МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И КИБЕРНЕТИКИ
КАФЕДРА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МЕТОДОВ

«Исследование консервативности вариационных методов решения задачи Коши для гамильтоновых систем»

Исполнитель: Шоманов Ж. С.
Научный руководитель: Профессор, д. ф.-м. н. Еленин Г. Г.

Москва, 2013.

УРАВНЕНИЯ ЭЙЛЕРА-ЛАГРАНЖА

- Функция Лагранжа:

$$L(q_1, q_2, \ldots, q_s, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \ldots, \dot{q}_s, t)$$

- Действие:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t)dt$$

- Уравнения Эйлера-Лагранжа:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$$

- Задача Коши для уравнений Эйлера-Лагранжа:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \\ q_i(0) = q_{i,0} \\ \dot{q}_i(0) = \dot{q}_{i,0} \end{cases},$$

ЗАКОН СОХРАНЕНИЯ ЭНЕРГИИ

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_{i=1}^{n} \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L\right) = 0$$

Величина $\sum_{i=1}^{n} \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L$ называется полной энергией системы.

ЦЕЛЬ

- Создание адаптивного вариационного метода, сохраняющего полную энергию системы почти всюду

ДИСКРЕТНЫЙ АНАЛОГ УРАВНЕНИЙ ЭЙЛЕРА-ЛАГРАНЖА

- Дискретное действие:

$$S_d(q_i) = \sum_{i=0}^{N-1} L_d(q_i, q_{i+1}, h_i) h_i,$$

- Дискретный аналог функции Лагранжа:

$$L_d(q_i, q_{i+1}, h_i) = \frac{1}{2}\left(\frac{q_{i+1} - q_i}{h_i}\right)^T M \left(\frac{q_{i+1} - q_i}{h_i}\right) - V(\gamma q_i + (1-\gamma) q_{i+1})$$

- Дискретный аналог уравнений Эйлера-Лагранжа:

$$\begin{aligned} &h_{i-1}\left(M\frac{(q_i - q_{i-1})}{h_{i-1}^2} - (1-\gamma)V'(\gamma q_{i-1} + (1-\gamma)q_i)\right) \\ &+h_i\left(-M\frac{(q_{i+1} - q_i)}{h_i^2} - \gamma V'(\gamma q_i + (1-\gamma)q_{i+1})\right) = 0 \end{aligned}, \qquad i = 1, \dots, N-1$$

ДИСБАЛАНС ПОЛНОЙ ЭНЕРГИИ

- $E_d(q_i, v_{i-\frac{1}{2}}, h_{i-1}, \gamma) = \frac{1}{2} v_{\mathrm{i}-\frac{1}{2}}{}^T M\, v_{\mathrm{i}-\frac{1}{2}} + V(q_i - \gamma v_{i-\frac{1}{2}} h_{i-1})$
- $E_d(q_{i+1}, v_{\mathrm{i}+\frac{1}{2}}, h_i, \gamma) = \frac{1}{2} v_{\mathrm{i}+\frac{1}{2}}{}^T\, M v_{\mathrm{i}+\frac{1}{2}} + V(q_{i+1} - \gamma v_{\mathrm{i}+\frac{1}{2}} h_i)$
- $\Delta E = E_d(q_{i+1}, v_{\mathrm{i}+\frac{1}{2}}, h_i, \gamma) - E_d(q_i, v_{i-\frac{1}{2}}, h_{i-1}, \gamma)$
- Необходимо, чтобы $\Delta E = 0$

2 способа:

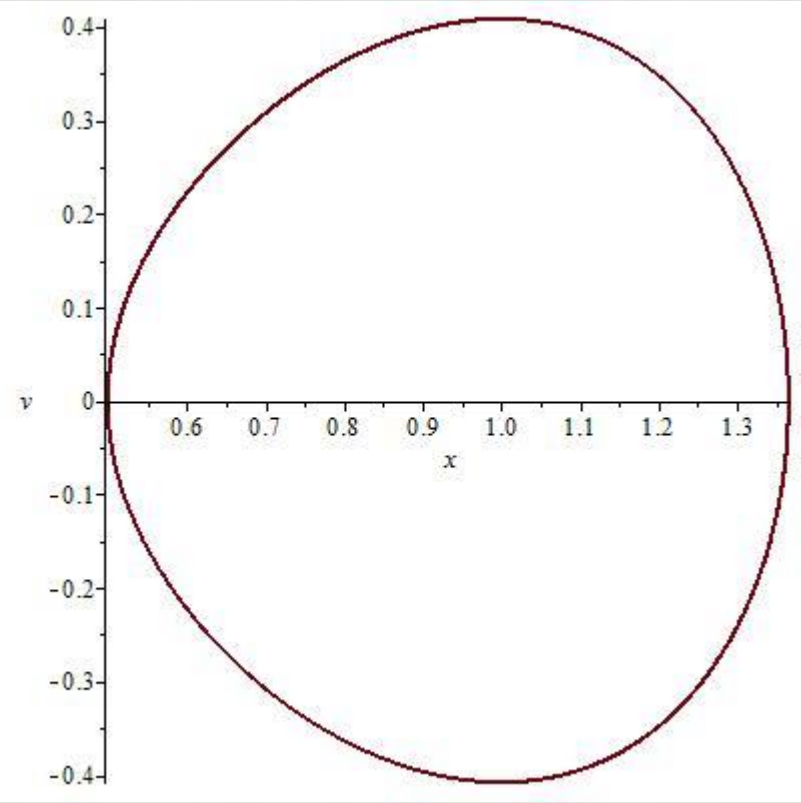
- Зафиксировать γ и исходя из условия $\Delta E = 0$ выбирать h_i
- Зафиксировать h и исходя из условия $\Delta E = 0$ выбирать γ

