

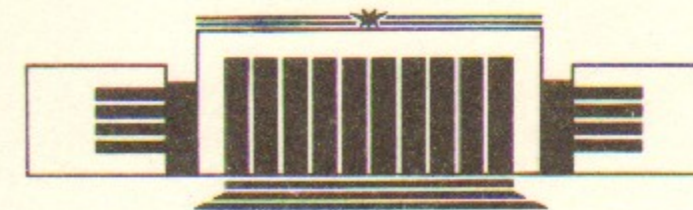


25  
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

**В.В. Вечеславов**

**МЕТОД КАНОНИЧЕСКОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ  
ЛЮБОГО ПОРЯДКА**

**ПРЕПРИНТ 89-35**



**НОВОСИБИРСК**



В.В.Вечеславов

## МЕТОД КАНОНИЧЕСКОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ЛЮБОГО ПОРЯДКА

### А Н Н О Т А Ц И Я

Описан метод интегрирования гамильтоновых уравнений движения, основанный на замене непрерывной гамильтоновой системы неявным каноническим отображением. Одна итерация такого отображения эквивалентна интегрированию уравнений на интервале времени  $\tau$  с ошибкой  $O(\tau^{n+1})$ , где  $n$  — порядок отображения. Рассматриваемый подход годится, в принципе, для достижения любого порядка. Реализация неявного отображения осуществляется по схеме "предиктор-корректор", где в качестве предиктора используется явное отображение Ли. Предложены способы численного и аналитического контроля точности счета.

### A b s t r a c t

An integration technique based on approximation of Hamiltonian differential equations by canonical implicit map is described. One iteration of this map is equivalent to integration of Hamiltonian system over time interval  $\tau$  with error  $O(\tau^{n+1})$ , where  $n$  is order of the map. This approach may be used for obtaining any desired order. For performing the implicit map the scheme "predictor-corrector" is used with the explicit Lie map as the predictor. Both numerical and analytical ways of accuracy control are discussed.

## I. Введение

Анализу нелинейных гамильтоновых систем уделяется в последнее время большое внимание. Этот факт принято объяснять как серьезными успехами теории (в частности, доказательством теоремы КАМ), так и появлением быстродействующих компьютеров. Численному эксперименту отводится весьма важная роль, поскольку с его помощью не только обнаруживаются новые проявления нелинейной динамики, но и осуществляется окончательная проверка теоретических представлений [1,2]. Одним из наиболее важных и трудных оказывается вопрос о длительной эволюции колебательной нелинейной системы, например, оценка времени жизни заряженной частицы в накопителе или в магнитной ловушке [1,2].

Надежность результатов численного интегрирования гамильтоновых уравнений движения на больших интервалах времени может быть обеспечена только при использовании канонических, сохраняющих фазовый объем алгоритмов [3,4]. Многие популярные методы счета (например, Рунге-Кутты) не удовлетворяют этому требованию, что приводит к подавлению слабых реальных и возникновению ложных динамических эффектов.

В настоящей работе обсуждается способ построения канонических производящих функций, знание которых позволяет заменить непрерывные гамильтоновы уравнения их дискретными аналогами — каноническими отображениями. В результате такой замены возникает ошибка  $O(\tau^{n+1})$ , зависящая (при фиксированном шаге по времени  $\tau$ ) от порядка отображения  $n$ . Рассматриваемый подход годится, в принципе, для достижения любого порядка.

## 2. Отображения Ли и их непригодность для изучения долговременной динамики

При исследовании неконсервативных гамильтонианов  $\mathcal{H}(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N, t)$  удобно рассматривать пару канонически сопряженных переменных  $t = q_{N+1}, \mathcal{H} = -p_{N+1}$  как дополнительную степень свободы [5]. Отвечающие такому расширению уравнения

$$\frac{dq}{ds} = \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial p}, \quad \frac{dp}{ds} = -\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial q}, \quad q = (q_1, \dots, q_{N+1}), \quad p = (p_1, \dots, p_{N+1}) \quad (1)$$

порождаются модифицированным гамильтонианом



$$\mathcal{K}(q, p) = \mathcal{H}(q, p_1, \dots, p_N) + p_{N+1} = 0, \quad (2)$$

который является интегралом движения. Одно из уравнений (1) имеет вид  $dt/ds = 1$  и показывает, что эволюция системы (1), (2) в старом  $t$  и новом  $s$  времени протекает совершенно одинаково.

