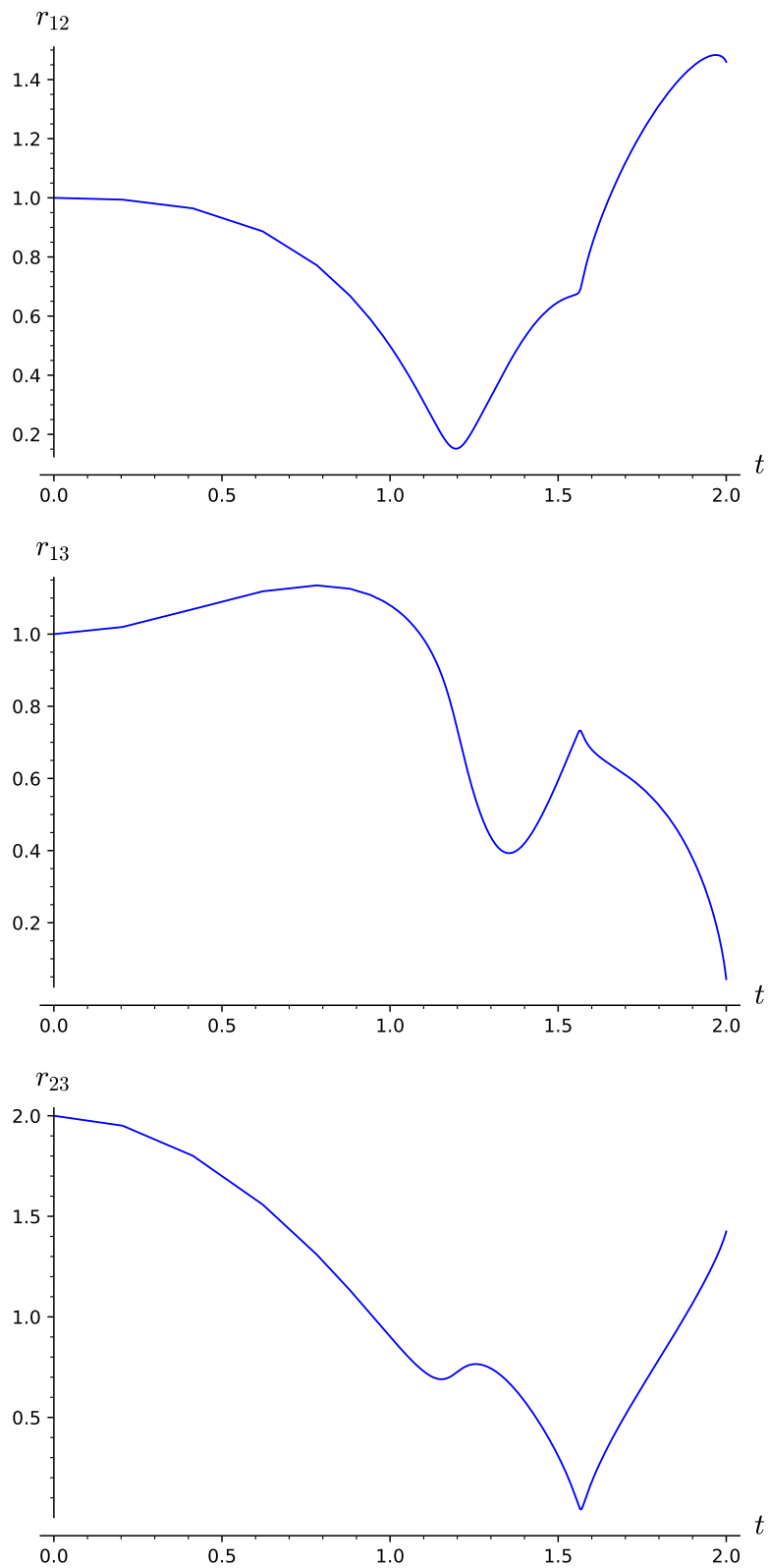


Рисунок 5.22 — Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Графики изменения расстояний между телами.

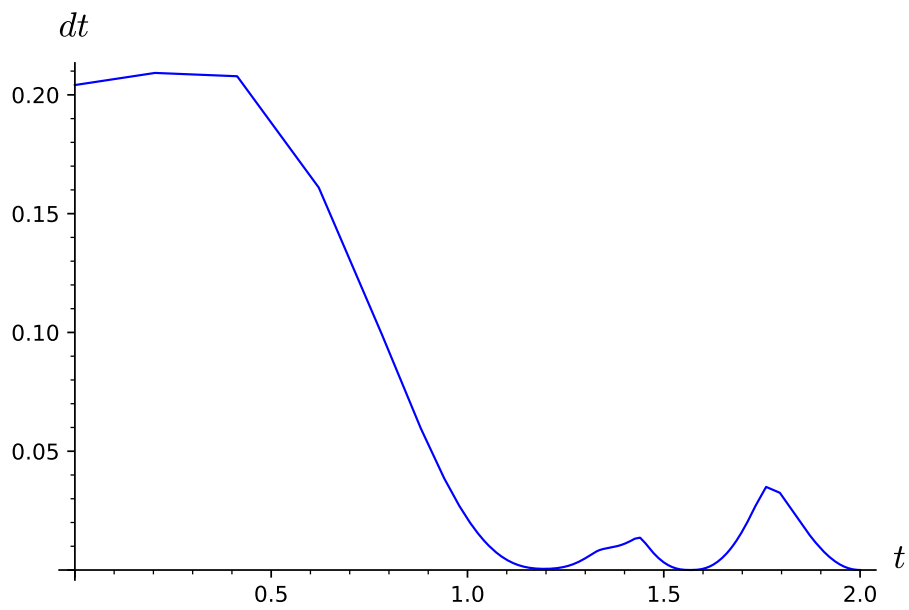


Рисунок 5.23 — Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения шага Δt .

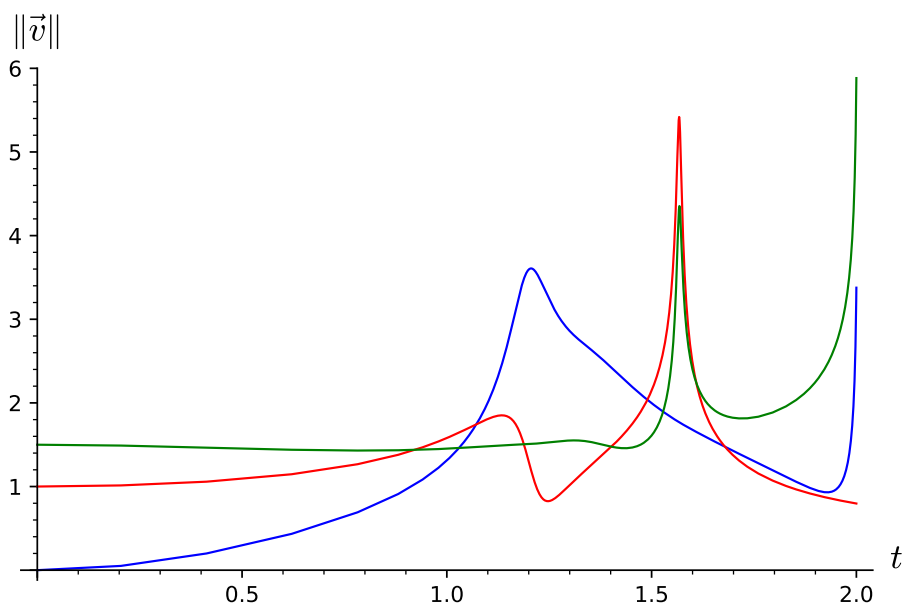


Рисунок 5.24 — Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения скоростей тел.

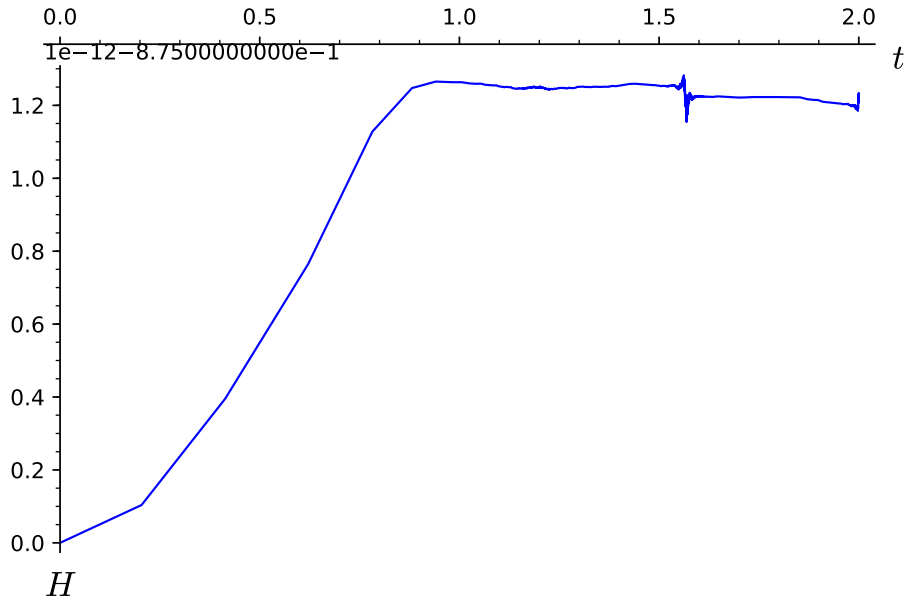


Рисунок 5.25 — Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения полной механической энергии.

