УДК 681.5.015.23

Методы разделения операторов высокого порядка

Наркевич Григорий Эдуардович, Голубев Василий Иванович

Московский физико-технический институт

Метод разделени операторов является эффективным методом постоения численного решения дифференциальных уравнений. Один из простейших методов (Trotter, 1959) использовал метод композиции двух потоков дифференциально уравнения для получения решения. С целью уменьшения ошибки имело смысл построить симметричный метод (Strang 1968, Marchuk 1968), являющийся по сути композицией метода Ли-Троттера и сопряженного к нему. Также был построен более общий симметричный метод (Yoshida 1990), предполагающий разбиение двух исходных потоков с некоторым шагом. Поскольку в общем случае операторы разбиения, очевидно, не коммутируют, построение методов данного класса предполагает многократное вычисление вложенных коммутаторов. В данной работе были получены оценки на супремумные нормы коммутаторов, что позволило оценить сверху локальные ошибки классических методов. Кроме того, был построен симметрический метод в случае разбиения исходного ДУ на N векторных полей (оригинальные статьи предполагают разбиение лишь на два векторных поля). Для нового метода были получены оценки на локальные ошибки и исследована его стабильность.

Рассмотрим дифференциальное уравнение (1) и связанный с ним дифференциальный оператор (2):

$$\frac{dy}{dx} = \sum_k f^{[k]}(y) \tag{1}$$

$$D_i = \sum_j f_j^{[i]}(y)\frac{\partial}{\partial y_j} \tag{2}$$

Лемма (Грёбнер, 1960). Пусть $\varphi_s^{[1]}$ и $\varphi_t^{[2]}$ — потоки дифференциальных уравнений $\dot{y} = f^{[1]}(y)$ и $\dot{y} = f^{[2]}(y)$ соответственно. Для их композиции выполняется

$$\left(\varphi_t^{[2]} \circ \varphi_s^{[1]}\right)(y_0) = \exp(sD_1)\exp(tD_2)\,\mathrm{Id}(y_0).$$

Применение леммы Гребнера, формулы Бейкера–Кэмпбелла–Хаусдорфа (BCH) и разложения Тейлора дает возможность получать разложение дифференциального оператора, соответсвующего точному решению.

Можно показать (W. Auzinger, H. Hofst atter, D. Ketcheson, and O. Koch, 2017), что локальная ошибка метода может быть представлена как

$$\mathcal{E}_{p+1} = \frac{\Delta t^{p+1}}{(p+1)!}\sum_{j=1}^{\gamma_{p+1}} \kappa_{p+1,j} K_{p+1,j}, \tag{3}$$

где $\kappa_{p+1,j}$ — константы, зависящие от коэффициентов расщепления $\alpha_k^{[\ell]}$, а $K_{p+1,j}$ — γ_{p+1} коммутаторов $D^{[1]}$ и $D^{[2]}$ порядка $(p+1)$.

Здесь γ_{p+1} - порядок коммутаторов (по сути своей вложенность).

Покажем локальные ошибки классических методов:

Метод	**Порядок**	**Локальная ошибка**
Ли-Троттер	1	$\mathcal{E}_2 = \frac{\Delta t^2}{2}[D^{[1]}, D^{[2]}]$
Стрэнг	2	$\mathcal{E}_3 = \Delta t^3 \left(\frac{1}{96}[D^{[1]}, [D^{[1]}, D^{[2]}]] + \frac{1}{12}[D^{[2]}, [D^{[1]}, D^{[2]}]]\right)$
Ёсида	4	$\mathcal{E}_5 = \frac{\Delta t^5}{120}\left(\frac{1}{1920}K_{5,1} + \frac{1}{480}K_{5,2}\right)$

Лемма. *Рассмотрим норму коммутаторов. Тогда имеет место оценка*

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

Здесь n - размерность пространства.