Решение (1) можно представить в форме рядов Ли /6,7/:

$$\tilde{q} = \sum_{m \geq 0} \frac{\tau^m}{m!} \hat{D}^m q = e^{\tau \hat{D}} q, \quad \tilde{p} = \sum_{m \geq 0} \frac{\tau^m}{m!} \hat{D}^m p = e^{\tau \hat{D}} p, \quad (3)$$

где  $\tau$  - шаг по времени (его величина отвечает условию сходимости рядов);  $q = q(s)$ ,  $p = p(s)$  - начальные,  $\tilde{q} = q(s + \tau)$ ,  $\tilde{p} = p(s + \tau)$  - конечные значения динамических переменных; оператор  $\hat{D}$  - скобка Пуассона

$$\hat{D} \equiv [\dots, \mathcal{K}] = \nabla_p \mathcal{K} \cdot \nabla_q - \nabla_q \mathcal{K} \cdot \nabla_p, \quad (4)$$

записанная через операторы  $\nabla_q$ ,  $\nabla_p$  градиентов в соответствующих подпространствах и точка означает скалярное произведение. Формулы (3) дают преобразование Ли  $(q, p) \rightarrow (\tilde{q}, \tilde{p})$ , производящей функцией которого оказывается гамильтониан системы  $\mathcal{K}(q, p)$  и являются частными случаями более общего соотношения

$$f(\tilde{q}, \tilde{p}) = \sum_{m \geq 0} \frac{\tau^m}{m!} \hat{D}^m f(q, p) = e^{\tau \hat{D}} f(q, p) \quad (5)$$

справедливого для любой аналитической функции /7/. Из свойств операторной экспоненты и скобок Пуассона следует вывод о каноничности преобразования (3) /7/:

$$[\tilde{q}_i, \tilde{p}_j] = [e^{\tau \hat{D}} q_i, e^{\tau \hat{D}} p_j] = e^{\tau \hat{D}} [q_i, p_j] = \delta_{ij} \quad (6)$$

Все соотношения в теории Ли - явные (новые величины полностью определяются через старые) и это обстоятельство выгодно отличает преобразования Ли от классических, оперирующих смешанным набором старых и новых переменных /5,7/ (см. ниже п.3).

Казалось бы, формулы (3), если в них использовать  $n$  первых членов, идеально решают задачу построения явного отображения  $n$ -го порядка, каждая итерация которого эквивалентна интегрированию системы (1), (2) на временном интервале длиной  $\tau$ . К сожалению, это не так: отбрасывание всех членов операторной экспоненты с номерами  $m > n$  нарушает условие (6), которое теперь принимает следующий вид:

$$[\tilde{q}_i, \tilde{p}_j] = \delta_{ij} + O(\tau^{n+1}). \quad (7)$$

Ясно, что каноничность отображения (3) является, как правило, реально недостижимым асимптотическим (при  $n \rightarrow \infty$ ) качеством. Преобразования Ли посвящено много работ, но как ни странно, в большинстве из них этот важный факт даже не упоминается<sup>\*</sup>.

Неканоничность и обусловленное этим несохранение фазового объема делают отображения Ли практически непригодными для изучения долговременной гамильтоновой динамики: в процессе многократных итераций средняя (на итерацию) ошибка счета монотонно растет (см. ниже п.5) и эволюция системы необратимо искажается. Следует, однако, особо подчеркнуть, что опасные последствия свойства (7) проявляются лишь по истечении некоторого времени (числа итераций отображения). На коротких интервалах потеря фазового объема может быть сделана неощутимой и тогда преобразования Ли оказываются близки к каноническим. Напомним, что наиболее широкое применение преобразования Ли нашли в теории возмущений при замене одной гамильтоновой системы вида  $\mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{H}_1$  другой также гамильтоновой системой, чем-то более привлекательной. Роль времени  $\tau$  в этом процессе играет (обычно малый) параметр возмущения  $\varepsilon$ , а само преобразование выполняется однократно /6,7,8/.

Вытекающий из проведенного рассмотрения вывод о непригодности в общем случае явных отображений для создания алгоритмов канонического интегрирования уже делался в литературе /3,4/. Строго каноническими являются, как известно, неявные отображения, порождаемые производящими функциями от смешанного набора переменных /5/, построению которых посвящен следующий п.3. Оказывается, что практическая работа с такими неявными отображениями сильно облегчается, если использовать близкие к ним явные отображения Ли (см. п.4).

### 3. Построение канонических отображений

Каноническая производящая функция зависит как от старых  $q = q(s)$ ,  $p = p(s)$ , так и от новых  $\bar{q} = q(s + \tau)$ ,  $\bar{p} = p(s + \tau)$

<sup>\*</sup> Единственным известным автору исключением является препринт Кари (см. John R. Cary, *Lie Transforms and Their Use in Hamiltonian Perturbation Theory*, preprint LBL-6350, Berkeley, 1978), где имеются замечания по поводу соотношения (7); в опубликованной редакции /8/ они отсутствуют.



