

О явных разностных схемах для автономных систем дифференциальных уравнений на многообразиях *

Э.А. Айрян, М.Д. Малых, Л.А. Севастьянов, Юй Ин

27 августа 2019 г.

Аннотация

Исследуется вопрос о существовании явных и одновременно консервативных конечно разностных схем, аппроксимирующих систему обыкновенных дифференциальных уравнений. Рассматривается автономная система нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений на алгебраическом многообразии V . Консервативной называется такая разностная схема решения этой системы, расчеты по которой не выводят за пределы многообразия V , то есть сохраняют его точно. Под явной схемой понимается такая разностная схема, в которой для перехода на следующий слой требуется решить систему линейных уравнений. Сформулирована задача о построении явной консервативной схемы, аппроксимирующую заданную автономную систему на заданном многообразии. Для случая многообразия 1 дано решение этой задачи и указаны геометрические препятствия к существованию таких разностных схем. Именно, доказано, что схема существует только в том случае, когда род интегральной кривой равен 1 или 0.

Ключевые слова: метод конечных разностей эллиптические и абелевы функции algebraic correspondence

1. Введение

Одной из наиболее распространенных и востребованных математических моделей является задача Коши для автономной системы обыкновенных

* Английская версия статьи: E. A. Ayryan, M. D. Malykh, L. A. Sevastianov, and Yu Yin. On Explicit Difference Schemes for Autonomous Systems of Differential Equations on Manifolds // M. England et al. (Eds.): CASC 2019, LNCS 11661, pp. 343–361, 2019. DOI 10.1007/978-3-030-26831-2_23

дифференциальных уравнений. Аналитические методы позволяют находить для таких систем алгебраические интегралы движения [1], а численные методы приближенно строить графики частных решений [2]. Аналитические и численные методы не всегда удается согласовать. Часто оказывается, что известен алгебраический интеграл движения, но при этом используется разностная схема, которая этот интеграл не сохраняет. Поэтому в численных экспериментах остается лишь с сожалением наблюдать, как шаг за шагом меняется величина, которая на точном решении остается постоянной. Особенно неприятно, когда таковой величиной оказывается полная механическая энергия, изменения которой вносит в модель новые, не характерные для нее свойства.

В настоящей статье мы исследуем вопрос о том, что препятствует построению разностных схем, сохраняющих точно заданные интегральные многообразия. Дабы изложение не было чрезмерно абстрактным, мы будем иллюстрировать изложение примерами из теории движения твердого тела с одной закрепленной точкой [3].

2. Автономные системы на многообразиях

Рассмотрим в аффинном пространстве размерности r автономную систему дифференциальных уравнений

$$\dot{x} = f(x). \quad (1)$$

Здесь $x = (x_1, \dots, x_r)$ — точка аффинного пространства, $f = (f_1, \dots, f_r)$ — набор рациональных функций из $\mathbb{Q}(x)$. Часто такого рода системы имеют алгебраические интегралы движения или хотя бы многочлены Дарбу [1].

Определение 1. Алгебраическое многообразие V будем называть интегральным для системы (1), если всякая интегральная кривая этой системы, имеющая хотя бы одну совместную (common) точку с многообразием V , принадлежит этому многообразию целиком.

Пример 1. По определению многочленом Дарбу для системы (1) называют такой многочлен g , для которого можно указать многочлен h , такой, что

$$\sum_{i=1}^r f_i \frac{\partial g}{\partial x_i} = hg.$$

Если $x(t)$ — частное решение системы (1), то

$$\frac{dg(x(t))}{dt} = \sum_{i=1}^r \frac{\partial g}{\partial x_i} f_i = h(x(t)) \cdot g(x(t))$$

и поэтому обращение в нуль $g(x(t))$ при каком-то значении t влечет обращение в нуль этого выражения при всех допустимых значениях t . Поэтому гиперповерхность $g(x) = 0$ в аффинном пространстве является интегральным многообразием для системы (1).

Отыскание решений системы (1), принадлежащих известному интегральному многообразию, будем называть задачей об интегрировании автономной системы на многообразии. Прекрасным примером такого рода задачи является задача о вращении волчка.

Пример 2. Движение волчка [3] описывается шестью переменными — тремя координатами вектора угловой скорости p, q и r относительно главных осей, проведенных через точку закрепления, и тремя направляющими косинусами одной из главных осей $\gamma, \gamma', \gamma''$. Эти переменные удовлетворяют системе шести автономных уравнений с квадратичной правой частью

$$A\dot{p} = (B - C)qr + Mg(y_0\gamma'' - z_0\gamma'), \dots \quad (2)$$

и

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

где A, B, C — моменты инерции относительно главных осей, M — масса тела, а (x_0, y_0, z_0) — координаты центра тяжести. 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

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

а чисто геометрические соображения — третий

$$\gamma^2 + \gamma'^2 + \gamma''^2 = 1. \quad (3)$$

По аналогии с теоремой Брунса, в начале прошлого века удалось доказать, что четвертый алгебраический интеграл существует лишь в трех случаях, 1.) когда точка закрепления совпадает с центром масс (случай Эйлера-Пуансо), 2.) когда эллипсоид инерции является эллипсоидом вращения и центр тяжести лежит на оси (случае Эйлера-Лагранжа), 3.) случай Ковалевской [4]. Поэтому в общем случае систему дифференциальных уравнений (2) следует рассматривать не во всем шестимоторном пространстве, а на вложенном в него трехмерном многообразии.

3. Численное интегрирование и законы сохранения

Стандартным численным методом решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений является метод конечных разностей. В рамках этого метода систему дифференциальных уравнений заменяют на систему уравнений, описывающую переход от значения x решения (1) в некоторый момент времени t к приближенному значению \hat{x} решения в момент $t + \Delta t$. В дальнейшем мы будем рассматривать x и \hat{x} как точки двух соседних слоев, а разностную схему — как систему уравнений, задающую переход со слоя на слой. Напр., явная схема Эйлера

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

описывает такой переход и дает для $x(t + \Delta t)$ приближенное значение \hat{x} .

