Методы разделения операторов высокого порядка

Докладчик: **Наркевич Григорий Эдуардович**
narkevich.g@phystech.edu

Научный руководитель: **Голубев Василий Иванович**
Доктор физико-математических наук, доцент
w.golubev@mail.ru

ФПМИ МФТИ

15 апреля 2025 г.

Промежуточные результаты

1. Получены локальные ошибки классических методов и зависимости коэффицинтов
2. Оценки на норму коммутаторов
3. Лемма о связи порядка коммутатора с размерностью пространства
4. Оценки нормы локальной ошибки классических методов

Ошибка метода Ли-Троттера

Метод имеет вид:

$$\Phi_{\Delta t} = e^{\Delta t D^{[1]}} \circ e^{\Delta t D^{[2]}} =$$

$$= I + \Delta t(D^{[1]} + D^{[2]}) + \Delta t^2 \left(\frac{(D^{[1]})^2}{2} + D^{[1]} D^{[2]} + \frac{(D^{[2]})^2}{2} \right) + \mathcal{O}(\Delta t^3)$$

Точное решение:

$$e^{\Delta t (D^{[1]} + D^{[2]})} = I + \Delta t(D^{[1]} + D^{[2]}) + \frac{\Delta t^2}{2}(D^{[1]} + D^{[2]})^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

Ошибка метода Ли-Троттера

Вычитаем приближённое решение из точного:

$$\boxed{\mathcal{E}_2 = \frac{\Delta t^2}{2}[D^{[1]}, D^{[2]}]}$$

Коэффициент перед коммутатором определяется как:

$$\kappa_{2,1} = \frac{1}{2}\alpha_1\beta_1 = \frac{1}{2}.$$

Ошибка метода Стрэнга

Явно метод выглядит следующим образом:

$$\Phi_{\Delta t} = e^{\frac{\Delta t}{2} D^{[1]}} \circ e^{\Delta t D^{[2]}} \circ e^{\frac{\Delta t}{2} D^{[1]}},$$

Точное решение имеет вид:

$$e^{\Delta t (D^{[1]} + D^{[2]})} = I + \Delta t (D^{[1]} + D^{[2]}) + \frac{\Delta t^2}{2} (D^{[1]} + D^{[2]})^2 +$$

$$+ \frac{\Delta t^3}{6} (D^{[1]} + D^{[2]})^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

Ошибка метода Стрэнга

$$\boxed{\mathcal{E}_3 = \Delta t^3 \left(\frac{1}{96}[D^{[1]}, [D^{[1]}, D^{[2]}]] + \frac{1}{12}[D^{[2]}, [D^{[1]}, D^{[2]}]] \right)}$$

Коэффициент перед $[D^{[1]}, [D^{[1]}, D^{[2]}]]$:

$$\kappa_{3,1} = \frac{1}{24}\left(\alpha_1^3 + \alpha_2^3\right) = \frac{1}{24}\left(\left(\frac{1}{2}\right)^3 + \left(\frac{1}{2}\right)^3\right) = \frac{1}{96}.$$

Коэффициент перед $[D^{[2]}, [D^{[1]}, D^{[2]}]]$:

$$\kappa_{3,2} = \frac{1}{12}\beta_1^3 = \frac{1}{12} \cdot 1^3 = \frac{1}{12}.$$

Ошибка метода Ёсиды 4-го порядка

Метод имеет вид:

$$\Phi_{\Delta t} = e^{\alpha_1 \Delta t D^{[1]}} \circ e^{\beta_1 \Delta t D^{[2]}} \circ e^{\alpha_2 \Delta t D^{[1]}} \circ e^{\beta_2 \Delta t D^{[2]}} \circ e^{\alpha_3 \Delta t D^{[1]}},$$

где коэффициенты расщепления:

$$\alpha_1 = \alpha_3 = \frac{1}{2(2 - 2^{1/3})}, \quad \alpha_2 = 1 - 2\alpha_1, \quad \beta_1 = \beta_2 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}.$$

Точное решение:

$$e^{\Delta t (D^{[1]} + D^{[2]})} = \sum_{k=0}^{5} \frac{(\Delta t)^k}{k!} (D^{[1]} + D^{[2]})^k + \mathcal{O}(\Delta t^6).$$