значений динамических переменных. Вопрос о том, какую из двух сопряженных величин  $(q_i, p_i)$  выбрать в качестве новой можно решать в отношении каждой пары независимо от остальных, руководствуясь, например, желанием упростить вычисления. Здесь возможны два варианта, которые в обозначениях Голдстейна /5/ записываются так:

$$\bar{q}-q=\frac{\partial}{\partial p}F_2(q,\bar{p})=\frac{\partial}{\partial p}F_3(\bar{q},p), \quad \bar{p}-p=-\frac{\partial}{\partial q}F_2(q,\bar{p})=-\frac{\partial}{\partial q}F_3(\bar{q},p) \quad (8)$$

Таким образом, появляются два  $(N+1)$ -мерных вектора  $x$  и  $\bar{u}$ , в которых собраны, соответственно, старые и новые переменные и удобно ввести операторы градиентов в этих подпространствах

$$\nabla_x \equiv \left( \pm \frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \pm \frac{\partial}{\partial x_{N+1}} \right), \quad \nabla_{\bar{u}} \equiv \left( \pm \frac{\partial}{\partial \bar{u}_1}, \dots, \pm \frac{\partial}{\partial \bar{u}_{N+1}} \right), \quad (9)$$

где знак плюс, согласно (8), ставится тогда, когда используется старая координата и новый импульс.

Производящую функцию будем искать в виде ряда

$$S(x, \bar{u}, \tau) = \sum_{m \geq 1} \frac{\tau^m}{m!} S_m(x, \bar{u}), \quad (10)$$

искомое отображение имеет вид

$$\bar{u}-u = -\nabla_x S(x, \bar{u}, \tau), \quad \bar{x}-x = \nabla_{\bar{u}} S(x, \bar{u}, \tau). \quad (11)$$

Напомним, что это отображение канонично для произвольной функции  $S(x, \bar{u}, \tau)$  /5/. С помощью формул (11) можно найти изменение, которое претерпевает при отображении произвольная функция:

$$f(\bar{x}, \bar{u}) - f(x, u) = f(x + \nabla_x S, \bar{u}) - f(x, \bar{u} + \nabla_{\bar{u}} S) = \\ = \sum_{m \geq 0} \frac{1}{m!} \left[ (\nabla_{\bar{u}} S \cdot \nabla_x)^m - (\nabla_x S \cdot \nabla_{\bar{u}})^m \right] f(x, \bar{u}) = \left( e^{\nabla_{\bar{u}} S \cdot \nabla_x} - e^{\nabla_x S \cdot \nabla_{\bar{u}}} \right) f(x, \bar{u}). \quad (12)$$

Гамильтониан системы в новых переменных равен  $\mathcal{K}(\bar{x}, \bar{u}) = \mathcal{K}(x, u) + \partial S / \partial \tau$ , откуда с учетом (2) и (12) следует

$$\mathcal{K}(x + \nabla_x S, \bar{u}) = e^{\nabla_{\bar{u}} S \cdot \nabla_x} \mathcal{K}(x, \bar{u}) = \frac{\partial S}{\partial \tau}. \quad (13)$$

Это соотношение было впервые получено Шнайадам /9/, а затем Мерсманом /6/. В последней работе проводится сравнение трех способов преобразований динамических переменных: 1) преобразований Ли по методу Хори /10/, 2) преобразований Ли по

методу Дебри /11/ и 3) с помощью канонической производящей функции вида (10). Показано, что производящие функции этих методов связаны друг с другом простыми соотношениями и знание одной из них эквивалентно знанию двух других. На этом основании Мерсман объявляет эквивалентными и сами преобразования, что в общем случае неверно, так как каноническим является только третье (см. (7)).

Следуя Мерсману /6/, воспользуемся равенством (13) для последовательного отыскания членов  $S_m(x, \bar{u})$  ряда (10) и с этой целью введем вспомогательные операторы

$$\hat{A}_m \equiv \nabla_{\bar{u}} S_m(x, \bar{u}) \cdot \nabla_x, \quad \hat{B}_m \equiv \nabla_x S_m(x, \bar{u}) \cdot \nabla_{\bar{u}}. \quad (14)$$

Заметим прежде всего, что единственной независимой и фактически порождающей отображение (11) функцией является

$$S_1(x, \bar{u}) = \mathcal{K}(x, \bar{u}), \quad (15)$$

а все прочие члены ряда получаются в результате воздействия на нее определенных операторов

$$S_m(x, \bar{u}) = \hat{A}_m S_1(x, \bar{u}) = \hat{B}_m S_1(x, \bar{u}), \quad m \geq 2 \quad (16)$$

Приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях  $\tau$  в формуле (13) находим:

$$\begin{aligned} \hat{A}_2 &= \hat{a}_1; & \hat{A}_3 &= \hat{a}_2 + \hat{a}_1^2; & \hat{A}_4 &= \hat{a}_3 + 3\hat{a}_2\hat{a}_1 + \hat{a}_1^3; \\ \hat{A}_5 &= \hat{a}_4 + 4\hat{a}_3\hat{a}_1 + 3\hat{a}_2^2 + 6\hat{a}_2\hat{a}_1^2 + \hat{a}_1^4; \\ \hat{A}_6 &= \hat{a}_5 + 5\hat{a}_4\hat{a}_1 + 10\hat{a}_3\hat{a}_2 + 10\hat{a}_3\hat{a}_1^2 + 15\hat{a}_2^2\hat{a}_1 + 10\hat{a}_2\hat{a}_1^3 + \hat{a}_1^5; \\ \hat{A}_7 &= \hat{a}_6 + 6\hat{a}_5\hat{a}_1 + 15\hat{a}_4\hat{a}_2 + 15\hat{a}_4\hat{a}_1^2 + 10\hat{a}_3^2 + 60\hat{a}_3\hat{a}_2\hat{a}_1 + \\ &+ 20\hat{a}_3\hat{a}_1^3 + 15\hat{a}_2^3 + 45\hat{a}_2^2\hat{a}_1^2 + 15\hat{a}_2\hat{a}_1^4 + \hat{a}_1^6; \\ \hat{A}_8 &= \hat{a}_7 + 7\hat{a}_6\hat{a}_1 + 21\hat{a}_5\hat{a}_2 + 21\hat{a}_5\hat{a}_1^2 + 35\hat{a}_4\hat{a}_3 + 105\hat{a}_4\hat{a}_2\hat{a}_1 + \\ &+ 35\hat{a}_4\hat{a}_1^3 + 70\hat{a}_3^2\hat{a}_1 + 105\hat{a}_3\hat{a}_2^2 + 210\hat{a}_3\hat{a}_2\hat{a}_1^2 + 35\hat{a}_3\hat{a}_1^4 + \\ &+ 105\hat{a}_2^3\hat{a}_1 + 105\hat{a}_2^2\hat{a}_1^3 + 21\hat{a}_2\hat{a}_1^5 + \hat{a}_1^7; \\ &\dots \end{aligned} \quad (17)$$



Если в предыдущем изложении рассматривать  $(\bar{x}, \bar{u})$  как старые, а  $(x, u)$  как новые переменные, обратив время  $\tau \Rightarrow -\tau$ , то можно найти конкретные выражения для второго оператора  $\hat{B}_m$  (см. (16)). Они выглядят точно так же, как равенства (17), в которых надо произвести замены  $\hat{A} \Rightarrow \hat{B}$ ,  $\hat{a} \Rightarrow \hat{b}$ :

$$\hat{B}_2 = \hat{b}_1; \quad \hat{B}_3 = \hat{b}_2 + \hat{b}_1^2; \quad \hat{B}_4 = \hat{b}_3 + 3\hat{b}_2\hat{b}_1 + \hat{b}_1^3; \quad \text{и т.д.} \quad (18)$$

Соотношения (10) - (18) полностью решают задачу построения в любом конечном порядке  $n$  канонического отображения (II), каждая итерация которого отвечает интегрированию непрерывной гамильтоновой системы (1), (2) на интервале  $\tau$ . Необходимо обсудить основные общие свойства метода и важный вопрос контроля точности счета.

#### 4. Свойства алгоритма и контроль точности.

При реализации описанного способа канонического интегрирования приходится иметь дело с неявными уравнениями вида

$\bar{u} - F(x, u, \bar{u}) = 0$  (см. первое соотношение (II)), разрешение которых требует привлечения одного из методов минимизации функций конечного числа переменных (например, метода Ньютона) [3, 12]. Это обстоятельство, подробно рассмотренное в работе [3], порождает серьезную проблему обеспечения быстрой сходимости последовательных приближений  $\bar{u}^{(0)}, \bar{u}^{(1)}, \dots$  к нужному (чаще всего одному из многих) решению. Как известно, успех здесь целиком определяется удачным выбором начального приближения  $\bar{u}^{(0)}$  [12].