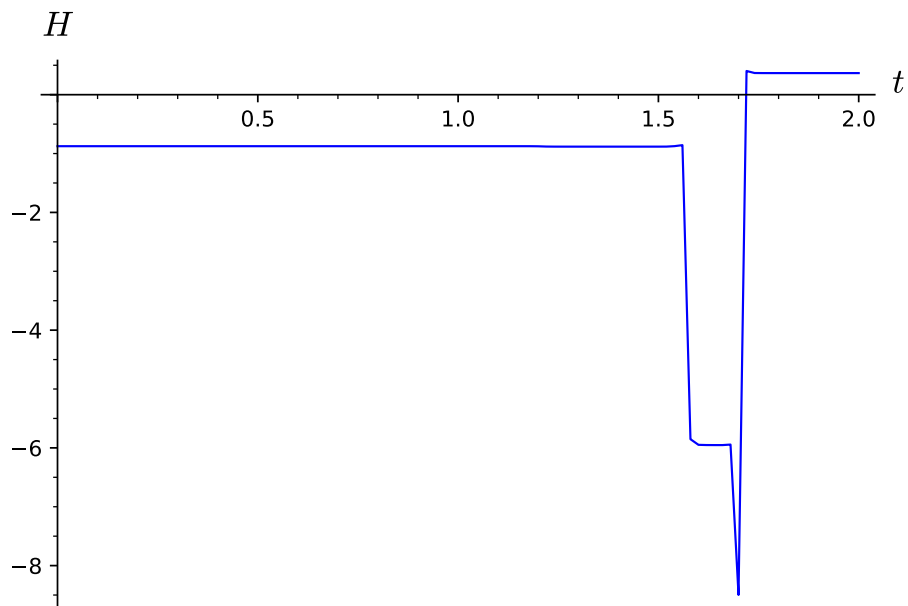


Рисунок 5.26 — Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схеме Рунге-Кутты 4-го порядка с постоянным шагом $\Delta t = 0.02$. График изменения полной механической энергии.

опускался до значений порядка $\Delta t = 4 \cdot 10^{-6}$. При уменьшении расстояния между телами возрастала их скорость, см. рис. 5.24.

Интегралы движение сохранялись в ожидаемых пределах, определяемых параметром ε . Наиболее заметно менялись полная механическая энергия H (рис. 5.25) и момент импульса L (рис. 5.27). Это изменение было порядка 10^{-12} и име-

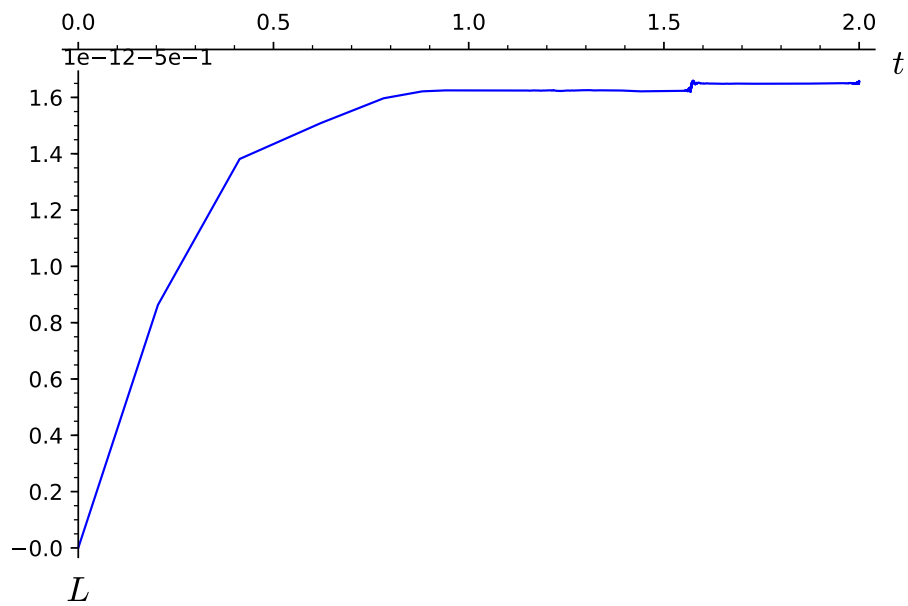


Рисунок 5.27 — Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения момента импульса системы.

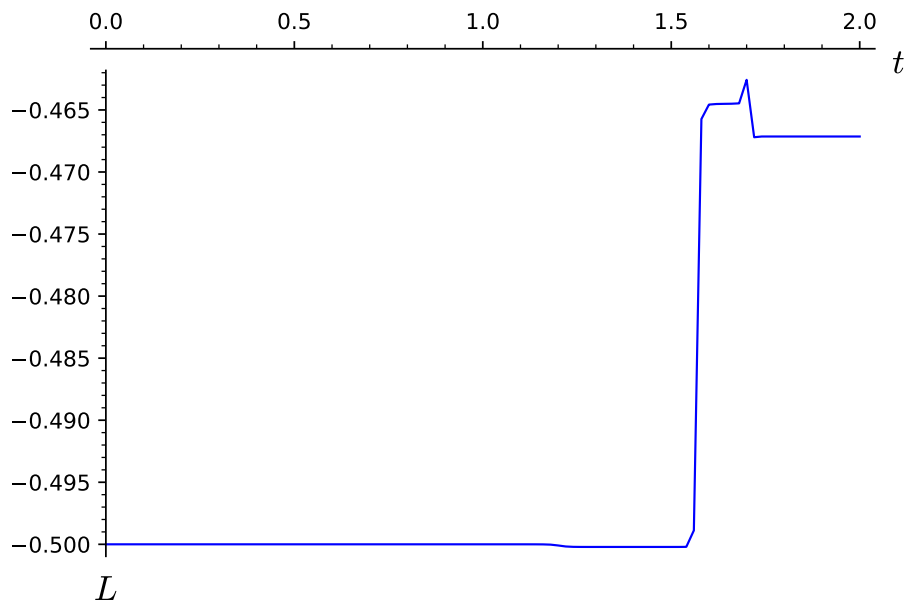


Рисунок 5.28 — Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схеме Рунге-Кутты 4-го порядка с постоянным шагом $\Delta t = 0.02$. График изменения момента импульса системы.

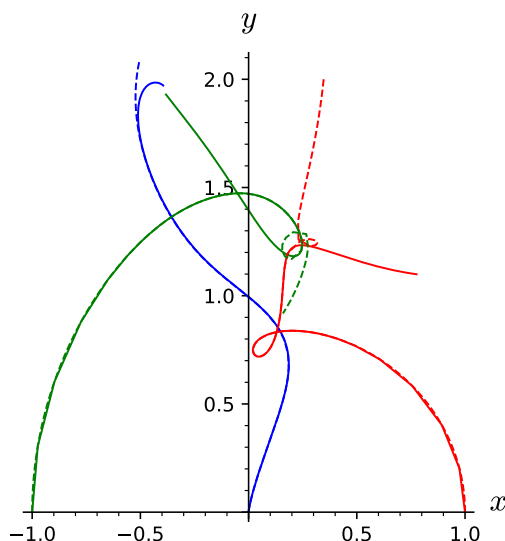


Рисунок 5.29 — Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу. Траектории трех тел при $0 < t < 2$, полученные по двухстадийной схеме с дополнительными переменными, адаптивный шаг $h = 1$, изображены сплошными линиями, а траектории, полученные по схеме Рунге-Куттты 4-го порядка с постоянным шагом $\Delta t = 0.02$, — пунктиром.

ло небольшой, но приметный на графике скачок при том значении t , когда тела подлетали друг к другу в первый раз.

Таким образом, тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, подтверждает, что расчеты с сохранением всех алгебраических интегралов могут быть выполнены, даже в том случае, когда начальные условия не выбраны особым образом. В то же время, он вскрывает принципиальный недостаток нашего алгоритма — применение метода последовательных итераций в том случае, когда тела подходят друг к другу на расстояния, которые всего на два порядка меньше исходных, происходит чрезмерное измельчение шага, вычисляемого по формуле (3.3). Для устранения этого недостатка, необходимо разработать замену для алгоритма 1, выполняемую, когда два тела близки друг к другу. Одновременный подлет трех тел друг к другу можно исключить из рассмотрения по тем же соображениям, по которым в теории Зундмана исключают тройные соударения [28].