АДАПТИВНЫЙ ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

- $M\frac{v_{i-\frac{1}{2}}}{h^2} - (1-\gamma)V'(q_i - \gamma v_{i-\frac{1}{2}}h) - M\frac{q_{i+1}-q_i}{h^2} - \gamma V'(\gamma q_i + (1-\gamma)q_{i+1}) = 0$
- $v_{i+\frac{1}{2}} = \frac{q_{i+1}-q_i}{h}$
- $\Delta E(\gamma) = 0$
- $h = const$

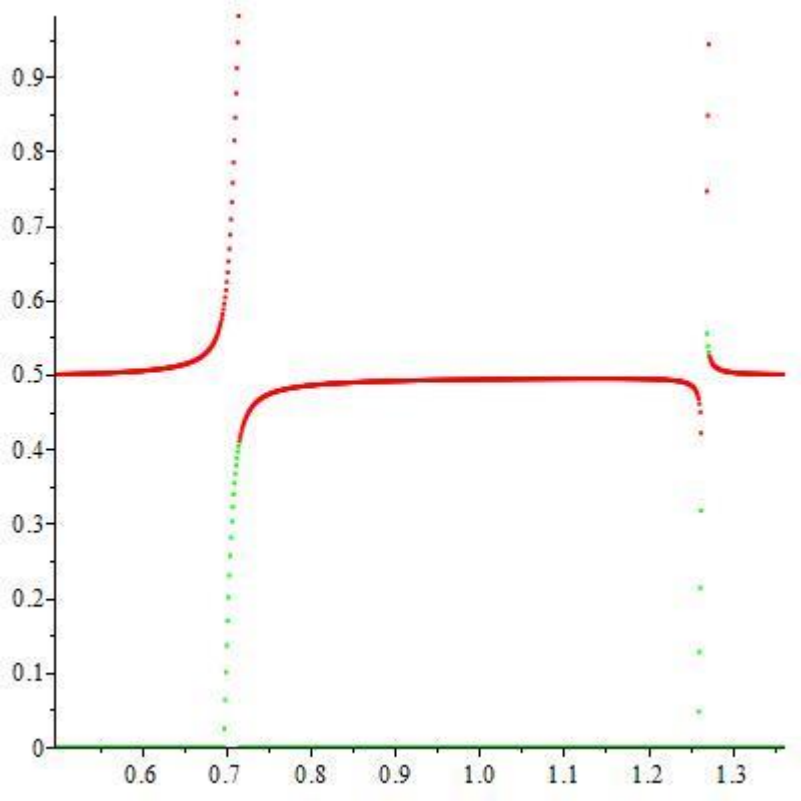
ПРИМЕР 1: КУБИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ

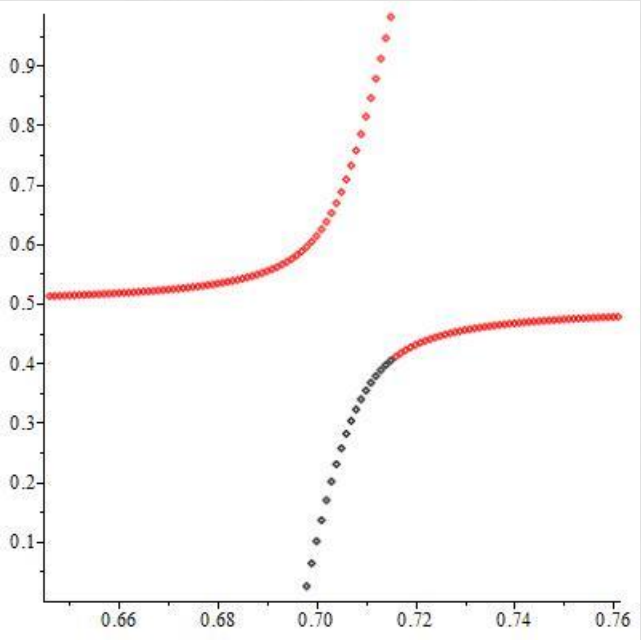
- $V = \frac{q^3}{3} - \frac{q^2}{2}, q -$ скалярная величина
- $m = 1$
- $E = -\frac{1}{12}$
- $\begin{cases} \frac{d^2v}{dx^2} = q - q^2 \\ q_0 = 0.5 \\ v_0 = 0 \end{cases}$