Говоря о разностной схеме для (1), мы подразумеваем прежде всего, что эта схема аппроксимирует дифференциальное уравнение. Как бы сложно не были устроены уравнения, описывающие переход со слоя на слой, в

окрестности общей (general) точки x и $\Delta t = 0$ эти уравнения должны иметь решения, которое разлагается в ряд по степеням Δt :

$$\hat{x} = x + g_1(x)\Delta t + g_2(x)\Delta t^2 + \dots$$

Точное решение тоже можно разложить в ряд такой формы

$$x(t + \Delta t) = x(t) + f(x(t))\Delta t + \dots$$

Если у этих рядов совпадает член при Δt , то говорят о том, что разностная схема аппроксимирует дифференциальное уравнение. Если совпадают первые s членов, то говорят об аппроксимации порядка s [5, def. 1.2]. Напр., схема Эйлера аппроксимирует исходное уравнение, порядок аппроксимации равен 1.

Замечание 1. Обычно рассматривают эти степенные ряды как сходящиеся в топологии \mathbb{C} , однако дальнейшие выкладки можно сохранить без изменения, если рассматривать эти ряды как формальные. Выбор топологии существенен при исследовании вопроса о сходимости численного метода.

Традиционно в центре внимания лежит вопрос о повышении порядка аппроксимации и накоплении ошибки округления. Мы же хотим обратиться к вопросу об использовании известных интегральных многообразий.

Схема Эйлера, равно как и прочие популярные разностные схемы, не сохраняют интегральные многообразия. Это означает, что из $x \in V$ не следует $\hat{x} \in V$. Поскольку для точного решения $x(t + \Delta t) \in V$, отклонение точек приближенного решения от многообразия V можно использовать как оценку для ошибки численного метода. Такой подход предлагает при проведении численного эксперимента пассивно наблюдать, как решение уходит с интегрального многообразия. В задачах из механики, напр., в задаче о вращении волчка (пример 2) это означает заметное нарушение фундаментальных законов механики, напр., вносит «численную» диссипацию в модель, от нее свободную. Особенно неприятно, когда не сохраняются геометрические связи, напр., сумма квадратов направляющих косинусов перестает быть равной единице. Непонятно, как это интерпретировать.

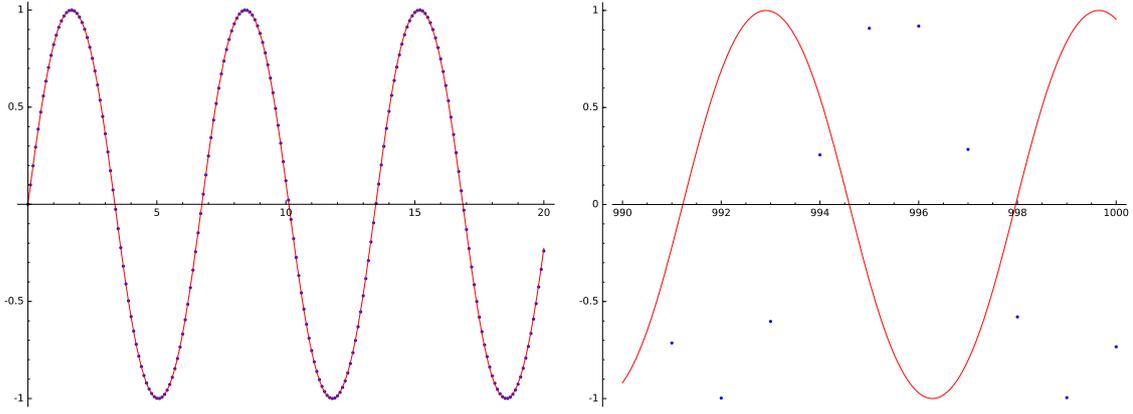


Рис. 1. Graph of $\text{sn}(t, \frac{1}{2})$ при малых и больших значениях t .

Идея использовать законы сохранения при создании численных методов возникла в середине прошлого века, а соответствующие методы получили название консервативных. Первые успехи были достигнуты при решении уравнений в частных производных. Что же касается обыкновенных дифференциальных уравнений, то лишь в конце 1980-х годов было отмечено, что в некоторых случаях можно составить разностные схемы, сохраняющие алгебраические интегральные многообразия точно [2, 6]. Так, напр., согласно теореме Купера [2, th. 2.2], схема средней точки

$$\hat{x} - x = f\left(\frac{\hat{x} + x}{2}\right) \Delta t \quad (4)$$

для системы (1) сохраняет все интегралы движения этой системы, которые задаются квадратичными формами.

Пример 3. The Jacobi elliptic functions

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

are the solution of the nonlinear system

$$\dot{p} = qr, \quad \dot{q} = -pr, \quad \dot{r} = -k^2 pq \quad (5)$$

with initial conditions

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

Эта автономная система имеет два квадратичных интеграла движения

$$p^2 + q^2 = \text{const} \quad \text{and} \quad k^2 p^2 + r^2 = \text{const} \quad (6)$$

С аналитической точки зрения эта система приметна тем, что любое ее частное решение представимо в виде отношения двух всюду сходящихся рядов по степеням t . С точки же зрения метода конечных разностей эта система замечательна тем, что ее можно аппроксимировать разностной схемой (а именно, схема средней точки (4)), сохраняющей эти интегралы точно. На рис. 1 представлен график эллиптического синуса, вычисленный в Sage по алгоритму, учитывающему периодический характер этой функции, и непосредственно по методу средней точки. Хорошо видно, что даже при экстремально больших значениях t амплитуда колебаний не падает.

Пример 4. В задаче о вращении волчка (пример 2) имеется три квадратичных интеграла, из которых два описываются квадратичными формами. Поэтому два из трех интегралов движения сохраняются точно. При этом особенно хорошо, что сохраняется закон (3), поэтому $\gamma, \gamma', \gamma''$ все еще можно интерпретировать как направляющие косинусы. Однако полная механическая энергии не является квадратичной формой и поэтому не сохраняется. В случае Эйлера-Пуансо, когда $x_0 = y_0 = z_0$ от системы 6 уравнений отщепляется система

$$Ap\dot{p} + (B - C)qr = 0, \quad B\dot{q} + (A - C)rp = 0, \quad C\dot{r} + (B - A)pq = 0, \quad (7)$$

имеющая два квадратичных интеграла

$$Ap^2 + Bq^2 + Cq^2 = \text{Const}, \quad A^2p^2 + B^2q^2 + C^2q^2 = \text{Const}. \quad (8)$$

В классических курсах механики здесь замечают, что в пространстве изменения переменных p, q, r эти два интеграла вырезают интегральную кривую, на которой система (7) сводится к квадратуре

$$\frac{A}{C - B} \int \frac{dp}{qr} = t + \text{Const},$$

где q и r рассматриваются как алгебраические функции p . Как известно, в данном случае получается эллиптический интеграл первого типа, обращение которого приводит к эллиптическим функциям Якоби. С точки зрения метода конечных разностей схема средней точки позволяет точно сохранить оба эти интегралы.