Сравним найденное приближенное решение с решением, которое получается по явной схемой Рунге-Куттты 4-го порядка (rk4), примененного прямо к задаче многих тел в исходной постановке (4.1), если разделить рассматриваемый отрезок на 100 частей. На рис. 5.29 хорошо видно, что поначалу траектории, полученные двумя методами совпадают, но затем тела впервые подлетают близко друг к другу, энергии (рис. 5.26) и момент импульса системы (рис. 5.28) скачком меняются,

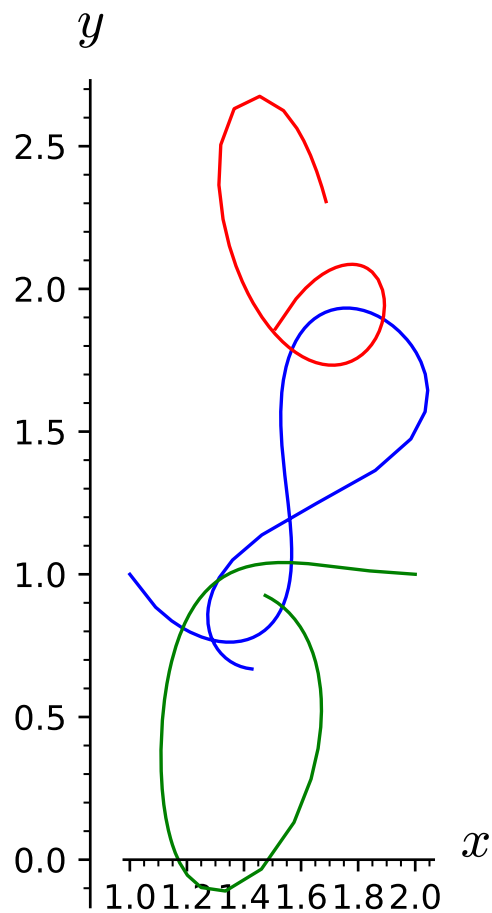


Рисунок 5.30 — Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Траектории трех тел при $0 < t < 2$.

а траектории отдаляются друг от друга, быстро теряя какое либо сходства друг с другом.

5.3.3 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу

Рассмотрим второй тест, в котором проявляются новые проблемы, связанные с применением явного метода Рунге-Кутты. При начальных данных

$$x_1 = 0, x_2 = 1.51, x_3 = 2, y_1 = 1, y_2 = 1.86, y_3 = 1,$$

и

$$u_1 = 0.51, u_2 = 0.5, u_3 = -0.99, v_1 = -0.86, v_2 = 0.85, v_3 = 0.02$$

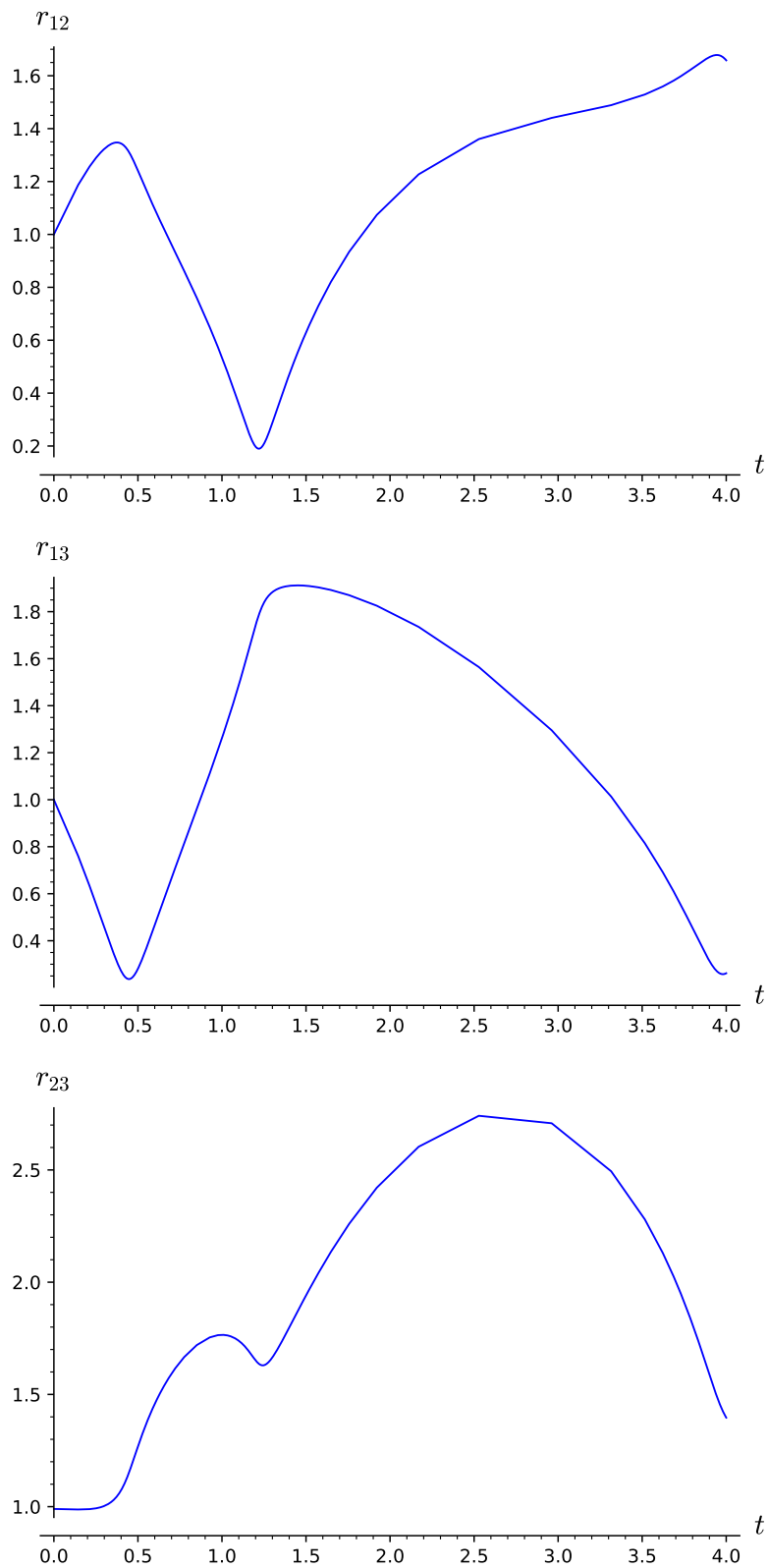


Рисунок 5.31 — Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Графики изменения расстояний между телами.

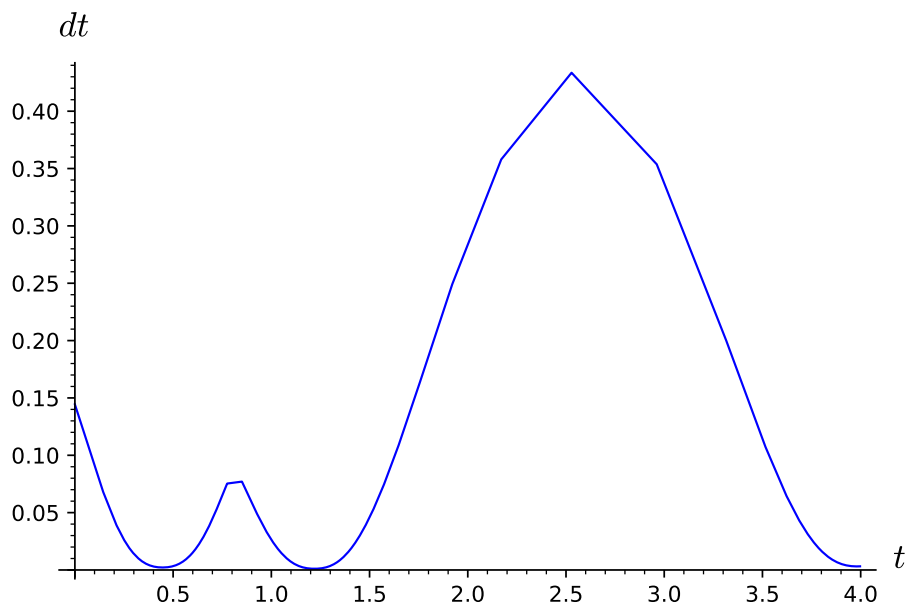


Рисунок 5.32 — Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двух-стадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения шага Δt .