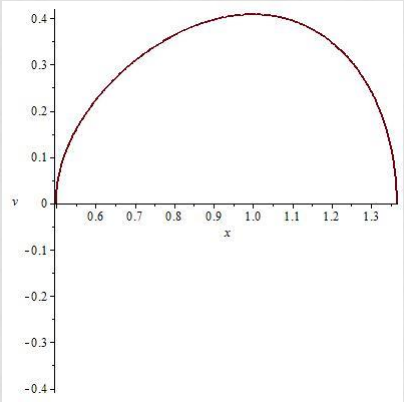


УРАВНЕНИЯ МЕТОДА

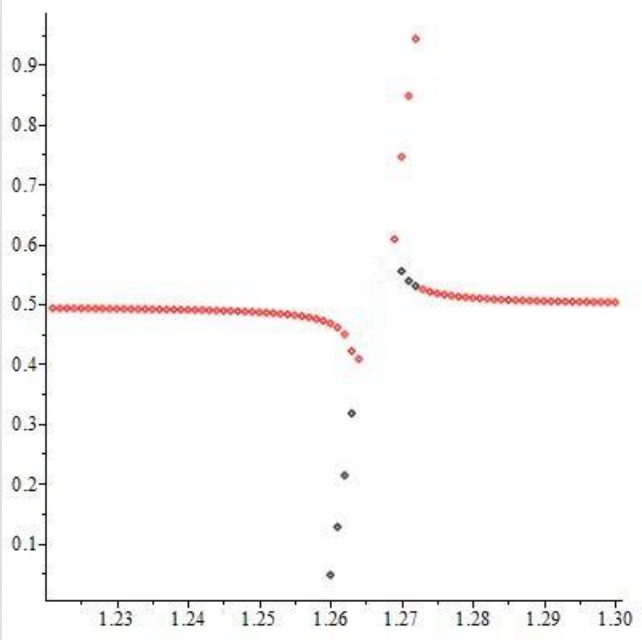
- $h^2\gamma(1-\gamma)^2 q_{i+1}^2 - (\gamma(1-\gamma)h^2 - 1 - 2h^2\gamma(1-\gamma)(\gamma v_{i-1}h + \gamma q_{i-1}))q_{i+1} - v_{i-\frac{1}{2}}h + h^2(1-\gamma)((q_i - \gamma v_{i-\frac{1}{2}}h)^2 - (q_i - \gamma v_{i-\frac{1}{2}}h)) - q_i + \gamma^3 h^2 q_i^2 - \gamma^2 h^2 q_i = 0$
- $v_{i+\frac{1}{2}} = \frac{q_{i+1} - q_i}{h}$
- $\Delta E(\gamma) = \frac{v_{i+\frac{1}{2}}^2}{2} - \frac{v_{i-\frac{1}{2}}^2}{2} + \frac{(q_{i+1} - \gamma v_{\mathrm{i}+\frac{1}{2}}h)^3}{3} - \frac{(q_{i+1} - \gamma v_{\mathrm{i}+\frac{1}{2}}h)^2}{2} - \frac{(q_i - \gamma v_{\mathrm{i}-\frac{1}{2}}h)^3}{3} + \frac{(q_i - \gamma v_{\mathrm{i}-\frac{1}{2}}h)^2}{2}$