Схему средней точки для задачи о волчке в случае Эйлера-Пуансо будем называть консервативной в смысле следующего определения.

Определение 2. Разностную схему для системы (4) на многообразии V будем называть консервативной, если она ставит в соответствие произвольной точке $x \in V$ точку \hat{x} , тоже принадлежащую этому многообразию. При необходимости будем говорить более длинно, что разностная схема сохраняет многообразие V точно.

Замечание 2. В этом определении мы говорим о произвольной (general) точке x , а не о любой, поскольку, как это часто бывает в алгебраической геометрии, следует исключить особые значения, при которых система уравнений, задающих разностную схему, может выродиться.

Можно ожидать, что консервативные схемы позволяют исследовать не только количественные, но и качественные свойства решения системы (1). Напр., в примере 4 словесное описание точного и найденного таким путем приближенного решения будут идентичными: вектор угловой скорости $\vec{\omega} = (p, q, r)$ совершает периодические колебания с постоянной амплитудой, при этом выполняются два закона сохранения — законы сохранения энергии и момент импульса. Трудно, если вообще возможно, указать качественные различия полученных решений, при больших t заметны лишь количественные расхождения, обусловленные точностью вычисления периода.

В рамках концепции математического моделирования значение отыскания консервативных схем много выше. Дело в том, что законы классической механики формулируются для бесконечно малых dt , хотя в действительности эта величина должна быть весьма большой для того, чтобы

можно была пренебрегать квантовомеханическими эффектами. Эту мысль можно заметить и у Лессажа, и у Фейнмана. Проблема состоит в том, что переход от непрерывного уравнения движения к конечно-разностному по методу Эйлера приводит к нарушению фундаментальных законов природы, в том числе закона сохранения энергии. По этой причине качественные свойства того или иного явления классической механики описывают при помощи непрерывной модели, а количественные — при помощи дискретной.

Однако использование консервативных разностных схем вместо схемы Эйлера позволит записать разностный аналог уравнений Ньютона, для которого все классические законы сохранения выполняются точно. Такую дискретную модель можно использовать и для описание качественных свойств движения. Такая модель ничуть не хуже непрерывной модели, поскольку сам предельный переход $dt \rightarrow 0$ в уравнениях Ньютона является идеализацией. Вопрос о сходимости численного метода с этой точки зрения отходит на задний план, а вместе с ним и чрезмерное с физической точки зрения измельчение шага по времени.

4. Явные и неявные разностные схему

Желая использовать консервативные схемы в реальных расчетах, мы должны не только научиться строить такие схемы, но и учитывать сложность их применения. Для линейных дифференциальных уравнений схема средней точки (4) описывается системой линейных алгебраических уравнений относительно \hat{x} и поэтому организовать переход со слоя на слой не представляет никакого труда. Напротив, в случае нелинейных уравнений эта схема описывается системой нелинейных уравнений, решение которых представляет главную трудность при применения таких схем на практике.

Напомним, что численное решение систем нелинейных уравнений всегда сопряжено с целым рядом сложностей, поэтому не существует универсального численного метода решения таких систем [7]. Стандартный путь предлагает использовать итерационные методы для перехода со слоя на слой.

Из многих корней этой системы выбирают тот корень, который близок к x при малых Δt . Решение этой системы производят численно, обычно тем или иным итерационным методом, взяв значение x за первое приближение. При этом контролировать ошибку итерационного метода не представляется возможным ввиду чрезвычайной громоздкости известных оценок, и вместо этого просто фиксируют число итераций.

Современные системы компьютерной алгебры позволяют избавиться от необходимости решения систем нелинейных уравнений, путем сочетания численных и символьных методов. Опишем кратко этот прием. На подготовительном этапе, считая x, \hat{x} и Δt символьными переменными из системы алгебраических уравнений (4) исключить все $\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_r$ кроме одной и получить уравнение

$$g_i(\hat{x}_i, x, \Delta t) = 0.$$

Зная эти r уравнений, переход со слоя на слой можно вести так: подставить в эти уравнения числовые значения для x и Δt и решить численно уравнение

$$g_i(\hat{x}_i, x, \Delta t) = 0$$

относительно \hat{x}_i , отыскав корень, близкий к x_i .

Замечание 3. Точность численного решения алгебраического уравнения обычно близка к ошибке округления, но, к сожалению, в Sage оценки для этой ошибки не выводятся. Впрочем в настоящее время имеются алгоритмы, которые позволяют решать уравнения с одной неизвестной численно с точностью, заметно превышающий современные нужды прикладных задач (им был посвящена секция на NMA'2018 [8]), поэтому это место не должно стать «бутылочным горлышком» в применении консервативных схем.

Именно таким путем и были получены точки, представленные на рис. 1, вычисления проводились в Sage [9]. К сожалению, даже в этом простом примере получается уравнение 5-ой степени относительно \hat{p} , коэффициенты которого выражаются через p, q, r весьма громоздко. Переход со слоя на

слой по этим формулам становится затратным в сравнении с применением явных схемы Эйлера.

Определение 3. Разностная схема, описывающая переход со слоя на слой системой линейных алгебраических уравнений относительно \hat{x} , называется явной.

Замечание 4. Понятие явной и неявной схемы сложилось исторически и изначально речь шла о том, в какой точке берется правая часть дифференциального уравнения. Однако интересующие нас схемы устроены заметно более сложным образом, поэтому перенесение на них понятия явности требует ухватить то главное, что делает явные схемы удобными для счета. Разумеется, с точки зрения этого определения неявная схема Эйлера для линейного дифференциального уравнения является явной, а для нелинейного — неявной. В дальнейшем речь идет о нелинейных уравнениях, поэтому это отклонение не является принципиальным.

Прежде чем смирится с необходимостью решать системы нелинейных уравнений для перехода со слоя на слой, попробуем разобраться с тем, что препятствует сочетанию явности и консервативности.

5. Явные консервативные разностные схемы

А priori не ясно, имеются ли нелинейные системы на многообразиях, для которых можно построить явные схемы? Сформулируем этот вопрос в виде задачи.