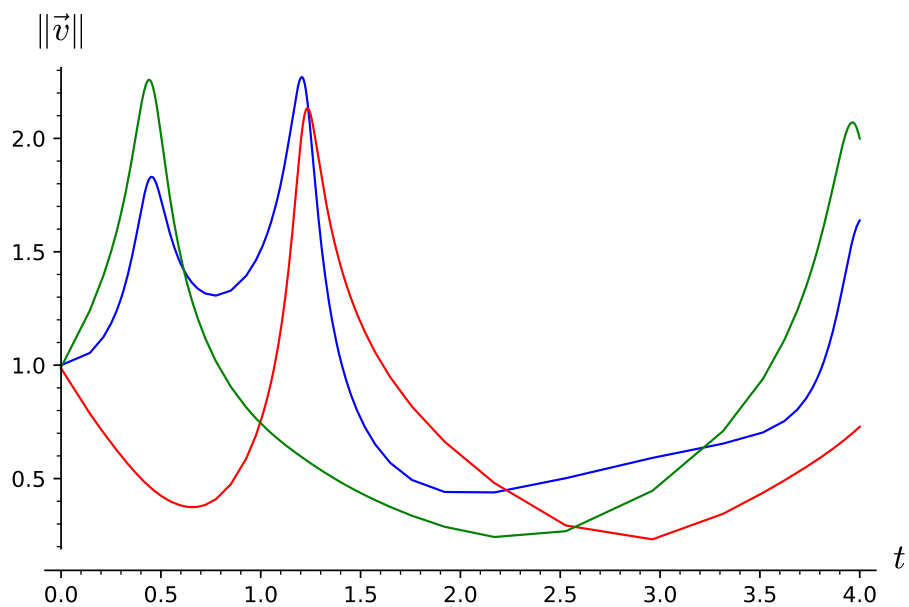


Рисунок 5.33 — Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двух-стадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения скоростей тел.

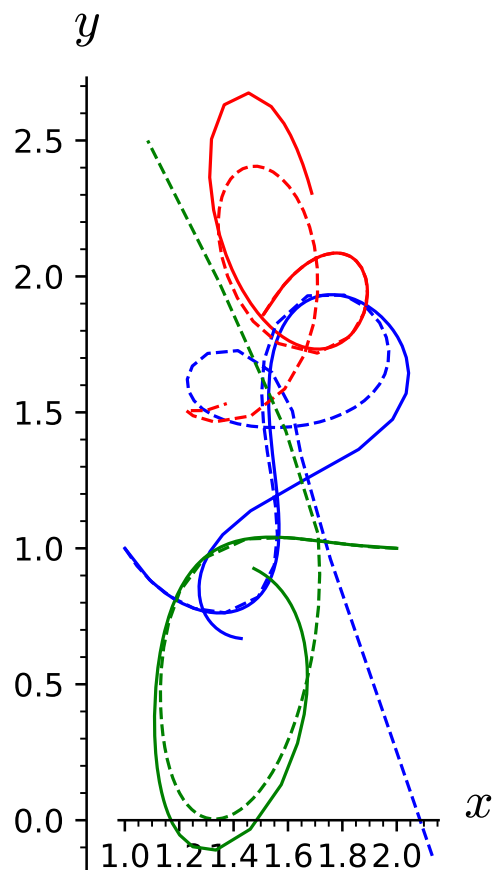


Рисунок 5.34 — Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу. Траектории трех тел при $0 < t < 2$, полученные по двухстадийной схеме с дополнительными переменными, адаптивный шаг $h = 1$, изображены сплошными линиями, а траектории, полученные по схеме Рунге-Куттты 4-го порядка, 51 точка, — пунктиром.

три тела движутся довольно долго близко друг к другу, при этом траектории много раз пересекаются (рис. 5.30), но расстояние между телами всегда остается больше 0.2 (рис. 5.31).

Сравним нашу схему с явной схемой Рунге-Куттты 4-го порядка (rk4), примененного прямо к задаче многих тел в исходной постановке (4.1), поделив отрезок на $N = 51$ частей. На рис. 5.34 хорошо видно, что с ростом времени траектории отдаляются друг от друга все заметнее с потерей какого либо сходства уже при $t \simeq 3$. Схема Рунге-Куттты не сохраняет интегралы движения, энергия и момент импульса меняются скачками (рис. 5.35, 5.36) хорошо видно, что полная энергия меняется скачками, самый большой из которых приходится на $t = 3.7$, когда траектории теряют сходства с найденными по нашей схеме. Положения этих скачков

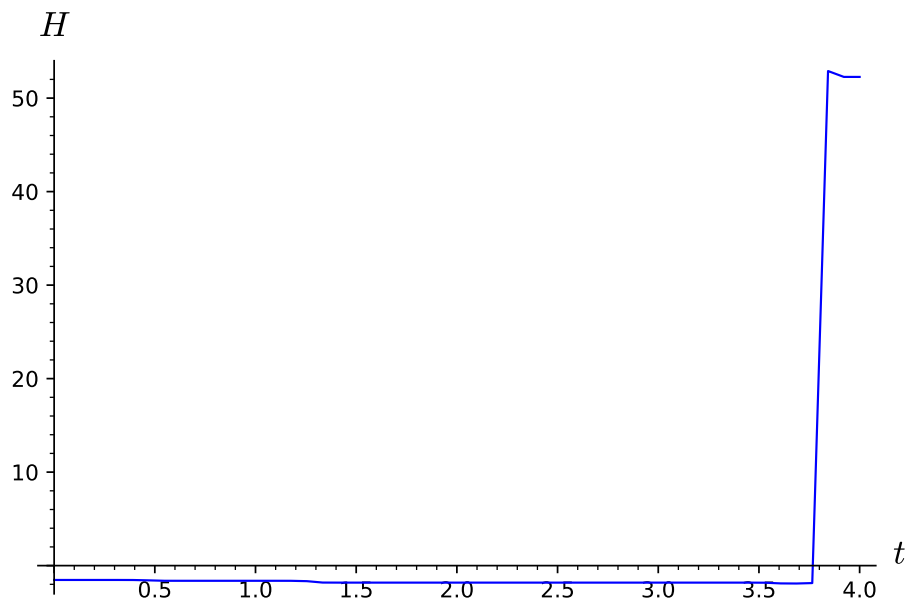


Рисунок 5.35 — Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схема Рунге-Куттты 4-го порядка, 51 точка. График изменения полной механической энергии.

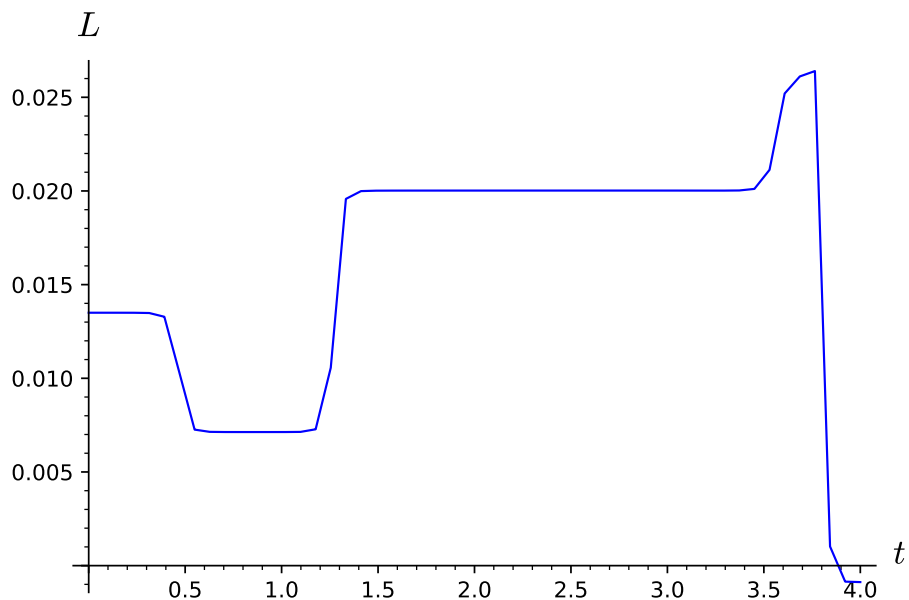


Рисунок 5.36 — Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схема Рунге-Куттты 4-го порядка, 51 точка. График изменения момента импульса системы.

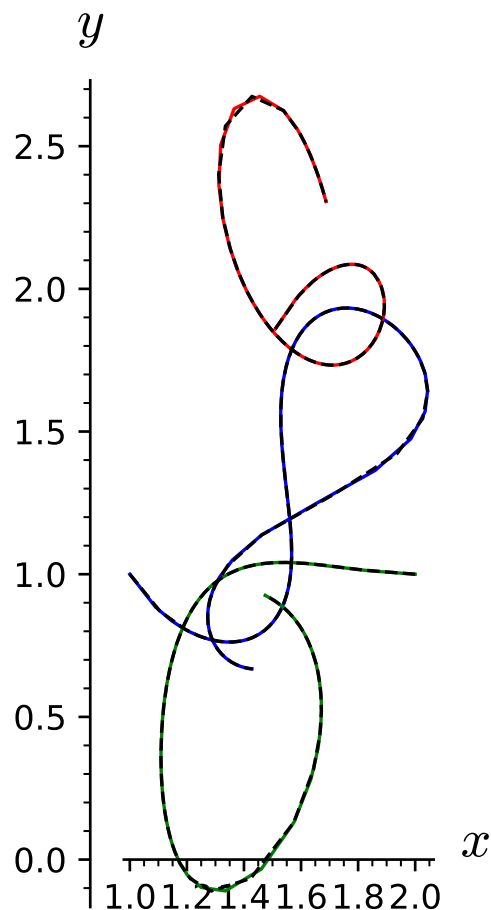


Рисунок 5.37 — Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу. Траектории трех тел при $0 < t < 2$, полученные по двухстадийной схеме с дополнительными переменными, адаптивный шаг $h = 1$, изображены сплошными линиями, а траектории, полученные по той же схеме, но без дополнительных переменных, — пунктиром.