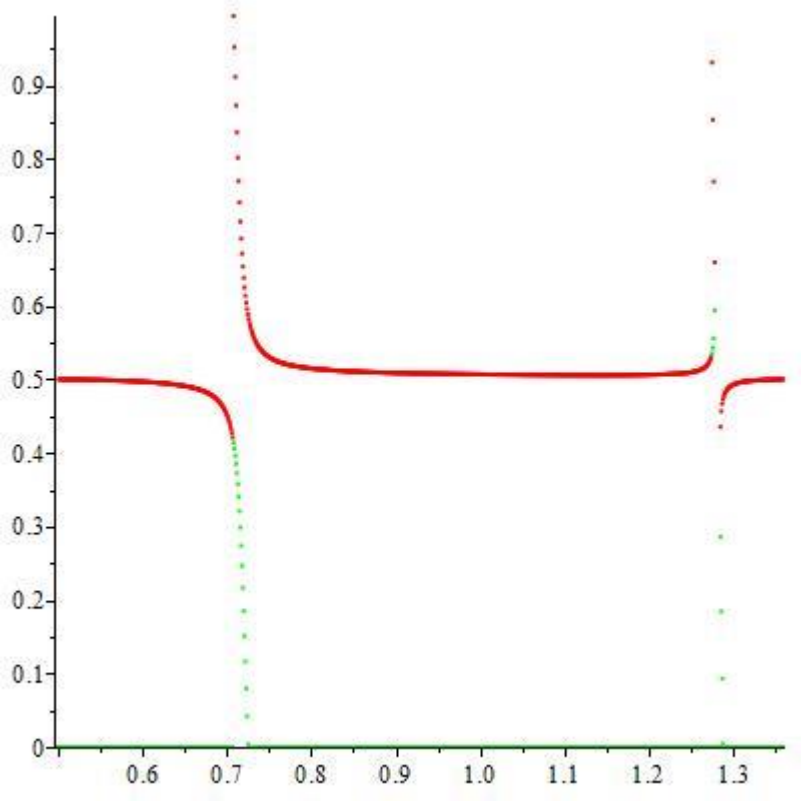


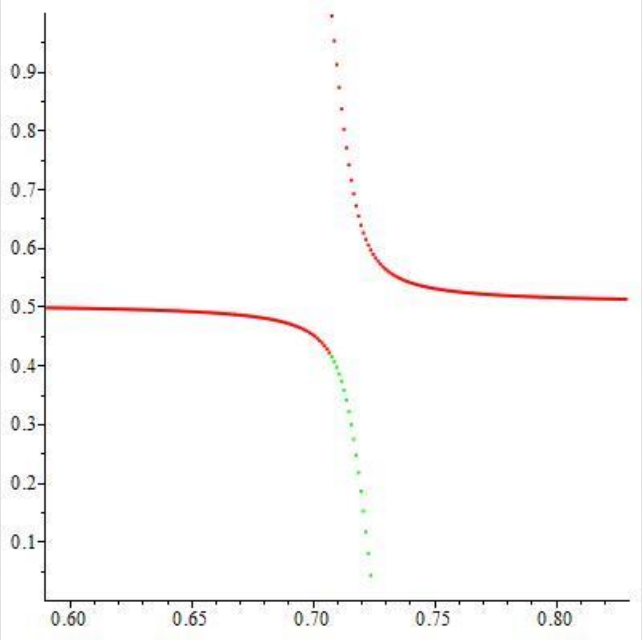


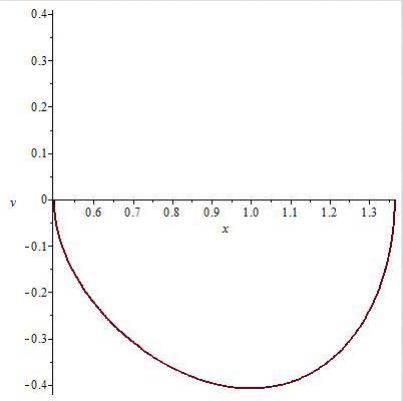


Линии нулевого приращения энергии на плоскости γq при движении по верхней половине фазовой траектории