Задача 1. Даны автономная система (1) и ее интегральное многообразие V , требуется выяснить, существует ли явная разностная схема, аппроксимирующая эту системы и сохраняющая точно интегральное многообразие. В случае утвердительного ответа предъявить такую разностную схему.

При стандартном подходе к построению разностных схем желают открыть «метод» (точнее говоря, алгоритм), который всякой системе (1) ста-

вит в соответствие разностную схему, которая ее аппроксимирует и сохраняет все ее интегральные многообразия из некоторого фиксированного класса (в идеале все алгебраические интегральные многообразия). Иными словами, желают открыть функтор из категории систем дифференциальных уравнений с рациональной правой частью в категорию разностных уравнений, сохраняющий все алгебраические структуры, связанные с этой системой дифференциальных уравнений. Конечно, отыскание такого метода решило бы множество проблем, в том числе дало бы решение задачи 1.

На рубеже веков казалось, что сохранение некоторых алгебраических структур системы дифференциальных уравнений должно привести к сохранению всех остальных. Напр., было найдено целое семейство схем среди схем Рунге-Кутты, которое сохраняет симплектическую структуру гамильтоновых систем и, как оказалось, сохраняют квадратичные интегралы [2, 6]. К сожалению, эти схемы подобны схеме средней точки, они не являются явными и не сохраняют интегралы более сложного вида.

Сама задача 1 много проще задачи отыскания такого универсального алгоритма.

Во-первых, в задаче 1 предполагается, что интегральное многообразие задано. Задача отыскания всех алгебраических интегралов заданной системы дифференциальных уравнений была сформулирована еще на заре возникновения дифференциального исчисления в переписке Деката с Дебоном (Florimond de Beaune), ее безуспешно пытались решить выдающиеся математики XIX и начала XX века. В настоящее время имеется несколько пакетов для отыскания алгебраических интегралов [10, 11], однако все они требуют, чтобы пользователь указывал верхний предел для порядка рассматриваемых интегралов. Вполне вероятно, что эта задача алгоритмически неразрешима.

Во-вторых, формулировка задачи 1 допускает, что для заданной системы дифференциальных уравнений и заданного интегрального многообра-

зия искомая разностная схема не существует. Всякий численный метод на заре своего возникновения претендовал на то, что при его помощи можно одинаково хорошо решить все задачи из той предметной области, для которой он создавался. Во времена Эйлера метод степенных рядов воспринимался как универсальный метод для решения обыкновенных дифференциальных уравнений, и лишь в 1860-х годах Лазарус Фукс поставил задачу об отыскании тех дифференциальных уравнений, общее решение которых представимо в виде отношения двух всюду сходящихся степенных рядов. Поэтому современная аналитическая теория дифференциальных уравнений изучает особые дифференциальные уравнения, решения которых особенно хорошо представимы степенными рядам [1]. Наша формулировка задачи 1 сделана по аналогии с формулировкой задачи Фукса.

Решение задачи 1 тесно связано с алгебраической геометрией. Задать разностную схему для системы (1) — значит указать систему уравнений, описывающих переход с одного слоя на другой. В случае одностадийных разностных схем эта система состоит из r уравнений

$$g_i(x, \hat{x}, \Delta t) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, r,$$

левые части которых принадлежат $\mathbb{Q}[x, \hat{x}, \Delta t]$. Напр., явная схема Эйлера задается уравнениями

$$\hat{x}_i - x_i - f_i(x_1, \dots, x_r)\Delta t = 0, \quad i = 1, 2, \dots, r.$$

С геометрической точки зрения эти уравнения задают алгебраическое соответствие между слоями, или, более точно, однопараметрическое семейство таких соответствий, а Δt выступает как параметр.

Определение 4. Пусть V и \hat{V} — аффинные многообразия, вложенные в A_r , $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_r)$ и $\hat{\xi} = (\hat{\xi}_1, \dots, \hat{\xi}_r)$ — два кортежа, каждый с r символьными переменными. Пусть система алгебраических уравнений

$$g_1(\xi, \hat{\xi}) = 0, \dots \tag{9}$$

обладает следующими двумя свойствами:

- если взять в качестве ξ координаты произвольной (general) точки x многообразия V , то система

$$g_1(x, \hat{\xi}) = 0, \dots \quad (10)$$

относительно $\hat{\xi}$ имеет \hat{n} различных корней, лежащих на многообразии \hat{V} и меняющихся при изменении x ,

- если взять в качестве $\hat{\xi}$ координаты произвольной (general) точки \hat{x} многообразия \hat{V} , то система

$$g_1(\xi, \hat{x}) = 0, \dots \quad (11)$$

относительно ξ имеет n различных корней, лежащих на многообразии V и меняющихся при изменении \hat{x} .

В этом случае говорят, что система алгебраических уравнений (9) задает алгебраическое соответствие типа (n, \hat{n}) между этими многообразиями V и \hat{V} . При этом корни системы (10) рассматриваются как образ точки x на \hat{V} , а корни (11) — как образ точки \hat{x} на V . Соответствия типа $(n, 1)$ называют рациональными, а соответствия типа $(1, 1)$ — бирациональными.

Замечание 5. Алгебраические соответствия были предметом изысканий в алгебраической геометрии в середине XIX века [12]. Современные авторы, обычно, рассматривают лишь рациональные соответствия, теория которых строится заметно проще, благодаря замечательным работам Гурвица [13].

Замечание 6. При особом положении точки x система (10) может иметь меньшее число корней. На основе принципа непрерывности в этих случаях можно говорить о слиянии корней или об их уходе на бесконечность, что подразумевает проективное замыкание рассматриваемых многообразий.

Всякая одностадийная разностная схема, аппроксимирующая систему (1) и сохраняющее многообразие V , задает алгебраическое соответствие на многообразии V . Эта схема явная в том и только в том случае, когда произвольной точке $x \in V$ отвечает одна единственная точка $\hat{x} \in V$, то есть

когда алгебраическое соответствие имеет тип $(n, 1)$ (рациональное соответствие).

Все сказанное можно распространить и на многостадийные схемы. В случае многостадийных схем к переменным $x, \hat{x}, \Delta t$ добавляются дополнительные переменные и надлежащим образом увеличивается число уравнений.