и их высота приметно зависит от выбора шага. Мы специально подобрали N так, чтобы скачки нельзя было связать со сближением тел.

Этот пример прекрасно демонстрирует главный недостаток явной схемы Рунге-Кутты. Из-за несохранения энергии внезапно происходят резкие изменение интегралов движения и численное решение перескакивает на другую интегральную кривую, из-за чего этот метод нельзя использовать при расчетах на большие времена, во всяком случае без специально разработанного контроля точности. Что именно запускает этот процесс не ясно, во всяком случае в районе $t = 3.7$ тела находятся достаточно далеко друг от друга. Предложенная нами схема принципиально свободна от этого недостатка.

Посмотрим теперь на то, что дает введение дополнительных переменных. Применим двухстадийную симплектическую схему Рунге-Кутты к задаче 3-х тел

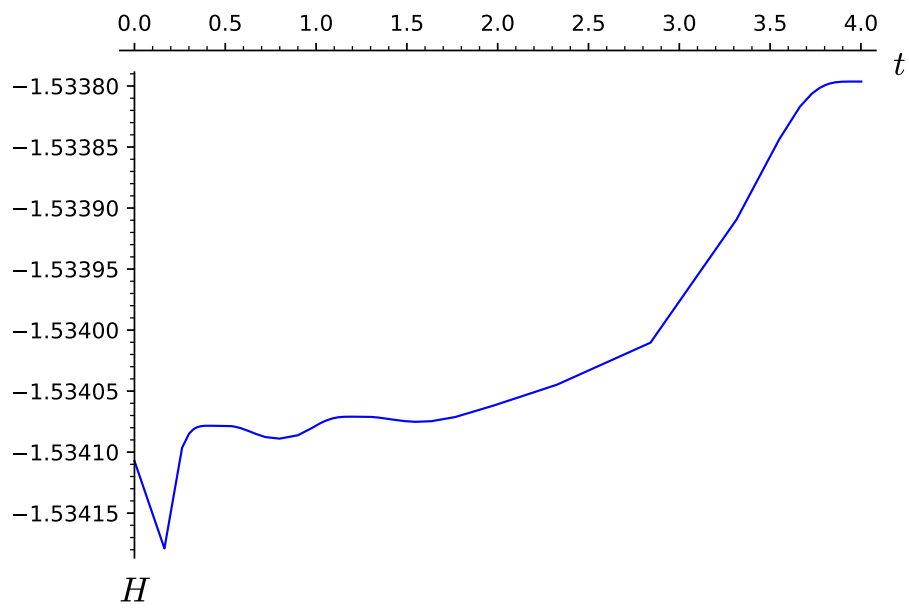


Рисунок 5.38 — Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схема с двумя стадиями без введения дополнительных переменных, $h = 1$. График изменения полной механической энергии.

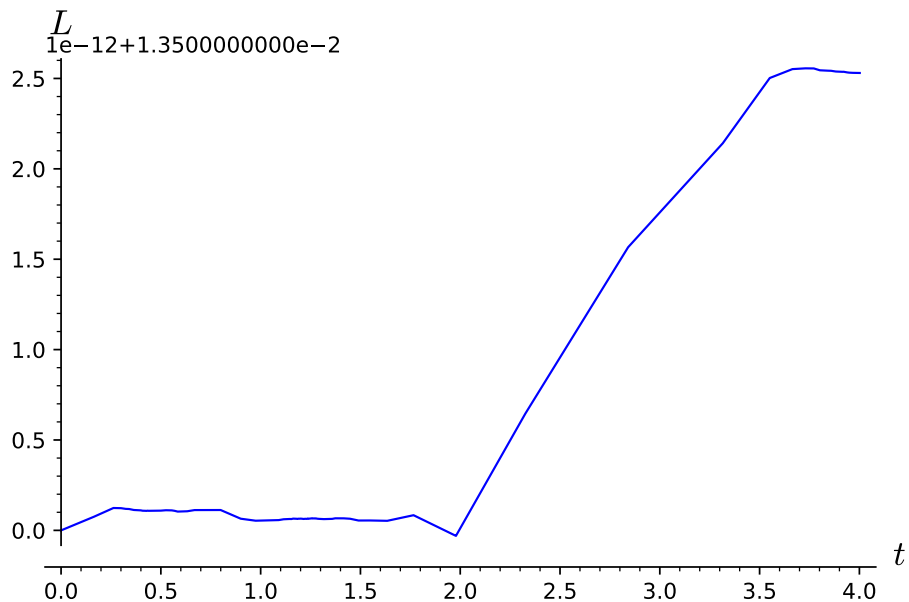


Рисунок 5.39 — Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схема с двумя стадиями без введения дополнительных переменных, $h = 1$. График изменения момента импульса системы.

в исходной постановке (4.1). Результаты вычислений, равно как и затраты по времени их получения, оказались весьма близкими (см. рис. 5.37). Линейные и квадратичные интегралы движения, напр., момент импульса L сохраняются на уровне 10^{-11} (рис. 5.39), как и предсказывает теорема 1 Купера. Существенная разница проявляется лишь при анализе изменения энергии (рис. 5.38): при расчетах по нашему методу изменения энергии оставалось в районе 10^{-12} , а при расчетах по той же схеме, но без введения дополнительных переменных энергия почти монотонно растет в 3-м знаке после запятой. Таким образом, мы добиваемся гарантированного удержания энергии на заданном уровне, лишь немного усложнив сам метод.

5.4 Заключение

Компьютерные эксперименты подтвердили возможность организации вычислений по таким схемам, обеспечивающей поддержание сохранения всех алгебраических интегралов с заданной точностью. Поскольку схема не является явной, на каждом шаге приходится решать численно систему нелинейных уравнений, из-за чего добиться точного сохранения интегралов невозможно.

Предложенный метод существенно сложнее явного метода Рунге-Кутты, недостатки которого хорошо проявились в тесте, когда при вычислении по методу rk4 энергия внезапно и без видимой причины резко меняется. По затрату ресурсов наш метод близок к симплектическим методам Рунге-Кутты. В сравнении с ним, мы добиваемся гарантированного удержания энергии на заданном уровне ценой малоприметного усложнения метода.

Ряд экспериментов показал, что сохранение одной алгебраической структуры (всех алгебраических интегралов) не влечет сохранения других алгебраических структур точного решения, в частности замкнутые траектории оказываются разомкнутыми и перестают быть алгебраическими. Исключение представляет случай Лагранжа, в котором приближенное решение, найденное по нашей схеме, наследует свойства точного решения, в т.ч. траектория остается окружностью.

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

В настоящем диссертационном исследовании для задачи многих тел были построены разностные схемы, которые сохраняют все ее алгебраические интегралы точно и инвариантна относительно перестановок тел. Предложенный способ позволяет строить схемы сколь угодно большого порядка аппроксимации, в тексте выписаны явно схемы 2, 4 и 6 порядков. Схема 2-го порядка — схема средней точки — инвариантна и относительно обращения времени.

На основе этих разностных схем был разработан численный метод исследования моделей движения многих тел, этот метод был реализован в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения компьютерных экспериментов в пакете `fdm for sage`.

Компьютерные эксперименты подтвердили, что предложенный метод позволяет удерживать изменение классических алгебраические интегралы задачи многих тел на заданном уровне, а по затрату ресурсов близок к симплектическим методам Рунге-Кутты.

Правильность теоретических предсказаний относительно порядков аппроксимации была проверена по методу Ричардсона-Калиткина, для чего в пакет `fdm for sage` были добавлена оригинальная реализация этого метода.

В заключение автор выражает благодарность и большую признательность научному руководителю Малых М. Д. за поддержку, помощь, обсуждение результатов и научное руководство. Также автор благодарит проф. Севастьянова Л. А. за постоянное внимание к работе и авторов шаблона `*Russian-Phd-LaTeX-Dissertation-Template*` за помощь в оформлении диссертации.