Выше было показано, что с каждой непрерывной гамильтоновой системой можно связать отображения двух типов:

- 1) в общем случае неявное каноническое отображение  $(x, u) \rightarrow (\bar{x}, \bar{u})$  по формулам (10), (11),  $m \leq n$  и
- 2) в общем случае неканоническое явное отображение Ли  $(x, u) \rightarrow (\tilde{x}, \tilde{u})$  по формулам (2), (3),  $m \leq l$ .

В отношении преобразования Ли никаких проблем однозначности и сходимости вообще не возникает и кроме того мы знаем (см. п.3), что в пределах одного шага интегрирования значения  $(\tilde{x}, \tilde{u})$  могут быть сделаны весьма близки к истинным величинам  $(\bar{x}, \bar{u})$ . Отсюда следует эффективная рекомендация: ис-

пользовать предсказание Ли  $\tilde{u}$  в качестве начального приближения  $\bar{u}^{(0)}$  (предиктор), а дальнейшее уточнение проводить с помощью простой итерации  $\bar{u}^{(k)} = F(x, u, \bar{u}^{(k-1)})$ ,  $k = 1, 2, \dots$  (корректор). На основании практических наблюдений заметим, что порядок предиктора  $l$  может быть ниже порядка корректора  $n$  и что требуемое число уточнений  $k$  редко бывает больше двух (см. п.5).

Наличие интеграла движения (2) дает возможность надежно контролировать точность счета путем слежения за колебаниями величины  $\mathcal{K}(x, u)$ . Однако, при этом увеличивается объем вычислений, поскольку выполняется отображение дополнительной переменной  $p_{N+1} = -\mathcal{H}$ . Кроме того, об удаче или неудаче с выбором величины шага  $\tau$  удается судить лишь после выполнения заметной части всей работы. В этих условиях весьма полезным может оказаться еще одно свойство обсуждаемого подхода - существование аналитической оценки ошибки счета на одном шаге интегрирования.

Производящая функция  $S(x, \bar{u}, \tau)$  является суммой первых  $n$  отличных от нуля членов ряда (10), поэтому равенство (16)  $\hat{A}_m S_1 = \hat{B}_m S_1$  выполняется лишь для  $m \leq n+1$  (этот факт можно проверить непосредственно с помощью формул (17), (18) и очевидного тождества  $\hat{a}_k S_0 = \hat{b}_k S_1$ ). Для старших номеров  $m$  имеем:

$$\hat{a}_{m-1} \equiv \hat{b}_{m-1} \equiv 0, \quad \hat{A}_m S_1 \neq \hat{B}_m S_1, \quad m > n+1. \quad (19)$$

Используя теперь общее выражение (12) в отношении функции  $\mathcal{K}(x, u)$  с учетом равенств (15), (19) находим

$$\delta \mathcal{K}_n = \mathcal{K}(\bar{x}, \bar{u}) - \mathcal{K}(x, u) = \sum_{m \geq n+1} \frac{\tau^m}{m!} (\hat{A}_{m+1} - \hat{B}_{m+1}) S_1(x, \bar{u}). \quad (20)$$

Часто для оценки величины ошибки можно ограничиться первым (главным) членом последнего соотношения

$$\delta \mathcal{K}_n \approx \frac{\tau^{n+1}}{(n+1)!} (\hat{A}_{n+2} - \hat{B}_{n+2}) S_1(x, \bar{u}). \quad (21)$$

Проверочные расчеты показывают, что получаемые с помощью оценки (21) результаты согласуются с опытом при не очень низких порядках  $n \geq 3$  (см. п.5). Это позволяет не только отказаться от "лишнего" отображения для  $p_{N+1}$ , но и наладить автоматический выбор шага в процессе счета.



Обратимся к рассмотрению конкретного примера.

5. Пример  $\mathcal{H}(x, u, t) = u^2/2 + f(x, t)$ .

Такую простую форму имеют многие нелинейные системы демонстрирующие очень сложную как регулярную, так и стохастическую динамику [1, 2]. После перехода в расширенное фазовое пространство получаем:

$$\mathcal{K}(x, u; t, w) = \frac{u^2}{2} + f(x, t) + w = 0, \quad (22)$$

где  $w = -\mathcal{H}(x, u, t)$ .