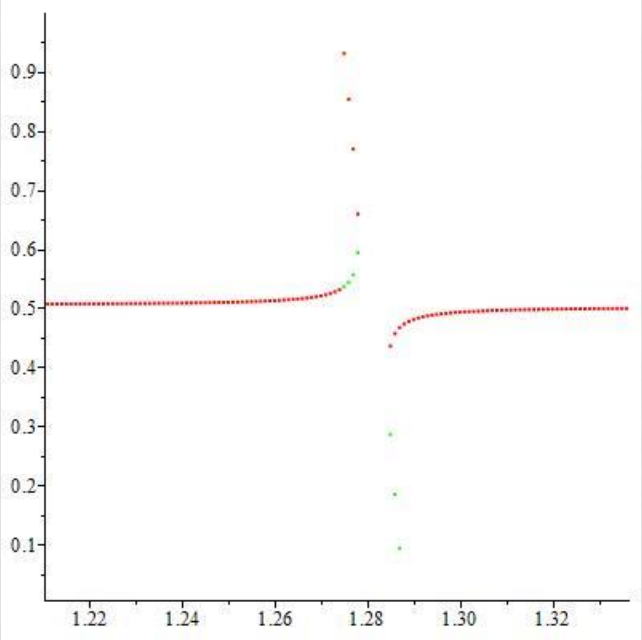


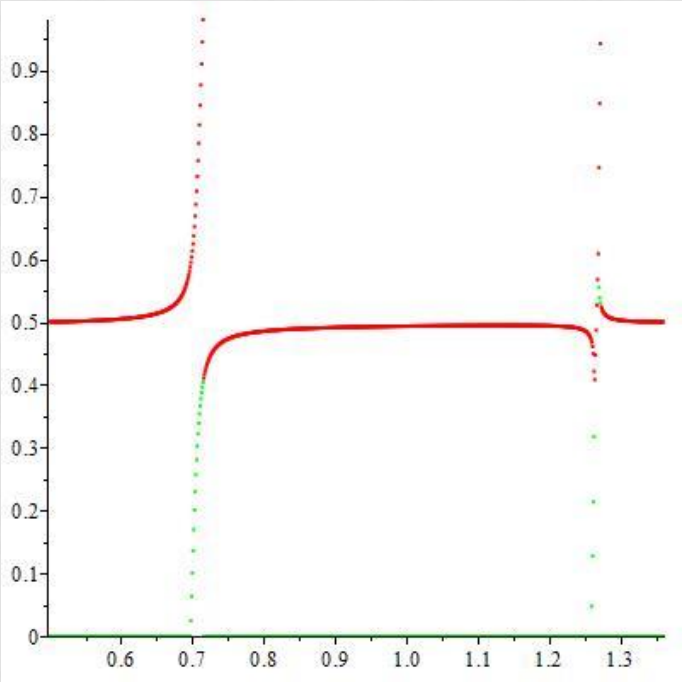


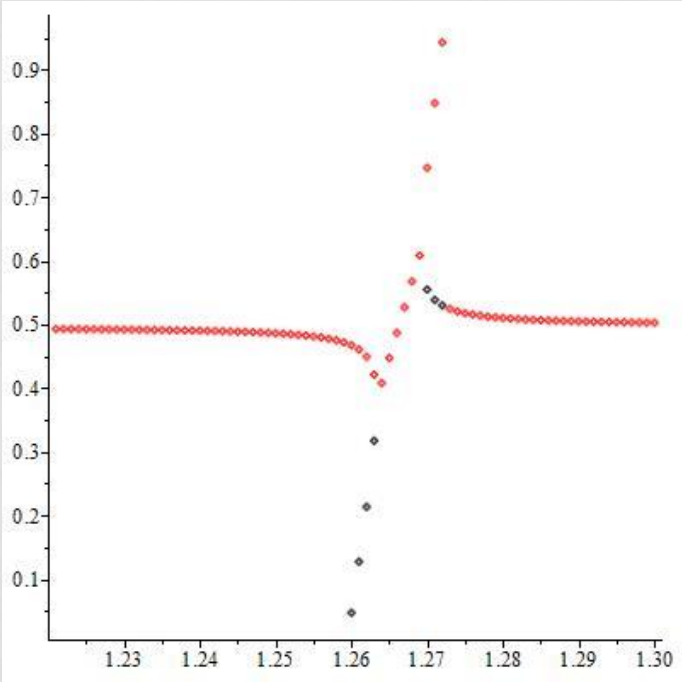


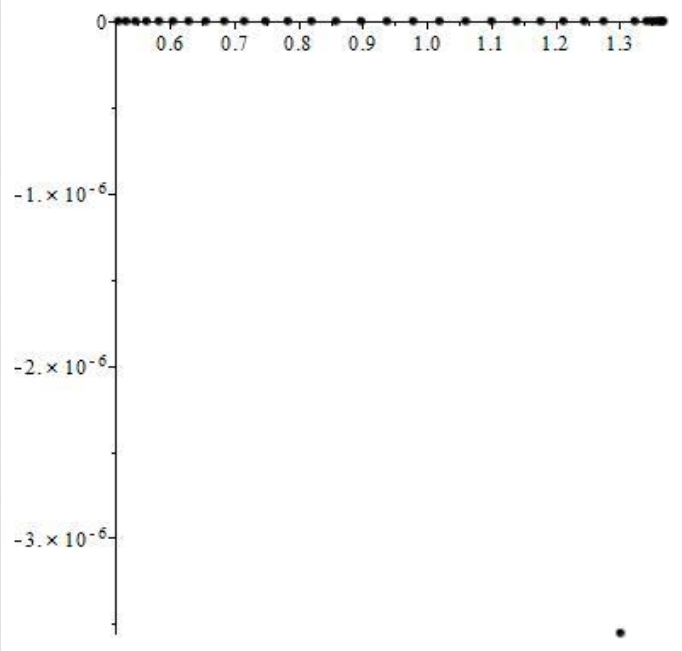


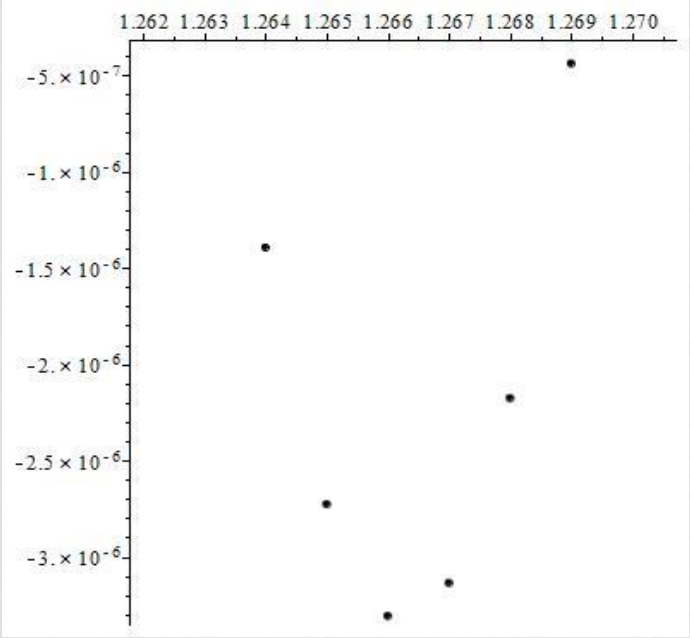
Линии нулевого приращения энергии на плоскости γq при движении по нижней половине фазовой траектории




0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
0.6 0.7 0.8 0.9 1.0 1.1 1.2 1.3


0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