Ошибка метода Ёсиды 4-го порядка

$$\boxed{\mathcal{E}_5 = \frac{\Delta t^5}{120}\left(\frac{1}{1920}K_{5,1} + \frac{1}{480}K_{5,2}\right), \quad \kappa_{5,1} = \frac{1}{1920}, \quad \kappa_{5,2} = \frac{1}{480}}$$

$$\kappa_{5,1} = \frac{1}{1920}(2\alpha_1^5 + 2\alpha_3^5 - \alpha_2^5), \quad \kappa_{5,2} = \frac{1}{480}(\beta_1^5 + \beta_2^5).$$

Оценки на норму коммутаторов

Коммутатор второго порядка:

$$[D_1, D_2] = \sum_i \left(\sum_j \left(\frac{\partial f_i^{[2]}}{\partial y_j} f_j^{[1]} - \frac{\partial f_i^{[1]}}{\partial y_j} f_j^{[2]} \right) \right) \frac{\partial}{\partial y_i},$$

Введем супремумную норму:

$$\|[D_1, D_2]\|_{\text{sup}} = \max_{1 \le i \le n} \sup_{y \in \Omega} \left| \sum_j \left(\frac{\partial f_i^{[2]}}{\partial y_j} f_i^{[1]} - \frac{\partial f_i^{[1]}}{\partial y_j} f_i^{[2]} \right) \right|$$

Оценки на норму коммутаторов

Theorem

$$\|[D_1, D_2]\| \leq \sum_j \left| \frac{\partial f_i^{[2]}}{\partial y_j} f_j^{[1]} - \frac{\partial f_i^{[1]}}{\partial y_j} f_j^{[2]} \right| \leq n \left(\|\partial D_1\| \cdot \|D_2\| + \|\partial D_1\| \cdot \|D_2\| \right)$$

Lemma (О связи порядка коммутатора с размерностью пространства)

Коммутатор порядка $p+1$ оценивается сверху как константа, зависящая от операторных норм и матрицы Якоби $f^{[k]}$, умноженная на n^p, где n - размерность пространства:

$$K_{p+1,(.)} \leq n^p \cdot C(\|D_2\|, \|D_1\|, \|\partial D_1\|, \|\partial D_2\|)$$

Оценки на норму ошибки классических методов

1. **Ли-Троттер:**

$$\|\mathcal{E}_2\| = \frac{\Delta t^2}{2}[D^{[1]}, D^{[2]}] \leq \frac{\Delta t^2}{2} n \left(\|\partial D_1\| \cdot \|D_2\| + \|\partial D_1\| \cdot \|D_2\| \right)$$

2. **Стрэнг:**

$$\|\mathcal{E}_3\| \leq \frac{3n^2 \Delta t^3}{32} \left(\|D^{[1]}\|^2 \|\partial D^{[2]}\| + \|D^{[2]}\|^2 \|\partial D^{[1]}\| \right) +$$

$$+ \frac{3n^2 \Delta t^3}{16} \|D^{[1]}\| \|D^{[2]}\| \left(\|\partial D^{[1]}\| + \|\partial D^{[2]}\| \right)$$

3. **Ёсида, 4 порядок**

$$\|\mathcal{E}_5\| \leq \frac{n^4 \Delta t^5}{1920} \left(\|D^{[1]}\|^3 \|D^{[2]}\|^2 + 4 \|D^{[2]}\|^3 \|D^{[1]}\|^2 \right) \|\partial D^{[1]}\| \|\partial D^{[2]}\|$$

Планируемые направления исследования

1. Формулировка и доказательство общих оценок на нормы ошибок классических методов
2. Обобщение классических методов
3. Формирование методов высокого порядка в случае разбиения более чем на два векторных поля
4. Исследование областей стабильности
5. Проведение численных экспериментов

Литература

1. E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner, Geometric numerical integration: structure preserving algorithms for ordinary differential equations, vol. 31, Springer Science Busi ness Media, 2006.
2. S. K. Godunov, A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics, Matematicheskii Sbornik, 89 (1959), pp. 271–306.
3. Improving the stability and efficiency of high-order operator-splitting methods Siqi Wei, Victoria Guenter, Raymond J. Spiteri
4. W. Auzinger, H. Hofst¨ atter, D. Ketcheson, and O. Koch, Practical splitting methods for the adaptive integration of nonlinear evolution equations. Part I: Construction of optimized schemes and pairs of schemes, BIT Numerical Mathematics, 57 (2017), pp. 55–74.
5. R. J. Spiteri and S. Wei, Fractional-step Runge–Kutta methods: Representation and linear stability analysis, Journal of computational physics, 476 (2023), p. 111900.

Спасибо за внимание!