Примем, что каноническая производящая функция зависит от старых координат  $(x, t)$  и новых импульсов  $(\bar{u}, \bar{w})$ , введем сокращенное обозначение для производных

$$\frac{\partial^{m+n}}{\partial t^m \partial x^n} \equiv f_{mn} \quad (23)$$

и выпишем все основные соотношения для системы (22) до четвертого порядка включительно:

а) производящая функция (см. (10), (14)-(17)):

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{\bar{u}^2}{2} + \bar{w} + f; \\ S_2 &= \bar{u} f_{01} + f_{10}; \\ S_3 &= \bar{u}^2 f_{02} + 2\bar{u} f_{11} + f_{20} + f_{01}^2; \\ S_4 &= \bar{u}^3 f_{03} + 3\bar{u}^2 f_{12} + \bar{u}(3f_{22} + 5f_{02} f_{01}) + f_{30} + 5f_{11} f_{01}; \end{aligned} \quad (24)$$

б) каноническое отображение (см. (11)):

$$\begin{aligned} \bar{u} &= u - \tau f_{01} - \frac{\tau^2}{2} (\bar{u} f_{02} + f_{11}) - \frac{\tau^3}{6} (\bar{u}^2 f_{03} + 2\bar{u} f_{12} + f_{21} + 2f_{02} f_{01}) - \\ &\quad - \frac{\tau^4}{24} [\bar{u}^3 f_{04} + 3\bar{u}^2 f_{13} + \bar{u}(3f_{22} + 5f_{02}^2 + 5f_{03} f_{01}) + f_{31} + 5(f_{12} f_{01} + f_{11} f_{02})]; \\ \bar{x} &= x + \tau \bar{u} + \frac{\tau^2}{2} f_{01} + \frac{\tau^3}{3} (\bar{u} f_{02} + f_{11}) + \frac{\tau^4}{8} (\bar{u}^2 f_{03} + 2\bar{u} f_{12} + f_{21} + \frac{5}{3} f_{02} f_{01}); \\ \bar{w} &= w - \tau f_{10} - \frac{\tau^2}{2} (\bar{u} f_{11} + f_{20}) - \frac{\tau^3}{6} (\bar{u}^2 f_{12} + 2\bar{u} f_{21} + f_{30} + 2f_{11} f_{01}) - \\ &\quad - \frac{\tau^4}{24} [\bar{u}^3 f_{13} + 3\bar{u}^2 f_{22} + \bar{u}(3f_{31} + 5f_{12} f_{01} + 5f_{11} f_{02}) + f_{40} + 5(f_{21} f_{01} + f_{11}^2)]; \end{aligned} \quad (25)$$

в) отображение Ли (см. (3)):

$$\begin{aligned} \tilde{u} &= u - \tau f_{01} - \frac{\tau^2}{2} (\bar{u} f_{02} + f_{11}) - \frac{\tau^3}{6} (\bar{u}^2 f_{03} + 2\bar{u} f_{12} + f_{21} + f_{02} f_{01}) - \\ &\quad - \frac{\tau^4}{24} [\bar{u}^3 f_{04} + 3\bar{u}^2 f_{13} + \bar{u}(3f_{22} - 3f_{03} f_{01} - f_{02}^2) + f_{31} - f_{11} f_{02} - 3f_{12} f_{01}]; \\ \tilde{x} &= x + \tau \bar{u} - \frac{\tau^2}{2} f_{01} - \frac{\tau^3}{6} (\bar{u} f_{02} + f_{11}) - \frac{\tau^4}{24} (\bar{u}^3 f_{03} + 2\bar{u} f_{12} + f_{21} + f_{02} f_{01}); \\ \tilde{w} &= w - \tau f_{10} - \frac{\tau^2}{2} (\bar{u} f_{11} + f_{20}) - \frac{\tau^3}{6} (\bar{u}^2 f_{12} + 2\bar{u} f_{21} + f_{30} - f_{11} f_{01}) - \\ &\quad - \frac{\tau^4}{24} [\bar{u}^3 f_{13} + 3\bar{u}^2 f_{22} + \bar{u}(3f_{31} - 3f_{12} f_{01} - f_{11} f_{02}) - 3f_{21} f_{01} - f_{11}^2 + f_{40}]; \end{aligned} \quad (26)$$

г) оценки ошибки  $\delta \mathcal{K}_n$ ,  $n = 1, 2, 3, 4$  (см. (21)):