1.23 1.24 1.25 1.26 1.27 1.28 1.29 1.30


0
0.6 0.7 0.8 0.9 1.0 1.1 1.2 1.3
$-1.\times10^{-6}$
$-2.\times10^{-6}$
$-3.\times10^{-6}$

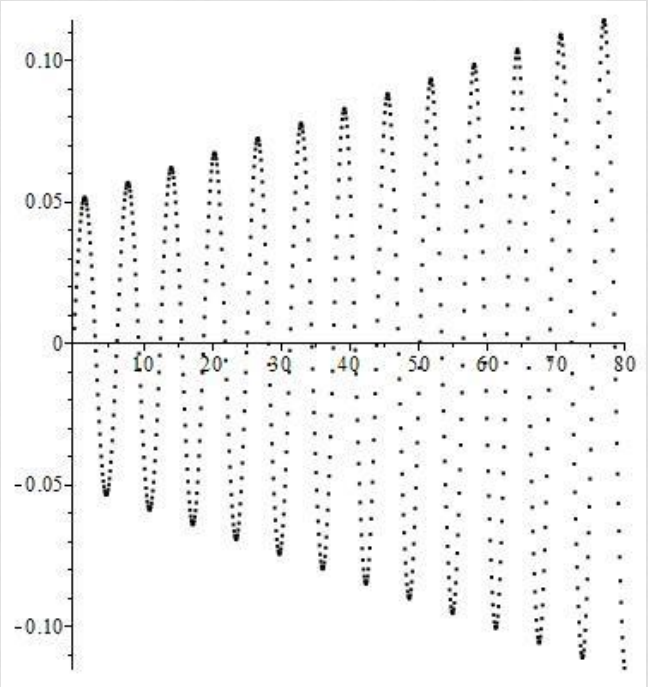

1.262 1.263 1.264 1.265 1.266 1.267 1.268 1.269 1.270
$-5.\times10^{-7}$
$-1.\times10^{-6}$
-1.5×10^{-6}
$-2.\times10^{-6}$
-2.5×10^{-6}
$-3.\times10^{-6}$

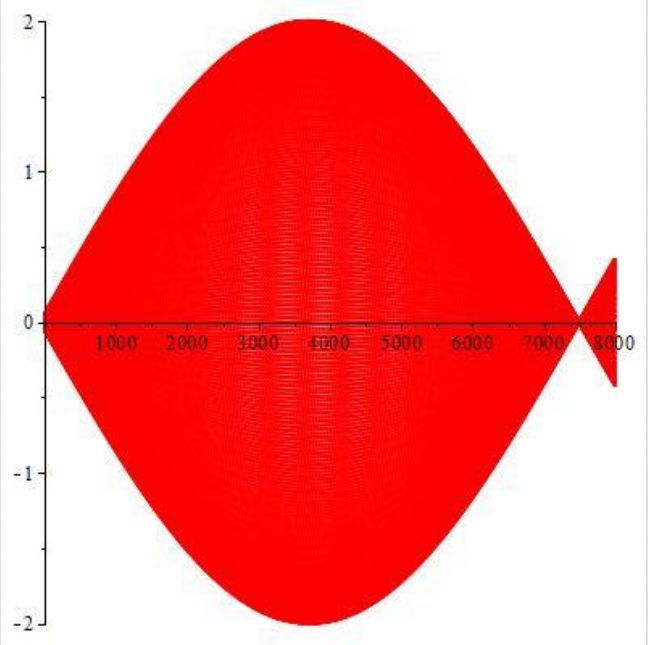
АДАПТИВНЫЙ ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