Напр., в s -стадийном методе Рунге-Кутты вводят дополнительные переменные k_1, \dots, k_s , интерпретируемые как вспомогательные наклона интегральной кривой. Для перехода со слоя на слой сначала вычисляют эти наклоны из системы уравнений

$$k_i = f(x + (a_{i1}k_1 + \dots + a_{is}k_s)\Delta t),$$

а затем вычисляют

$$\hat{x} = x + (b_1k_1 + \dots + b_s k_s)\Delta t.$$

Коэффициенты a_{ij}, b_j схемы подбирают такими, чтобы гарантировать аппроксимацию исходной системы (1) с как можно большим порядком. Условия аппроксимации приводят к алгебраическим уравнениям на коэффициенты, которые однако очень богаты рациональными решениями. Поэтому в итоге схема Рунге-Кутты с любым числом стадий описывается системой уравнений вида

$$g(x, k, \hat{x}, \Delta t) = 0,$$

левые части которых принадлежат полиномиальному кольцу $\mathbb{Q}[x, k, \hat{x}, \Delta t]$. Однако на практике иногда используют и коэффициенты нерациональные, поэтому представляется разумным не исключать из рассмотрения случай, когда коэффициенты схемы принадлежат алгебраическому замыканию \mathbb{Q} [14, 15].

С алгебраической точки зрения вспомогательные переменные можно исключить и получить алгебраические уравнения, описывающие переход со слоя на слой. Поэтому многостадийные схемы тоже можно рассматривать как алгебраические соответствия между слоями.

Особо хотелось бы остановиться на зависимости от Δt . Методы Эйлера, Рунге-Кутты и даже более экзотические подразумевают, что левые части уравнений, описывающие переход со слоя на слой, являются многочленами относительно x, \hat{x} и Δt . В конкретных расчетах переменной Δt всегда придают малое числовое значение, поэтому нет никаких оснований ограничивать рассмотрение этим предположением. В дальнейшем мы будем предполагать, что левые части уравнений, задающих разностную схему, являются многочленными относительно x, \hat{x} , коэффициенты которых принадлежат алгебраическому замыканию $\mathbb{Q}[\Delta t]$ или, говоря короче, являются алгебраическими функциями Δt .

Замечание 7. Предположение о полиномиальной зависимости от Δt заведомо излишне сузит класс разностных схем, среди которых следует искать решение задачи 1. Пусть, напр., интегральное многообразие является кривой. В таком случае уравнение явной схемы

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

при фиксированном x и переменном Δt дает рациональную параметризацию. Поэтому искомой схемы заведомо не существует, если интегральная кривая не является уникурсальной. В случае интегральных многообразий большей размерности, существование явной разностной схемы будет сразу давать семейство уникурсальных кривых на многообразии. Это свойство — очень редкое и поэтому мы будем вынуждены опять констатировать, что искомой разностной схемы не существует.

6. Автономная система на кривой

В случае, когда рассматриваемое интегральное многообразие V имеет размерность 1, задача 1 решается на основе классических результатов из теории алгебраических соответствий между двумя кривыми [12, §65]. В этом случае система дифференциальных уравнений сводится к абелевым квадратурам, однако это не делает этот случай тривиальным.

Пример 5. Движение волчка, закрепленного в центре тяжести, описывается системой (7) из трех дифференциальных уравнений, имеющей два квадратичных интеграла (см. пример 4). Поэтому интегральными кривыми в пространстве pqr будут эллиптические кривые, заданные двумя уравнениями (8). На интегральной кривой система из трех дифференциальных уравнений сводится к квадратуре, описывающей зависимость p, q, r от t . Эта зависимость описывается эллиптическими функциями. Более того, вся теория эллиптических функций помещается в этом примере, что уже подчеркивает его нетривиальность.

Если заданная интегральная кривая V допускает рациональную параметризацию, то в силу теоремы Люрота между этой кривой и прямой линии можно установить бирациональное соответствие [16]. Обозначим координату точки на прямой как u , тогда связь между $x \in V$ и u можно записать при помощи рациональных функций: $u = U(x)$ и $x = X(u)$. Пусть $x = x(t)$ — решение системы (1), принадлежащее рассматриваемой интегральной кривой, тогда $u = U(x(t))$ как функция t является решением дифференциального уравнения

$$\dot{u} = \frac{\partial U}{\partial x_1} f_1 + \dots + \frac{\partial U}{\partial x_r} f_r = H(u)$$

первого порядка. Запишем для этого уравнения любую явную разностную схему, напр., схема Эйлера,

$$\hat{u} = u + H(u)\Delta t$$

и перейдем обратно к переменным $x = X(u)$. В результате получим явную разностную схему

$$\hat{x} = X(\hat{u}) = X(u + H(u)\Delta t),$$

аппроксимирующую исходную систему. Таким образом, в случае, когда заданное интегральное многообразие — кривая, допускающая рациональную параметризацию, искомая в задаче 1 разностная схема существует. Эта схема задается уравнениями, коэффициенты которых зависят от параметра

Δt полиномиально (ср. замечание 7). Вместо схемы Эйлера можно использовать любую другую явную разностную схему, скажем, любую из явных схем Рунге-Кутты. Поэтому таких схем бесконечно много.

Лемма 1. Пусть автономная система (1) имеет интегральную кривую, допускающая рациональную параметризацию. Эту систему всегда возможно аппроксимировать явной разностной схемой, сохраняющей точно эту интегральную кривую.

Обратимся теперь к случаю, когда заданная интегральная кривая не допускает рациональную параметризацию. В алгебраической геометрии кривые характеризуют целым неотрицательным числом, именуемым родом (genus). Современные системы компьютерной алгебры, в том числе Maple и Sage умеют вычислять это число для заданной кривой.

Пусть имеется алгебраическое соответствие между кривыми V и \hat{V} типа (n, \hat{n}) , пусть ρ — род первой из кривых, а $\hat{\rho}$ — род второй. Согласно формуле Цейтена (Zeuthen formula) [12, п. 65, (12)] эти числа связаны:

$$\hat{\eta} - \eta = 2n(\hat{\rho} - 1) - 2\hat{n}(\rho - 1). \quad (12)$$

Здесь η и $\hat{\eta}$ — неотрицательные целые числа, которые вводятся следующим образом.

- Произвольной точке x на кривой V отвечает \hat{n} подвижных точек на \hat{V} , при этом, вообще говоря, имеются такие особые положения точки x , при которых две из этих точек сливаются в одну. Число таких слившихся точек на \hat{V} обозначим как $\hat{\eta}$, разумеется, при этом следует рассматривать положения, при котором сливаются одновременно несколько точек, как кратные. Если $\hat{n} = 1$, то таких особых точек быть не может и $\hat{\eta} = 0$.
- Аналогично, точке \hat{x} на кривой \hat{V} отвечает n подвижных точек на V , при этом имеются такие особые положения точки \hat{x} , при которых две из этих точек сливаются в одну. Число таких слившихся точек на V

обозначим как η . Если $n = 1$, то таких особых точек быть не может и $\eta = 0$.