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{K}_1 &= \frac{\tau^2}{2} (\bar{u}^2 f_{02} + 2\bar{u} f_{11} - f_{01}^2 + f_{20}); \\ \delta \mathcal{K}_2 &= \frac{\tau^3}{6} (\bar{u}^3 f_{03} + 3\bar{u}^2 f_{12} + 3\bar{u} f_{21} + f_{30}); \\ \delta \mathcal{K}_3 &= \frac{\tau^4}{12} [\frac{\bar{u}^4}{2} f_{04} + 2\bar{u}^3 f_{13} + \bar{u}^2 (3f_{22} - 2f_{03} f_{01} + \frac{11}{2} f_{02}^2) + \\ &\quad + \bar{u} (2f_{31} - 4f_{12} f_{01} + 11f_{11} f_{02}) - 2f_{21} f_{01} + \frac{1}{2} (11f_{11}^2 - 5f_{03} f_{01}^2 + f_{40})]; \\ \delta \mathcal{K}_4 &= \frac{\tau^5}{24} [\frac{\bar{u}^5}{5} f_{05} + \bar{u}^4 f_{14} + \bar{u}^3 (2f_{23} - f_{04} f_{01} + 7f_{03} f_{02}) + \bar{u}^2 (2f_{32} + \\ &\quad + 23f_{12} f_{02} - 3f_{13} f_{01} - 2f_{11} f_{03}) + \bar{u} (f_{41} + 25f_{21} f_{02} - 4f_{11} f_{12} - 3f_{22} f_{01} + \\ &\quad + 3f_{02}^2 f_{01} - 5f_{03} f_{01}^2) - f_{31} f_{01} + 7f_{21} f_{11} + 3f_{11} f_{02} f_{01} - 5f_{12} f_{01}^2 + \frac{1}{5} f_{50}]; \end{aligned} \quad (27)$$

Рассмотрим подробнее одну из самых простых нелинейных неинтегрируемых систем - маятник, возмущаемый регулярной силой:

$$\mathcal{H}(x, u, t) = \mathcal{H}_0(x, u) + \varepsilon \mathcal{H}_1(x, t) = \frac{u^2}{2} - \cos x + \varepsilon \cos(\omega x + \Omega t). \quad (28)$$

Известно, что в окрестности невозмущенной сепаратрисы

$\mathcal{H}_{0S}(x, u) = 1$  возникает стохастический слой, ширина которого экспоненциально мала по параметру возмущения  $\varepsilon$  [1, 2].

Для детального изучения этого слоя необходимо не только провести длительное наблюдение за стохастической траекторией, но и сделать это достаточно аккуратно, чтобы не исказить резуль-



таты вычислительным шумом. На решение именно таких "тонких" задач ориентирован метод канонического интегрирования и любопытно выяснить, как он справляется с описанием движения вблизи сепаратрисы невозмущенного ( $\varepsilon=0$ ) маятника и что дают другие способы счета. С этой целью изучалась весьма близкая к сепаратрисе  $\mathcal{H}_{05}=1$  траектория с начальными условиями  $x_0 = -3,1415$ ,  $u_0 = 0,00001$  ( $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_{05} - 4,25 \times 10^{-9}$ ); шаг интегрирования  $\tau = 0,1$ . При отсутствии возмущения ( $\varepsilon=0$ ) эта траектория является замкнутой регулярной кривой, полупериод движения по которой равен  $T_0 = 22,74915$ . Результаты сведены в таблицу I, где в двух последних колонках приведены данные по вычисленному полупериоду колебаний  $T_c$ . В первом методе в качестве предиктора использовались отображения Ли (26) второго порядка и процесс последовательных приближений прекращался по условию  $|\bar{u}^{(k)} - \bar{u}^{(k-1)}| < 10^{-8}$ ; число  $k$  необходимых приближений не превышало двух.

Видно, что только при каноническом интегрировании ошибка ограничена и ее изменение носит колебательный характер с амплитудой  $\delta K_{max} = 1,8 \times 10^{-5}$  (теоретическая оценка по последней из формул (27) дает  $\delta K_4 \approx 1,5 \times 10^{-5}$ ). Заметим, что для установления предельной ошибки потребовалось около двух периодов колебаний и дальнейшее наблюдение за величиной  $\delta K$  можно было бы не проводить.

Обычно допустимая точность  $\delta K_{max}$  известна заранее и обеспечить ее можно (выбором шага  $\tau$ , см. (27)) при любом порядке вычислительного алгоритма. Что выгоднее: продвигаться частыми и мелкими шагами с помощью простых отображений низкого порядка  $n \leq 2$ , или делать редкие, но крупные шаги, используя более сложные отображения? Исследуем этот вопрос на примере системы (28) при  $\varepsilon = 0,1$ ;  $\omega = 1,0$ ;  $\Omega = 10,0$  и начальных условиях  $x_0 = -3,1415$ ,  $u_0 = 0,00001$ ; пусть требуемая точность счета  $\delta K_{max} \leq 2,5 \times 10^{-3}$ . Отметим, что в этом случае траектория оказывается очень сложной и нерегулярной кривой, поскольку начальные условия выбраны внутри стохастического слоя.

Результаты расчетов по формулам (25) различных порядков  $n = 1, 2, 3, 4$  приведены в таблице II, где обозначено:  $\tau_n$  - шаг интегрирования, обеспечивающий точность  $\delta K \approx 2,5 \times 10^{-3}$ ;

Таблица I.