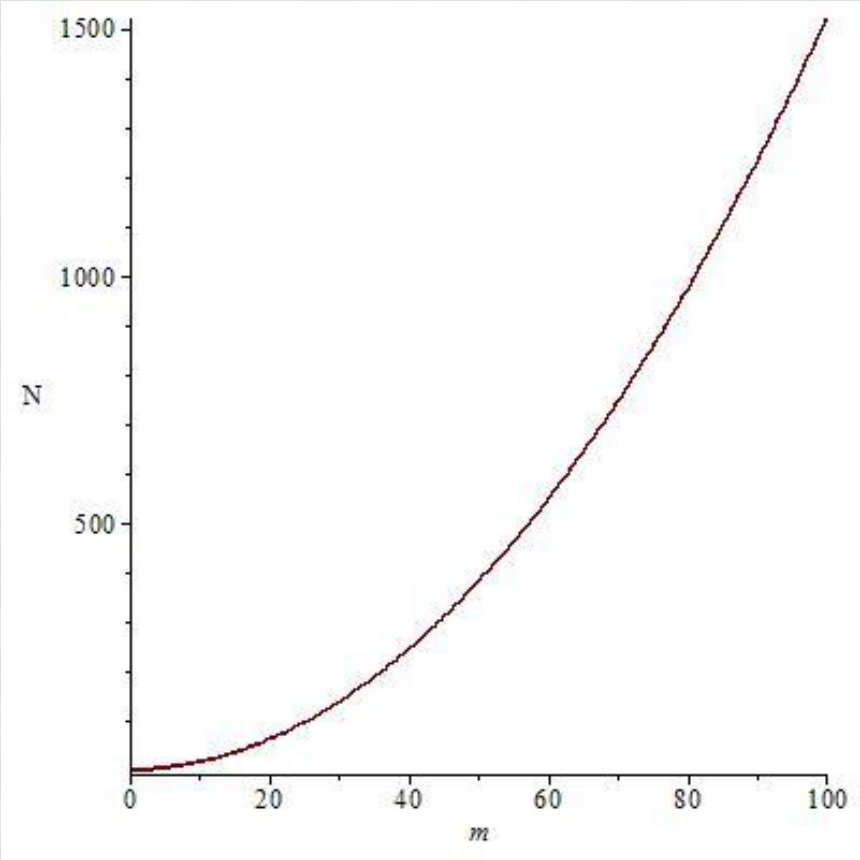
- $M\frac{v_{i-\frac{1}{2}}}{h^2} - (1-\gamma)V'(q_i - \gamma v_{i-\frac{1}{2}}h) - M\frac{q_{i+1}-q_i}{h^2} - \gamma V'(\gamma q_i + (1-\gamma)q_{i+1}) = 0$
- $v_{i+\frac{1}{2}} = \frac{q_{i+1}-q_i}{h}$
- $\gamma \in \underset{\theta\in[0,1]}{\mathrm{Argmin}}\, \Delta E(\theta)^2$
- $h = const$

ПРИМЕР 2: КВАДРАТИЧНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

- $V = \frac{1}{2}q^2$
- $\begin{cases} \frac{d^2q}{dt^2} = -q \\ q(0) = q_0 \\ v(0) = v_0 \end{cases}$
- $q = q_0 cost + v_0 sint$
- $q_i = \frac{v_0 h + q_0(1-a)}{b} sin\left(iarctg\frac{b}{a}\right) + q_0 cos\left(iarctg\frac{b}{a}\right)$
- $a = \frac{2(1+h^2\gamma(1-\gamma))-h^2}{2(1+h^2\gamma(1-\gamma))}, b = h\frac{\sqrt{4-h^2(2\gamma-1)^2}}{2(1+h^2\gamma(1-\gamma))}$







$$N \sim \frac{1}{8} m^2$$

m – количество точек на период

ПРИМЕР 3: ПОТЕНЦИАЛ МОРЗЕ

- $V = (1 - e^{1-q})^2 - 1$
- $m = 1$
- $\begin{cases} \frac{d^2q}{dt^2} = 2e^{1-q}(1 - e^{1-q}) \\ q_0 = \ln\left(\frac{10}{11}e\right) \\ p_0 = 0 \end{cases}$
- $E_0 = -0.99$
- $T = \pi\sqrt{\frac{200}{99}}$