В частности две кривые, между которыми можно установить бирациональное соответствие $n = \hat{n} = 1$, то формула Цейтена (12) дает

$$0 = 2(\hat{\rho} - 1) - 2(\rho - 1)$$

или $\rho = \hat{\rho}$. Это означает, что род — инвариант бирациональных преобразований. С точки зрения эрлангенской программы алгебраическая геометрия изучает свойства кривых, инвариантные относительно бирациональных преобразований, поэтому понятие рода оказывается в центре алгебраической теории кривых.

Явная разностная схема, сохраняющая интегральную кривую V , задает на этой кривой соответствие типа $(n, 1)$. Поэтому в формулу Цейтена (12) следует подставить $\hat{n} = 1$ и поэтому $\eta = 0$. На следующем шаге само многообразие не меняется, поэтому $\hat{\rho} = \rho$. Таким образом, формула Цейтена дает

$$\hat{\eta} = 2(n - 1)(\rho - 1).$$

При $n > 1$ и $\rho > 1$ правая часть становится отрицательной, что противоречит самому определению числа $\hat{\eta}$. Следовательно, при $\rho > 1$ число $n = 1$ и явная схема задает бирациональное соответствие. Если бы такая схема действительно существовала, то, придавая Δx различные значения, мы получили бы бесконечно много бирациональных преобразований на кривой V . Однако в силу теоремы, впервые указанной, вероятно, Пикаром, группа бирациональных преобразований на алгебраической кривой рода $\rho > 1$ — конечная.

Лемма 2. Пусть автономная система (1) имеет интегральную кривую рода $\rho > 1$. Эту систему нельзя аппроксимировать явной разностной схемой, сохраняющей точно эту интегральную кривую.

Остается рассмотреть два случая, когда $\rho = 0$ и $\rho = 1$.

Если $\rho = 0$, то, как известно, кривая V допускает рациональную параметризацию, поэтому первый случай описывается леммой 1.

Обратимся к случаю, когда интегральная кривая V имеет род 1. Допустим, что существует явная схема, которая аппроксимирует систему (1) и сохраняет интегральную кривую V рода 1 [17]. На этой кривой имеется единственный с точностью до мультипликативной константы абелев дифференциал первого типа (1st kind). Поскольку на кривой V лишь одна из переменных x_1, \dots, x_r является независимой, его всегда можно записать как $H(x)dx_1$, где H — рациональная функция на V .

Зафиксируем на V произвольную точку o и рассмотрим интеграл

$$\int_o^{\hat{x}} H(x) dx_1$$

Производная этого интеграла по x_1 является рациональной функцией на V , а сам интеграл при любом выборе верхнего предела остается конечным, и поэтому является интегралом первого рода. Это означает, что найдутся две такие константы α, β , что

$$\int_o^{\hat{x}} H(x) dx_1 = \alpha \int_o^x H(x) dx_1 + \beta. \quad (13)$$

Эти константы не зависят от x , но могут зависеть от Δt . Если бы α и в самом деле зависела от Δt , то она была бы алгебраической функцией Δt и, следовательно, имела бы особенности. Это позволило бы выбрать при фиксированном x такое положение \hat{x} , чтобы интеграл

$$\int_o^{\hat{x}} H(x) dx_1$$

стал произвольно большим, что невозможно. При $\Delta t = 0$ соотношение (13) вырождается в

$$\int_o^x H(x) dx_1 = \alpha(0) \int_o^x H(x) dx_1 + \beta(0).$$

Поэтому α тождественно равно 1. Это позволяет переписать соотношение (13) следующим образом

$$\int_x^{\hat{x}} H(x) dx_1 = \beta(\Delta t). \quad (14)$$

Зафиксируем значение x и придадим Δt малое значение. Сказать, что схема аппроксимирует систему (1), все равно что написать разложение вида

$$\hat{x} = x + f(x)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2).$$

Подставляя это выражение в (14), получим

$$\beta = H(x)f_1(x)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2).$$

Таким образом, на интегральной кривой должно выполняться равенство

$$H(x)f_1(x) = \text{const.}$$

Подытожим доказанное следующей леммой.

Лемма 3. Пусть автономная система (1) имеет интегральную кривую рода $\rho = 1$. Эту систему можно аппроксимировать явной разностной схемой, сохраняющей точно эту интегральную кривую, только в том случае, когда интеграл

$$\int \frac{dx_1}{f_1(x)}$$

является абелевым интегралом первого типа на интегральной кривой. В этом случае, искомая в задаче 1 схема описывается уравнением

$$\int_x^{\hat{x}} \frac{dx_1}{f_1} = \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (15)$$

Обратим утверждение леммы. Пусть автономная система (1) имеет интегральную кривую V рода $\rho = 1$ и пусть интеграл

$$\int \frac{dx_1}{f_1(x)}$$

является абелевым интегралом первого типа на интегральной кривой.

Зафиксируем на V произвольную неособую точку o и рядом с ней возьмем точку \hat{o} , зависящую от Δ таким образом, что

$$\int_o^{\hat{o}} \frac{dx_1}{f_1} = \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2).$$

Для того, чтобы отыскать точку \hat{o} , достаточно взять первую из ее координат равно

$$f_1(o)\Delta t,$$

а остальные определить из условия принадлежности точки \hat{o} кривой V . При этом придется решить алгебраические уравнения, поэтому координаты точки \hat{o} — алгебраические функции Δt . В силу теоремы Абеля соотношение

$$\int_x^{\hat{x}} \frac{dx_1}{f_1} = \int_o^{\hat{o}} \frac{dx_1}{f_1}$$

позволяет однозначно определить \hat{x} как рациональную функцию x . Чтобы отыскать эту функцию, нужно построить рациональную на V функцию, имеющую два простых полюса x и \hat{o} и один известный нуль o . Поскольку \hat{o} зависит от Δt алгебраически, то \hat{x} будет рациональной функцией x , коэффициенты которой зависят от Δt алгебраически.