Лемма (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:*

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

Таким образом, можно оценить локальные ошибки классических методов:

Метод	**Оценка**
Ли-Троттер	$\frac{\Delta t^2}{2} n \left(\|\partial D_1\| \cdot \|D_2\| + \|\partial D_1\| \cdot \|D_2\|\right)$
Стрэнг	$\frac{3n^2 \Delta t^3}{32} \left(\|D^{[1]}\|^2 \|\partial D^{[2]}\| + \|D^{[2]}\|^2 \|\partial D^{[1]}\|\right) + \frac{3n^2 \Delta t^3}{16} \|D^{[1]}\| \|D^{[2]}\| \left(\|\partial D^{[1]}\| + \|\partial D^{[2]}\|\right)$
Ёсида	$\frac{n^4 \Delta t^5}{1920} \left(\|D^{[1]}\|^3 \|D^{[2]}\|^2 + 4\|D^{[2]}\|^3 \|D^{[1]}\|^2\right) \|\partial D^{[1]}\| \|\partial D^{[2]}\|$

Теорема. *Оценка на локальную ошибку метода Ёсиды произвольного порядка имеет вид:*

$$\|\mathcal{E}_{2k+1}\| \leq \frac{n^{2k} \Delta t^{2k+1}}{1920 \cdot 4^{k-2}} \left(\|D^{[1]}\|^{2k-1} \|D^{[2]}\|^2 + 2k \|D^{[2]}\|^{2k-1} \|D^{[1]}\|^2\right) \|\partial D^{[1]}\|^k \|\partial D^{[2]}\|^{k-1}$$

Рекурсивно построенный метод Ёсиды в случае разбиения на N векторых полей имеет вид:

$$\Phi_h^{(2k)} = \bigcirc_{i=1}^m \Phi_{w_i h}^{(2k-2)} = \bigcirc_{j=1}^{2k+1} \left(\bigcirc_{l=1}^N \varphi_{w_j h}^{[l]}\right)$$

Теорема. *Оценка на локальную ошибку обобщенного метода Ёсиды произвольного порядка имеет вид:*

$$\|\mathcal{E}_{2k+1}\| \leq \frac{n^{2k} \Delta t^{2k+1}}{1920 \cdot 4^{k-2} \cdot N^{2k}} \left(\sum_{j_1, \ldots, j_{2k+1}=1}^N \|f^{[j_1]}\| \cdots \|f^{[j_{2k+1}]}\|\right) \prod_{m=1}^k \|\partial f^{[j_m]}\|$$

Теорема. *Для системы $\dot{y} = \sum_{j=1}^N f^{[j]}(y)$, где каждое векторное поле $f^{[j]}$ имеет максимальное отрицательное собственное значение $\lambda^{[j]}$, функция устойчивости метода Ёсиды порядка $2k$ выражается как:*

$$R(z) = \prod_{m=1}^{2k+1} \prod_{j=1}^N \left(1 + \frac{\lambda^{[j]}}{\lambda_{ref}} \cdot w_m \cdot z\right),$$

где:
$\lambda_{ref} = \max_j |\lambda^{[j]}|$ *— эталонное собственное значение*
$z = \lambda_{ref} \Delta t$ *— нормированный параметр устойчивости*

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.*

6. *Yoshida, Haruo (1990) Construction of higher order symplectic integrators. Physics Letters A, 150. 262-268*

7. *Splitting Methods for differential equations Sergio Blanes, Fernando Casas, Ander Murua*

8. *Order estimates in time of splitting methods for the nonlinear Schrödinger equation, Jan 1, 2002, Christophe Besse, Brigitte Bidégaray, Stéphane Descombes*

9. *Fractional-Step Runge–Kutta Methods: Representation and Linear Stability Analysis, May 2022, Raymond J Spiteri, Siqi Wei*

10. *Practical splitting methods for the adaptive integration of nonlinear evolution equations. Part I: Construction of optimized schemes and pairs of schemes. Winfried Auzinger · Harald Hofst¨ atter · David Ketcheson · Othmar Koch*