Список литературы

1. *Уиттекер, Э. Т.* Аналитическая динамика [Текст] / Э. Т. Уиттекер. — 2-е изд. — Москва : УРСС, 2004.
2. *Геворкян, М. Н.* Анализ составных симплектических методов и симплектических методов Рунге-Кутта на длительных интервалах времени [Текст] : дис. ... канд. / Геворкян М. Н. — Российский университет дружбы народов, 2013.
3. *Blinkov, Y. A.* On computer algebra aided numerical solution of ODE by finite difference method [Текст] / Y. A. Blinkov, V. P. Gerdt // International Conference Polynomial Computer Algebra / под ред. N. N. Vassiliev. — St. Peterburg : VVM, 2019. — С. 29—31.
4. Вычисления на квазиравномерных сетках [Текст] / Н. Н. Калиткин [и др.]. — Москва : Физматлит, 2005.
5. *Belov, A. A.* Geometrically adaptive grids for stiff Cauchy problems [Текст] / A. A. Belov, N. N. Kalitkin, I. P. Poshivaylo // Doklady Mathematics. — 2016. — Т. 93, № 1. — С. 112—116.
6. *Belov, A. A.* Nonlinearity Problem in the Numerical Solution of Superstiff Cauchy Problems [Текст] / A. A. Belov, N. N. Kalitkin // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2016. — Т. 8, № 6. — С. 638—650.
7. Explicit methods for integrating stiff Cauchy problems [Текст] / A. A. Belov [и др.] // Doklady Mathematics. — 2019. — Т. 99, № 2. — С. 230—234.
8. *Корпусов, М. О.* Аналитико-численное исследование процесса горения в нелинейной среде [Текст] / М. О. Корпусов, Д. В. Лукьяненко, А. Д. Некрасов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2018. — Т. 58, № 9. — С. 1553—1563.
9. О разрушении решений одного полного нелинейного уравнения ионно-звуковых волн в плазме с некоэрцитивными нелинейностями [Текст] / М. О. Корпусов [и др.] // Изв. РАН. Сер. матем. — 2018. — Т. 82, № 2. — С. 43—78.
10. *Васильев, Н. Н.* Вычислительная сложность задачи Коши для задачи трёх тел [Текст] / Н. Н. Васильев, Д. А. Павлов // Зап. научн. сем. ПОМИ. — 2016. — Т. 448. — С. 80—95.

11. *Сурис, Ю. Б.* Сохранение симплектической структуры при численном решении гамильтоновых систем [Текст] / Ю. Б. Сурис // Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений: сборник научных трудов / под ред. С. С. Филиппов. — Москва : Ин-т прикладной математики АН СССР, 1988. — С. 138—144.
12. *Suris, Y. B.* Hamiltonian methods of Runge-Kutta type and their variational interpretation [Текст] / Y. B. Suris // Math. Model. — 1990. — Т. 2. — С. 78—87.
13. *Cooper, G. J.* Stability of Runge–Kutta methods for trajectory problems [Текст] / G. J. Cooper // IMA J. Numer. Anal. — 1987. — Т. 7. — С. 1—13.
14. *Hairer, E.* Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations [Текст] / E. Hairer, G. Wanner, C. Lubich. — Berlin Heidelberg New York : Springer, 2000.
15. *Юй Ин.* Численно-аналитические методы в задачах математического моделирования [Текст] : дис. ... канд. / Юй Ин. — Российский университет дружбы народов, 2020.
16. *Greenspan, D.* Completely Conservative and Covariant Numerical Methodology for N-Body Problems With Distance-Dependent Potentials [Текст] / D. Greenspan. — 1992. — eprint: <http://hdl.handle.net/10106/2267>. — Technical Report no. 285.
17. *Greenspan, D.* Completely conservative, covariant numerical methodology [Текст] / D. Greenspan // Computers & Mathematics with Applications. — 1995. — Т. 29, № 4. — С. 37—43.
18. *Greenspan, D.* Completely conservative, covariant numerical solution of systems of ordinary differential equations with applications [Текст] / D. Greenspan // Rendiconti del Seminario Matematico e Fisico di Milano. — 1995. — Т. 65. — С. 63—87.
19. *Greenspan, D.* N-Body Problems and Models [Текст] / D. Greenspan. — World Scientific, 2004.
20. *Simo, J. C.* Assessment of Energy-momentum and Symplectic Schemes for Stiff Dynamical Systems [Текст] / J. C. Simo, M. A. González // American Society of Mechanical Engineers. — 1993.

21. *Graham, E.* A note on the equivalence of two recent time-integration schemes for N-body problems [Текст] / E. Graham, G. Jelenić, M. A. Crisfield // Communications in Numerical Methods in Engineering. — 2002. — Т. 18. — С. 615—620.
22. *Yang, X.* Efficient linear schemes with unconditional energy stability for the phase field elastic bending energy model [Текст] / X. Yang, L. Ju // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2016. — Ноябрь. — Т. 315.
23. *Yang, X.* Linear and Unconditionally Energy Stable Schemes for the binary Fluid-Surfactant Phase Field Model [Текст] / X. Yang, L. Ju // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2017. — Янв. — Т. 318.
24. *Маршал, К.* Задача трех тел [Текст] / К. Маршал. — Москва-Ижевск, R & C, 2004.
25. *Гонсалес, Л.* О новом пакете для численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений в Sage [Текст] / Л. Гонсалес, М. Д. Малых // Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем. Материалы Всероссийской конференции с международным участием. Москва, РУДН, 16–20 апреля 2022 г. — Москва : РУДН, 2022. — URL: <https://events.rudn.ru/event/136/>.
26. *Голубев, В. В.* Лекции по интегрированию уравнений движения тяжелого твердого тела около неподвижной точки [Текст] / В. В. Голубев. — Москва : ГТТИ, 1953.
27. *Goriely, A.* Integrability and Nonintegrability of Dynamical Systems [Текст] / A. Goriely. — Singapore; River Edge, NJ : World Scientific, 2001.
28. *Siegel, C. L.* Lectures on Celestial Mechanics [Текст] / C. L. Siegel, J. Moser. — Springer, 1995.
29. *Bruns, H.* Über die Integrale der Vielkörper-Probleme [Text] / H. Bruns // Acta math. — 1887. — Vol. 11. — P. 25—96.
30. *Painlevé, P.* Mémoire sur les intégrales du problème des n corps [Text] / P. Painlevé // Œuvres de Paul Painlevé. Vol. 2. — 1975. — P. 666—699.
31. *Полубаринова-Кочина, П. Я.* Об однозначных решениях и алгебраических интегралах задачи о вращении тяжелого твердого тела около неподвижной точки [Текст] / П. Я. Полубаринова-Кочина // Движение твердого тела вокруг неподвижной точки. — Москва-Ленинград : АН СССР, 1940. — С. 157—186.

32. *Königsberger, L.* Die Principien der Mechanik [Текст] / L. Königsberger. — Leipzig : Teubner, 1901.
33. *Лагутинский, М. Н.* Приложение полярных операций к интегрированию обыкновенных дифференциальных уравнений в конечном виде [Текст] / М. Н. Лагутинский // Сообщ. Харьков. матем. общ. Вторая сер. — 1911. — Т. 12. — С. 111—243.
34. *Лагутинский, М. Н.* О некоторых полиномах и связи их с алгебраическим интегрированием обыкновенных дифференциальных алгебраических уравнений [Текст] / М. Н. Лагутинский // Сообщ. Харьков. матем. общ. Вторая сер. — 1912. — Т. 13. — С. 200—224.
35. *Christopher, C.* Multiplicity of Invariant Algebraic Curves in Polynomial Vector Fields [Text] / C. Christopher, J. Llibre, J. Vitório Pereira // Pacific J. Math. — 2007. — Vol. 229, no. 1. — P. 63—117.
36. *Добровольский, В. А.* Михаил Николаевич Лагутинский (1871 – 1915) [Текст] / В. А. Добровольский, Ж.-М. Стрельцын, Н. В. Локоть // Историко-математические исследования. — 2001. — Т. 6. — С. 111—127. — in Russian.
37. *Malykh, M. D.* Lagutinski.sage, ver. 1.5. [Text] / M. D. Malykh, Y. Ying ; RUDN University. — 2016. — URL: <http://malykhmd.neocities.org>.
38. *Malykh, M. D.* On M.N. Lagutinski Method for Integration of Ordinary Differential Equations [Text] / M. D. Malykh // International Conference Polynomial Computer Algebra-2016. — 2016. — P. 57—58. — in Russian.
39. *Малых, М. Д.* Об отыскании рациональных интегралов систем обыкновенных дифференциальных уравнений по методу М.Н. Лагутинского [Текст] / М. Д. Малых // Вестник НИЯУ МИФИ. — 2016. — Т. 5, № 24. — С. 327—336.
40. *Малых, М. Д.* О применении метода М. Н. Лагутинского к интегрированию дифференциальных уравнений 1-го порядка. Часть 1. Отыскание алгебраических интегралов [Text] / М. Д. Малых // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2017. — Vol. 25, no. 2. — P. 103—112. — in Russian.
41. *Малых, М. Д.* Методика отыскания алгебраических интегралов дифференциальных уравнений первого порядка [Текст] / М. Д. Малых, Ю. Ин // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Математика, информатика, физика. — 2018. — Т. 26, № 3. — С. 285—291.