Рассмотрим разностную схему, переход со слоя на слой в которой описывается эта функцией. Поскольку выполняется соотношение

$$\int_x^{\hat{x}} \frac{dx_1}{f_1} = \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

из которого следует

$$\frac{\Delta x}{f_1} = \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2),$$

эта разностная схема аппроксимирует первое из уравнений системы (1) и точно сохраняет интегральную кривую, и следовательно, аппроксимирует все остальные уравнения. Поэтому так заданная разностная схема является искомой в задаче 1. Отсюда мы получаем лемму, обратную к лемме 3.

Лемма 4. Пусть автономная система (1) имеет интегральную кривую рода $\rho = 1$. Эту систему можно аппроксимировать явной разностной схемой, сохраняющей точно эту интегральную кривую, если интеграл

$$\int \frac{dx_1}{f_1(x)}$$

является абелевым интегралом первого типа на интегральной кривой.

Замечание 8. В условиях леммы 4 система (1) имеет интегральную кривую V , на которой зависимость x_1 от t описывается квадратурой

$$\int \frac{dx_1}{f_1(x)} = t + C.$$

Поэтому на точном решении верно

$$\int_{x(t)}^{x(t+\Delta t)} \frac{dx_1}{f_1} = \Delta t.$$

Иными словами, наша разностная схема давала бы точное решение, если бы можно было взять $\beta = \Delta t$ в формуле (15). Такой выбор β , однако, невозможен, поскольку равенство

$$\int_o^{\hat{o}} \frac{dx_1}{f_1} = \Delta t$$

привело бы к тому, что координаты точки \hat{o} зависели бы Δt трансцендентным образом. Таким образом, мы бы получили разностную схему, уравнения которой содержали бы Δt трансцендентным образом.

Подытожим доказанное в виде теоремы.

Теорема 1. Пусть автономная система (1) имеет интегральную кривую рода ρ .

- Если род равен 0, то существует бесконечное число явных разностных схем, сохраняющих эту кривую точно.

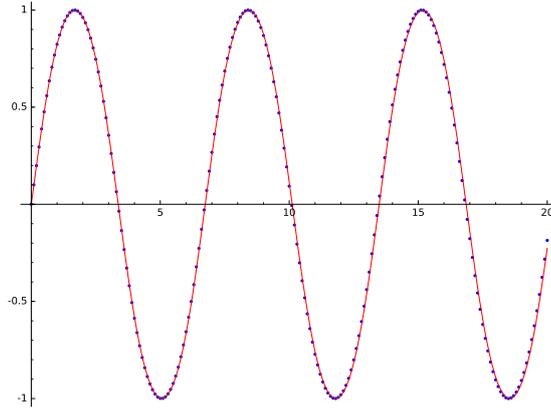


Рис. 2. Graph of $\text{sn}(t, \frac{1}{2})$, вычисленный по явной консервативной разностной схеме.

- Если род равен 1, то таковая существует в том и только в том случае, когда

$$\int \frac{dx_1}{f_1}$$

является интегралом первого рода на кривой V .

- Если род больше 1, то такой схемы не существует.

Пример 6. Эллиптические функции Якоби — решение системы (5) на интегральной кривой

$$p^2 + q^2 = 1 \quad \text{and} \quad k^2 p^2 + r^2 = 1.$$

Эта кривая имеет род 1, а сама система на этой кривой может быть записана как квадратура

$$\int \frac{dp}{qr} = t + \text{const}$$

или

$$\int \frac{dp}{\sqrt{(1-p^2)(1-k^2 p^2)}} = t + \text{const}.$$

Еще Якоби заметил, что интеграл, стоящий справа, остается конечным при любом выборе пределов интегрирования, то есть по современной классификации является абелевым интегралом первого типа на эллиптической кривой V . Поэтому в силу леммы 4 существует явная разностная схема,

сохраняющая эту кривую. При этом переход со слоя на слой осуществляется по формуле

$$\int_{(p,q,r)}^{(\hat{p},\hat{q},\hat{r})} \frac{dp}{qr} = \beta(\Delta t)$$

В силу теоремы сложения для эллиптических функций [18, §22.8], это соотношение можно переписать в алгебраическом виде как

$$\hat{p} = \frac{p \operatorname{cn} \lambda \operatorname{dn} \beta - \operatorname{sn} \beta qr}{1 - k^2 p^2 \operatorname{sn}^2 \beta}$$

$$\hat{q} = \frac{q \operatorname{cn} \beta - \operatorname{sn} \beta \operatorname{dn} \beta pr}{1 - k^2 p^2 \operatorname{sn}^2 \beta}$$

и

$$\hat{r} = \frac{r \operatorname{dn} \beta - k^2 \operatorname{sn} \beta \operatorname{cn} \beta pq}{1 - k^2 p^2 \operatorname{sn}^2 \beta}.$$

Остается подобрать β таким образом, чтобы разностная схема аппроксимировало исходное дифференциальное уравнение, то есть

$$\beta = \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2),$$

и чтобы уравнения, описывающие переход со слоя на слой, зависели от Δt алгебраическим образом. Этого можно достигнуть, взяв

$$\operatorname{sn} \beta = \Delta t, \quad \operatorname{cn} \beta = \sqrt{1 - \Delta t^2}, \quad \operatorname{dn} \beta = \sqrt{1 - k^2 \Delta t^2}.$$

На рис. 2 представлен график эллиптического синуса, вычисленный стандартными средствами Sage (сплошная линия), и по предложенной явной схеме. Хорошо видно прекрасное совпадение результатов, что и не удивительно, поскольку у нас получается разностная схема, которая без всякой связи с методом конечных разностей была использована Гудерманом для создания таблиц эллиптических функций [19, Abh. 1].

Пример 7. В случае Эйлера-Пунасо (пример 4) интеграл

$$\int \frac{dp}{qr}$$

на эллиптической кривой (8) является интегралом первого типа, поэтому в силу леммы 4 существует явная разностная схема, сохраняющая точно интегральную кривую. Составить эту схему средствами Sage мешает то обстоятельство, что среди инструментов для работы с алгебраическими кривыми нет построения главной функции. Вычисления же на руках удобно вести, предварительно сделав замену переменных, приводящую к эллиптическим функциям Якоби.

7. Заключение

В настоящей статье была рассмотрена автономная система обыкновенных дифференциальных уравнений на алгебраическом многообразии V .

Явные разностные схемы удобны для расчета приближенного решения этой системы, однако они уводят решение с интегрального многообразия. В механических задачах такие схемы вносят в математическую модель новые численные эффекты, напр., диссипацию, или вовсе приводят к результатам, которые невозможно интерпретировать геометрически.