Метод	μ	$\lvert\Delta_1 H\rvert$	$\lvert\Delta_1 q\rvert$	$\lvert\Delta_1 v\rvert$	$\lvert\Delta_n H\rvert$	$\lvert\Delta_n q\rvert$	$\lvert\Delta_n v\rvert$	$\lvert\tilde{\Delta}_n q\rvert$	$\lvert\tilde{\Delta}_n v\rvert$
Адаптивный вариационный метод	0.1	$8.63 \cdot 10^{-10}$	$2.61 \cdot 10^{-2}$	$1.29 \cdot 10^{-2}$	$9.34 \cdot 10^{-10}$	$2.06 \cdot 10^{-1}$	$2.81 \cdot 10^{-1}$	$7.53 \cdot 10^{-2}$	$4.36 \cdot 10^{-2}$
	0.05	$4.97 \cdot 10^{-10}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$3.33 \cdot 10^{-3}$	$4.6 \cdot 10^{-10}$	$2.03 \cdot 10^{-1}$	$2.83 \cdot 10^{-1}$	$3.12 \cdot 10^{-2}$	$2.32 \cdot 10^{-2}$
	0.01	$4.12 \cdot 10^{-11}$	$3.1 \cdot 10^{-3}$	$1.36 \cdot 10^{-4}$	$1.43 \cdot 10^{-11}$	$1.73 \cdot 10^{-1}$	$2.33 \cdot 10^{-1}$	$7.02 \cdot 10^{-3}$	$6.07 \cdot 10^{-3}$
Вариационный метод	0.1	$2.42 \cdot 10^{-4}$	$2.61 \cdot 10^{-2}$	$3.04 \cdot 10^{-3}$	$2.42 \cdot 10^{-4}$	$2.06 \cdot 10^{-1}$	$2.8 \cdot 10^{-1}$	$7.46 \cdot 10^{-2}$	$4.87 \cdot 10^{-2}$
	0.05	$6.49 \cdot 10^{-5}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$8.07 \cdot 10^{-3}$	$6.49 \cdot 10^{-5}$	$2.02 \cdot 10^{-1}$	$2.82 \cdot 10^{-1}$	$4.15 \cdot 10^{-2}$	$3.59 \cdot 10^{-2}$
	0.01	$2.27 \cdot 10^{-6}$	$3.1 \cdot 10^{-3}$	$3.29 \cdot 10^{-4}$	$2.65 \cdot 10^{-6}$	$1.73 \cdot 10^{-1}$	$2.57 \cdot 10^{-1}$	$6.93 \cdot 10^{-3}$	$5.92 \cdot 10^{-3}$
Метод Верле	0.1	$1.07 \cdot 10^{-3}$	$8.17 \cdot 10^{-3}$	$1.71 \cdot 10^{-2}$	$1.08 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-1}$	$2.72 \cdot 10^{-1}$	$5.97 \cdot 10^{-2}$	$9.07 \cdot 10^{-2}$
	0.05	$2.66 \cdot 10^{-4}$	$1.99 \cdot 10^{-3}$	$4.39 \cdot 10^{-3}$	$2.69 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-1}$	$2.8 \cdot 10^{-1}$	$2.39 \cdot 10^{-2}$	$3.74 \cdot 10^{-2}$
	0.01	10^{-4}	$7.91 \cdot 10^{-5}$	$1.75 \cdot 10^{-4}$	10^{-5}	$1.74 \cdot 10^{-1}$	$2.57 \cdot 10^{-1}$	$3 \cdot 10^{-3}$	$4.72 \cdot 10^{-3}$

$\lvert\Delta_1 H\rvert$ –максимальная погрешность дисбаланса энергии на первом периоде
$\lvert\Delta_1 q\rvert$ – максимальная погрешность координат на первом периоде
$\lvert\Delta_1 v\rvert$ – максимальная погрешность скоростей на первом периоде
$\lvert\Delta_n H\rvert$ – максимальная погрешность дисбаланса энергии на n-том периоде
$\lvert\Delta_n q\rvert$ – максимальная погрешность координат на n-том периоде
$\lvert\Delta_n v\rvert$ – максимальная погрешность скоростей на n-том периоде
$\lvert\tilde{\Delta}_n q\rvert$ – максимальная погрешность координат на первом периоде, при условии, что начальные условия взяты с n-того периода
$\lvert\tilde{\Delta}_n v\rvert$ – максимальная погрешность скоростей на первом периоде, при условии, что начальные условия взяты с n-того периода
где n-тый период – это период, на котором погрешность координат достигает своего максимального значения.

РЕЗУЛЬТАТЫ

- Предложен метод, минимизирующий дисбаланс полной энергии
- Исследованы свойства метода на ряде модельных задач
- Написана программа, реализующая метод