Метод счета	Число шагов	Ошибка $\delta K_{max}$	$\left(\frac{T_c}{T_0}\right)_{max}$	$\left(\frac{T_c}{T_0}\right)_{min}$
Каноническое отображение 4-го порядка (25)	$10^3$	$1,8 \times 10^{-5}$	1.0012	1.0007
	$10^4$	$1,8 \times 10^{-5}$	1.0012	0.9976
	$10^5$	$1,8 \times 10^{-5}$	1.0012	0.9797
	$10^6$	$1,8 \times 10^{-5}$	1.0012	0.9554
Отображение Ли 4-го порядка (26)	$10^3$	$2,9 \times 10^{-5}$	0.7381	0.6961
	$10^4$	$1,4 \times 10^{-4}$	0.7381	0.5917
	$10^5$	$1,5 \times 10^{-3}$	0.7381	0.4825
	$10^6$	$1,9 \times 10^{-2}$	0.7381	0.3702
Метод Рунге-Кутты 4-го порядка	$10^3$	$4,9 \times 10^{-6}$	0.7803	0.7384
	$10^4$	$4,4 \times 10^{-5}$	0.7803	0.6371
	$10^5$	$5,2 \times 10^{-4}$	0.7803	0.5289
	$10^6$	$6,6 \times 10^{-3}$	0.7803	0.4175

Таблица II.

Порядок отображения	$\tau_n$	$N_n$	$E$	$\tau_n^*$
1	0,002	500	1,0	0,015
2	0,027	323	8,7	0,040
3	0,075	172	12,9	0,073
4	0,100	131	13,2	0,104

$N_n$  - число шагов на единицу времени счета;

$E = \tau_n N_n$  - мера эффективности алгоритма, равная длине интервала интегрирования, обработанной за единицу времени счета;

$\tau_n^*$  - теоретическая величина шага по формулам (27), отвечающая ошибке  $\delta K_n = 2,5 \times 10^{-3}$ .

Данные таблицы II иллюстрируют два важных обстоятельства:

- 1) выгодно применять алгоритмы канонического интегрирования высокого порядка;
- 2) при этом можно назначать величину шага  $\tau$  согласно аналитической оценке (21) и отказаться от слежения за текущей ошибкой.



## 6. Заключение

Рассмотренный метод не накладывает никаких принципиальных ограничений на размерность исходной гамильтоновой системы или на порядок отвечающего ей отображения. Привлечение явных соотношений Ли практически снимает, по нашему мнению, одну из самых серьезных проблем — распутывания неявных зависимостей. Формульная часть алгоритма имеет вид, легко поддающийся обработке средствами компьютерной аналитики (мы использовали *REDUCE* — 3 /13/).

Автор благодарен Б.В.Чирикову за обсуждения и советы.

## Литература

1. А.Либерман, М.Лахтенберг. Регулярная и стохастическая динамика. М.: Мир, 1984, 528 с.
2. B.V.Chirikov. Phys. Rep., 1979, vol.52, p.265.
3. C.R.Menyuk. Physica D, 1984, vol.11, N 1-2, p.109.
4. R.Ruth. IEEE Trans. Nucl. Sci., NS-30, 1983, p.2669.
5. Г.Голдстейн. Классическая механика. М.: Наука, 1975, 415 с.
6. W.A.Mersman. Celestial Mech., 3, 1971, p.384.
7. Г.Е.О.Джакаля. Методы теории возмущений для нелинейных систем. М.: Наука, 1979, 320 с.
8. J.R.Cary. Phys. Rep., 1981, vol.79, N 2, p.131.
9. H.Shniad. Celestial Mech., 2, 1970, p.114.
10. G.Hori. Publ. Astron. Soc. Japan, 18, 1966, p.287.
11. A.Deprit. Celestial Mech., 1, 1969, p.12.
12. Ф.П.Васильев. Численные методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1980, 518 с.
13. A.C.Hearn (Ed.): REDUCE user's manual. 1983. The Rand Corporation, Santa Monica. Rand Publication CP78 (4/83).



В.В.Вечеславов

МЕТОД КАНОНИЧЕСКОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ЛЮБОГО ПОРЯДКА

Препринт  
№ 89-

Работа поступила - 2 марта 1989 г.

---

Ответственный за выпуск - С.Г.Попов  
Подписано к печати 23.03.1989г. МН 10104  
Формат бумаги 60x90 1/16 Усл.1,1 печ.л., 0,9 учетно-изд.л.  
Тираж 200 экз. Бесплатно. Заказ № 35

---

Ротапринт ИЯФ СО АН СССР, г.Новосибирск, 90