Разностные схемы, которые не уводят решение с многообразия V , мы назвали консервативными. Эти схемы замечательны тем, что дают в наше распоряжение дискретную модель того или иного механического явления, в рамках которой фундаментальные законы сохранения выполняются точно. Это позволяет использовать такие модели не только для количественного, но и для качественного исследования механических явлений.

Хотя законы классической механики формулируются для бесконечно малых dt , в реальных задачах всегда известен характерный минимальный масштаб по времени Δt . Попытке рассматривать уравнения Ньютона как конечно-разностные препятствует только то, что их пытаются заменить неконсервативной схемой. Отыскав консервативную схему, мы получаем дискретную математическую модель, статус которой ничуть не ниже статуса непрерывной модели. При этом выбор шага определяется физическими соображениями, а не сходимостью численного метода.

К сожалению, обычно консервативные схемы оказываются неявными и переход со слоя на слой оказывается весьма затратным. Поэтому мы сформулировали задачу 1 об отыскании явной консервативной разностной схемы для заданной системы дифференциальных уравнений и дали этой задаче геометрическую интерпретацию.

Для случая многообразия размерности 1 мы дали полное решение этой задачи. Это решение позволяет высказать несколько гипотез относительно общего случая.

Во-первых, оказалось, что имеется чисто геометрическое препятствие к существованию явных и одновременно консервативных схем — род кривой V . Если род кривой больше 1, то такой схемы не существует. В частности, если автономная система на общей (general) кривой, порядок которой больше 3, то такой схемы не существует (prop. 2). Это означает, что поиски универсального метода отыскания явной консервативной схемы для любой системы дифференциальных уравнений тщетны.

На правах гипотезы заметим, что автономная система на многообразии общего вида не должна допускать явных консервативных схем.

Во-вторых, оказалось, что явная консервативная схема для системы на кривой существует в двух весьма несхожих случаях: если род интегральной кривой равен 1 и если род равен 0. В первом случае (prop. 3) разностная схема задает бирациональное соответствие между слоями, а сама автономная система должна интегрироваться в эллиптических функциях. Во втором случае (prop. 1) таких схем бесконечно много, но сам случай совершенно не интересен, поскольку рациональной заменой переменных можно понизить порядок системы, не изменив ее вида. Фактически это случай системы на аффинном пространстве.

Мы предполагаем, что автономная система на многообразии допускает явную консервативную разностную схему в двух случаях.

Во-первых, если это многообразие абелево, а сама система интегрируется в абелевых функциях, примером такой системы является волчок в

случае Ковалевской (пример 2), двойной маятник [20], система Гарнье [21] или система, рассмотренная в нашей работе [22].

Во-вторых, если рациональной заменой можно свести исходную систему к системе того же вида, но меньшего порядка.

Поскольку теория алгебраических поверхностей уже достаточно разработана, можно надеется на то, что задачу 1 в ближайшее время удастся решить для случая поверхностей.

Список литературы

- [1] Goriely A. Integrability and nonintegrability of dynamical systems. World Scientific Publ., 2001.
- [2] E. Hairer, G. Wanner, C. Lubich, Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations, 2nd Edition, Springer, New York, 2000.
- [3] Golubev W.W. Lectures on integration of the equations of motion of a rigid body about a fixed point. Jerusalem, 1960.
- [4] *Polubarinova-Kochina P. Ya.* On unambiguous solutions and algebraic integrals of a problem about rotation of a gyroscope at a motionless point // S.A. Chaplygin (ed.). *Dvizhenie tverdogo tela vokrug nepodvizhnoj toчки.* Academy of Sciences of the USSR: Moscow-Leningrad, 1940. In Russian.
- [5] E. Hairer, G. Wanner, S. P. Nørsett. Solving Ordinary Differential Equations. Nonstiff Problems. Vol. 1. Springer: Berlin, 2008.
- [6] J. M. Sanz-Serna, Symplectic Runge–Kutta Schemes for Adjoint Equations, Automatic Differentiation, Optimal Control, and More, SIAM REVIEW 56 (1) (2016) 3–33.
- [7] www.nr.com

- [8] Geno Nikolov, Natalia Kolkovska, Krassimir Georgiev (Eds.) Numerical Methods and Applications. 9th International Conference. Springer, 2018
- [9] SageMath, the Sage Mathematics Software System (Version 7.4), The Sage Developers, 2016, <https://www.sagemath.org>.
- [10] Bostan A., Chéze G., Cluzeau T. and Weil, J.-A. Efficient Algorithms for Computing Rational First Integrals and Darboux Polynomials of Planar Polynomial Vector Fields // Math. Comp. 2016. Vol. 85. P. 1393-1425.
- [11] *Malykh M.D.* On integration of the first order differential equations in finite terms // J. Phys.: Conf. Ser. 788 012026 (2017)
- [12] *Zeuthen.* Lehrbuch der abzählenden Methoden der Geometrie. Teubner, 1914.
- [13] *Hartshorne R.* Algebraic Geometry. Springer, 1977.
- [14] S. I. Khashin, A symbolic-numeric approach to the solution of the Butcher equations, Can. Appl. Math. Q 17 (1) (2009) 555–569.
- [15] S. I. Khashin, Butcher algebras for Butcher systems, Numerical Algorithms 63 (4) (2013) 679–689.
- [16] Severi F. Lezioni di geometria algebrica. Padova: Angelo Graghi, 1908.
- [17] Weierstrass K. Math. Werke. Bd. 4. Berlin, Mayer&Müller, 1902.
- [18] NIST Digital Library of Mathematical Functions, 2018. Version 1.0.21. URL: <https://dlmf.nist.gov>.
- [19] Weierstrass K. Math. Werke. Bd. 1. Berlin, Mayer&Müller, 1892.
- [20] Enolskii, Pronine, Richter. Double Pendulum and ϑ -Divisor. // J. Nonlinear Sci. Vol. 13. P. 157–174 (2003)
- [21] Garnier R. Sur une classe de systèmes différentiels abéliens déduits de la théorie des équations linéaires// Rendiconti del Circolo mat. di Palermo. Vol. 43. P. 155-191 (1919).

- [22] *Malykh M.D., Sevastianov L.A.* On an example of a system of differential equations that are integrated in Abelian functions// J. Phys.: Conf. Ser. 937 012027 (2017)