42. Глазков, С. А. Алгоритмы решения дифференциальных уравнений в Math Partner [Текст] / С. А. Глазков // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. — 2018. — Т. 23, № 122. — С. 250—260.
43. Malaschonok, G. I. Calculation of integrals in MathPartner [Текст] / G. I. Malaschonok, A. V. Seliverstov // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. — 2021. — Т. 29, № 4. — С. 337—346. — URL: <https://journals.rudn.ru/miph/article/view/29427>.
44. Сикорский, Ю. С. Элементы теории эллиптических функций с приложениями к механике [Текст] / Ю. С. Сикорский. — М.-Л. : ОНТИ, 1936.
45. Прасолов, В. В. Эллиптические функции и алгебраические уравнения [Текст] / В. В. Прасолов, Ю. Соловьев. — Москва : Факториал, 1997.
46. Крылов, А. Н. Лекции о приближенных вычислениях [Текст] / А. Н. Крылов. — 2-е изд. — Ленинград : Изд-во АН СССР, 1933.
47. Runge, C. Vorlesungen über numerisches Rechnen [Текст] / C. Runge, H. König. — Springer-Verlag, 2013.
48. Скарборо, Д. Численные методы математического анализа [Текст] / Д. Скарборо. — М.-Л. : ГТТИ, 1934.
49. Калиткин, Н. Н. Численные методы [Текст] / Н. Н. Калиткин. — 2-е изд. — БХВ-Петербург, 2011.
50. Hairer, E. Solving Ordinary Differential Equations I [Текст] : Nonstiff Problems / E. Hairer, G. Wanner, S. P. Nørsett. — 3-е изд. — Springer, 2008.
51. SciPy documentation [Text]. — 2022. — URL: <https://docs.scipy.org>.
52. Ketcheson, D. I. A comparison of high order explicit Runge-Kutta, extrapolation, and deferred correction methods in serial and parallel [Text] / D. I. Ketcheson, U. bin Waheed // CAMCoS. — 2014. — Vol. 9, no. 2. — P. 175—200. — eprint: <https://www.davidketcheson.info/publications.html>.
53. Stein, W. A. Sage Mathematics Software (Version 6.7) [Text] / W. A. Stein ; The Sage Development Team. — 2015. — URL: <http://www.sagemath.org>.
54. Butcher, J. On Runge-Kutta processes of high order [Text] / J. Butcher // J. Austral. Math. Soc. — 1964. — Vol. 4, no. 2. — P. 179—194.

55. *Ying, Y.* The symbolic problems associated with Runge-Kutta methods and their solving in Sage [Text] / Y. Ying // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. — 2019. — Vol. 27, no. 1. — P. 33—41.
56. *Хашин, С. И.* Численное решение уравнений Бутчера [Текст] / С. И. Хашин // Вестник ИвГУ. — 2000. — № 3. — С. 155—164.
57. *Хаммуд, Г. М.* Шестимерное семейство 6-шаговых методов Рунге — Кутта порядка 5 [Текст] / Г. М. Хаммуд, С. И. Хашин // Науч. тр. ИвГУ. Математика. — 2001. — № 4. — С. 114—122.
58. *Хашин, С. И.* Альтернативная форма уравнений Бутчера [Текст] / С. И. Хашин // Вестник ИвГУ. — 2007. — № 3. — С. 94—103.
59. *Хашин, С. И.* A Symbolic-Numeric Approach to the Solution of the Butcher Equations [Текст] / С. И. Хашин // Canadian Applied Mathematics Quarterly. — 2009. — Т. 17, № 3. — С. 555—569.
60. *Хашин, С. И.* Три упрощающих предположения для методов Рунге-Кутта [Текст] / С. И. Хашин // Вестник ИвГУ. — 2012. — № 2. — С. 142—150.
61. *Stone, P.* Maple worksheets on the derivation of Runge-Kutta schemes [Text] / P. Stone. — 2021. — URL: <http://www.peterstone.name/Maplepgs/RKcoeff.html>.
62. A novel energy-conserving scheme for eight-dimensional systems [Текст] / S. Hu [и др.]. — 10.2019. — URL: <https://arxiv.org/abs/1910.10353>.
63. *Sanz-Serna, J.* Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems [Текст] / J. Sanz-Serna // BIT Numerical Mathematics. — 1988. — Т. 28, № 4. — С. 877—883.
64. *Lasagni.* Canonical runge-kutta methods [Текст] / Lasagni // Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP). — 1988. — Т. 39, № 6. — С. 952—953.
65. *Suris, Y. B.* The canonicity of mappings generated by Runge-Kutta type methods when integrating the systems ... [Текст] / Y. B. Suris // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1989. — Т. 29, № 1. — С. 138—144.
66. *Budd, C. J.* Geometric integration and its applications [Текст] / C. J. Budd, M. D. Piggott. — 2001.
67. *Kinoshita, H.* Symplectic integrators and their application to dynamical astronomy [Текст] / H. Kinoshita, H. Yoshida, H. Nakai // Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy. — 1990. — Т. 50, № 1. — С. 59—71.

68. *Forest, E.* Fourth-order symplectic integration [Текст] / E. Forest, R. D. Ruth // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. — 1990. — Т. 43, № 1. — С. 105—117.
69. *Suris, Y. B.* Preservation of symplectic structure in the numerical solution of Hamiltonian systems (in Russian), Akad [Текст] / Y. B. Suris // *Nauk SSSR, Inst. Prikl. Mat., Moscow*. — С. 148—160.
70. *Sanz-Serna, J. M.* Symplectic Runge–Kutta Schemes for Adjoint Equations, Automatic Differentiation, Optimal Control, and More [Текст] / J. M. Sanz-Serna // *SIAM review*. — 2016. — Т. 58. — С. 3—33.
71. *Cong, Y. H.* Diagonally Implicit Symplectic Runge-Kutta Methods with High Algebraic and Dispersion Order [Текст] / Y. H. Cong, C. X. Jiang // *Scientific World Journal*. — 2014.
72. Highly efficient invariant-conserving explicit Runge-Kutta schemes for the nonlinear Hamiltonian differential equations [Текст] / H. Zhang [и др.] // *Researchgate*. — 2019. — Ноябрь.
73. On Explicit Difference Schemes for Autonomous Systems of Differential Equations on Manifolds [Text] / E. A. Ayryan [et al.] // *Lecture notes in computer science. Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2019. Vol. 11661*. — 2019. — P. 343—361.
74. *Геворкян, М. Н.* Конкретные реализации симплектических численных методов [Текст] / М. Н. Геворкян // *Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика*. — 2013. — № 3. — С. 77—89.
75. On the properties of numerical solutions of dynamical systems obtained using the midpoint method [Текст] / V. P. Gerdt [и др.] // *Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science*. — 2019. — Т. 27, № 3. — С. 242—262.
76. *Shashkov, M.* Conservative Finite Difference Methods [Текст] / M. Shashkov. — Boca Raton : CRC Press, 1996.
77. Compatible Spatial Discretizations [Текст] / D. Arnold [и др.]. — Springer-Verlag, Berlin, 2006.
78. *Castillo, J. E.* Mimetic discretization methods [Текст] / J. E. Castillo, G. F. Miranda. — Chapman, Hall/CRC, 2013.
79. *Veiga, L. B. da.* The mimetic finite difference method for elliptic problems [Текст]. Т. 11 / L. B. da Veiga, K. Lipnikov, G. Manzini. — Springer, 2014.

80. *Baddour, A.* Richardson–Kalitkin method in abstract description [Text] / A. Baddour, M. D. Malykh // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. — 2021. — Vol. 29, no. 3. — P. 271–284. — URL: <https://journals.rudn.ru/miph/article/view/27531>.
81. *Zienkiewicz, O. C.* The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals [Текст] / O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, J. Zhu. — 7-е изд. — Elsevier, 2013.
82. *Hecht, F.* New development in FreeFem++ [Текст] / F. Hecht // J. Numer. Math. — 2012. — Т. 20, № 3/4. — С. 251–265. — URL: <https://freefem.org/>.
83. *Panin, A. A.* Estimates of the accuracy of approximate solutions and their application in the problems of mathematical theory of waveguides [Текст] : дис. ... канд. / Panin A. A. — Moscow : MSU, 2009. — in Russian.
84. *Боголюбов, А. Н.* Двусторонние оценки собственных значений задачи Дирихле для оператора Лапласа и их применение в задачах математической теории волноводов [Текст] / А. Н. Боголюбов, М. Д. Малых, А. А. Панин // Выч. мет. программирование. — 2009. — Т. 10, № 1. — С. 83–93. — URL: <http://mi.mathnet.ru/vmp358>.
85. *Hernandez, D. M.* Are long-term N -body simulations reliable? [Text] / D. M. Hernandez, S. Hadden, Junichiro Makino // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — 2020. — Vol. 493, no. 2. — P. 1913–1925. — eprint: [arXiv:1910.08667](https://arxiv.org/abs/1910.08667).
86. *Zhang, H.* Novel high-order energy-preserving diagonally implicit Runge-Kutta schemes for nonlinear Hamiltonian ODEs [Текст] / H. Zhang, X. Qian, S. Song // Appl. Math. Lett. — 2020. — Т. 102. — С. 106091.
87. On the quadratization of the integrals for the many-body problem [Text] / Y. Ying [et al.] // Mathematics. — 2021. — Vol. 9, no. 24. — URL: <https://www.mdpi.com/2227-7390/9/24/3208>.
88. *McLachlan, R. I.* Geometric integration using discrete gradients [Текст] / R. I. McLachlan, G. R. W. Quispel, N. Robidoux // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. — 1999. — Т. 357. — С. 1021–1045.
89. *Christiansen, S. H.* Topics in structure-preserving discretization [Текст] / S. H. Christiansen, H. Z. Munthe-Kaas, B. Owren // Acta Numerica. — 2011. — Т. 20. — С. 1–119.

90. *Baddour, A.* On difference schemes for the many-body problem preserving all algebraic integrals [Text] / A. Baddour, M. Malykh // *Phys. Part. Nuclei Lett.* — 2022. — Vol. 19. — P. 77—80.
91. *Холшевников, К. В.* Задача двух тел: Учеб. пособие [Текст] / К. В. Холшевников, В. Б. Титов. — СПб : СПбГУ, 2007.
92. On Periodic Approximate Solutions of the Three-Body Problem Found by Conservative Difference Schemes [Текст] / E. A. Auryan [и др.] // *Computer Algebra in Scientific Computing* / под ред. F. Boulier [и др.]. — Cham : Springer International Publishing, 2020. — С. 77—90.
93. *Moor, C. M.* Braids in classical gravity [Текст] / C. M. Moor // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — Т. 70. — С. 3675—3679.
94. *Chenciner, A.* A remarkable periodic solution of the three-body problem in the case of equal masses [Текст] / A. Chenciner, R. Montgomery // *Annals of Mathematics.* — 2000. — Т. 152, № 4. — С. 881—901.
95. *Montgomery, R.* A New Solution to the Three-Body Problem [Текст] / R. Montgomery // *Notices of the AMS.* — 2001. — Т. 48, № 4. — С. 471—481.
96. *Turbiner, A. V.* Particular superintegrability of 3-body (modified) Newtonian Gravity [Текст] / A. V. Turbiner, J. C. Lopez Vieyra. — 2020. — eprint: [arXiv: 1910.11644\[physics.class-ph\]](https://arxiv.org/abs/1910.11644).
97. *AndrewSu.* Задача N тел или как взорвать галактику не выходя из кухни [Текст] / AndrewSu. — 2019. — URL: <https://habr.com/ru/post/437014>.

Список рисунков

1.1	График приближенного решения	18
1.2	Графики изменения $x_1^2 + x_2^2$ на приближенном решении задачи (1.14), найденном по стандартной схеме Рунге-Кутты 4-го порядка (сверху) и по схеме 6 порядка (снизу)	25
2.1	Диаграмма Ричадсона для примера 2.9.	42
2.2	Диаграмма Ричадсона для примера 2.14.	48
2.3	Диаграмма Ричадсона для примера 2.15.	49
3.1	Эллиптический синус при $k = 1/2$, найденные по схеме средней точки (синие точки) и по симплектической схеме 4-го порядка (черные точки) с адаптивным шагом $h = 1$ и по алгоритму, встроенному в Sage (сплошная линия).	57
3.2	Квадратичные интегралы осциллятора Якоби. Вычисления выполнены при $k = 1/2$ по схеме средней точки с шагом $h = 1$	59
3.3	Шаг для вычислений при $k = 1/2$ по схеме средней точки при $h = 1$	60
3.4	Диаграмма Ричардсона для вычисления $p(10)$ в задаче об осцилляторе Якоби при $k = 1/2$ по схеме средней точки.	61
3.5	Диаграмма Ричардсона для вычисления $p(10)$ по симплектической схеме с двумя стадиями.	61
3.6	Диаграмма Ричардсона для вычисления $p(10)$ по симплектической схеме с 3 стадиями.	62
5.1	Задача двух тел. Изменение интеграла L при расчетах по схеме средней точки с адаптивным шагом $h = 1$ при введении дополнительных переменных (синий) и без введения дополнительных переменных (красный).	73
5.2	Задача двух тел. Изменение интеграла H при расчетах по схеме средней точки с адаптивным шагом $h = 1$ при введении дополнительных переменных (синий) и без введения дополнительных переменных (красный).	74
5.3	Задача двух тел. Изменение интеграла H при расчетах по схеме средней точки с адаптивным шагом $h = 1$ при введении дополнительных переменных.	74

5.4	Задача двух тел. Изменение интегралов, выражающих связи между исходными и дополнительными переменными, при расчетах по схеме средней точки с адаптивным шагом $h = 1$	75
5.5	Задача двух тел. Траектория движения точки с координатами $(x_1 - x_2, y_1 - y_2)$ при расчетах по схеме средней точки с адаптивным шагом $h = 1$ при введении дополнительных переменных (внизу) и без введения дополнительных переменных (вверху).	77
5.6	Тест Лагранжа, схема средней точки, шаг $h = 1$. График изменения полной механической энергии.	78
5.7	Тест Лагранжа, схема средней точки, шаг $h = 1$. График изменения момента импульса системы.	79
5.8	Тест Лагранжа. График изменения расстояния r_{12} , вычисления по схеме средней точки (синий сплошной) и двухстадийной схеме (красный пунктир), $h = 1$	79
5.9	Тест Эйлера, максимально возможный шаг. Траектории трех тел при $0 < t < 10$ и $0 < t < 50$	81
5.10	Хореографический тест. Траектории трех тел при $0 < t < 4$, точками отмечены начальные положения.	82
5.11	Хореографический тест. Траектория 1-го тела при $0 < t < 200$	83
5.12	Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Траектории трех тел при $0 < t < 2$	84
5.13	Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Траектории трех тел при $0 < t < 2$, увеличенный график двух петелек.	85
5.14	Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Графики изменения расстояний между телами.	86
5.15	Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения шага Δt	87
5.16	Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения скоростей тел.	87
5.17	Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения полной механической энергии.	88
5.18	Тест с петельками, явная схема Рунге-Кутты, шаг $\Delta t = 1/100$. График изменения полной механической энергии.	88
5.19	Тест с петельками, двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения момента импульса системы.	89

- 5.20 Тест с петельками, явная схема Рунге-Кутты, шаг $\Delta t = 1/100$.
График изменения момента импульса системы. 89
- 5.21 Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная
схема, шаг $h = 1$. Траектории трех тел при $0 < t < 2$ 90
- 5.22 Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная
схема, шаг $h = 1$. Графики изменения расстояний между телами. 91
- 5.23 Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная
схема, шаг $h = 1$. График изменения шага Δt 92
- 5.24 Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная
схема, шаг $h = 1$. График изменения скоростей тел. 92
- 5.25 Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная
схема, шаг $h = 1$. График изменения полной механической энергии. . . 93
- 5.26 Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схеме
Рунге-Кутты 4-го порядка с постоянным шагом $\Delta t = 0.02$. График
изменения полной механической энергии. 93
- 5.27 Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, двухстадийная
схема, шаг $h = 1$. График изменения момента импульса системы. . . . 94
- 5.28 Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схеме
Рунге-Кутты 4-го порядка с постоянным шагом $\Delta t = 0.02$. График
изменения момента импульса системы. 94
- 5.29 Тест, в котором тела подлетают близко друг к другу. Траектории трех
тел при $0 < t < 2$, полученные по двухстадийной схеме с
дополнительными переменными, адаптивный шаг $h = 1$, изображены
сплошными линиями, а траектории, полученные по схеме
Рунге-Кутты 4-го порядка с постоянным шагом $\Delta t = 0.02$, —
пунктиром. 95
- 5.30 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу,
двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Траектории трех тел при $0 < t < 2$. . . 96
- 5.31 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу,
двухстадийная схема, шаг $h = 1$. Графики изменения расстояний
между телами. 97
- 5.32 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу,
двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения шага Δt 98
- 5.33 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу,
двухстадийная схема, шаг $h = 1$. График изменения скоростей тел. . . 98

- 5.34 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу.
Траектории трех тел при $0 < t < 2$, полученные по двухстадийной схеме с дополнительными переменными, адаптивный шаг $h = 1$, изображены сплошными линиями, а траектории, полученные по схеме Рунге-Куттты 4-го порядка, 51 точка, — пунктиром. 99
- 5.35 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схема Рунге-Куттты 4-го порядка, 51 точка. График изменения полной механической энергии. 100
- 5.36 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схема Рунге-Куттты 4-го порядка, 51 точка. График изменения момента импульса системы. 100
- 5.37 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу.
Траектории трех тел при $0 < t < 2$, полученные по двухстадийной схеме с дополнительными переменными, адаптивный шаг $h = 1$, изображены сплошными линиями, а траектории, полученные по той же схеме, но без дополнительных переменных, — пунктиром. 101
- 5.38 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схема с двумя стадиями без введения дополнительных переменных, $h = 1$.
График изменения полной механической энергии. 102
- 5.39 Второй тест, в котором тела подлетают близко друг к другу, схема с двумя стадиями без введения дополнительных переменных, $h = 1$.
График изменения момента импульса системы. 102