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

20 мая 2025 г.

Введение

Введение: Применение методов ращепления высокого порядка позволяет эффективно строить приближённые решения с контролируемой точностью.
Мотивация: Исследование направлено на преодоление ограничений классических методов, таких как рост ошибок в многомерных системах, и расширение их применимости к задачам с разбиением на произвольное число компонентов.
Актуальность: Разработка методов актуальна для современных вычислительных задач, включая моделирование квантовых систем, молекулярную динамику и нелинейные уравнения, где требуются высокая точность и устойчивость.
Состояние исследований: Троттер (1959) использовал метод композиции двух потоков дифференциально уравнения для получения решения. Рассматривалась композиция данных методов (Strang 1968, Marchuk 1968) и более общие конструкции (Yoshida 1990).

Общая постановка задачи

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

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

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

Пусть $\varphi_t^{[i]}$ – потоки уравнения (1). Тогда можно показать, что

$$\varphi_t^{[i]}(y_0) = \sum_{k \geq 0} \frac{t^k}{k!} (D_i^k \operatorname{Id})(y_0) = \exp(tD_i) \operatorname{Id}(y_0) \tag{3}$$

Классические результаты

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

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

Расщепление Ли-Троттера (1959)

$$\Phi_h^* = \varphi_h^{[2]} \circ \varphi_h^{[1]},$$
$$\Phi_h = \varphi_h^{[1]} \circ \varphi_h^{[2]},$$

Расщепление Стрэнга (Марчука) (1968)

$$\Phi_h^{[S]} = \varphi_{h/2}^{[1]} \circ \varphi_h^{[2]} \circ \varphi_{h/2}^{[1]}$$

Общая процедура ращепления. Метод Ёсиды (1900)

$$\Psi_h = \varphi_{b_m h}^{[2]} \circ \varphi_{a_m h}^{[1]} \circ \varphi_{b_{m-1} h}^{[2]} \circ \ldots \circ \varphi_{a_2 h}^{[1]} \circ \varphi_{b_1 h}^{[2]} \circ \varphi_{a_1 h}^{[1]}$$

Локальная ошибка метода

Одним из способов измерения точности метода операторного расщепления является мера локальной ошибки. Показано, что для метода порядка p ведущая локальная ошибка $\mathcal{E}_{p+1}$ может быть записана как:

$$\mathcal{E}_{p+1} = \frac{\Delta t^{p+1}}{(p+1)!} \sum_{j=1}^{\gamma_{p+1}} \kappa_{p+1,j} K_{p+1,j}, \tag{4}$$

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).

Локальные ошибки классических методов

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

Оценки на норму коммутаторов

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

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

$$\begin{cases} \left| \frac{\partial f_i^{[2]}}{\partial y_j} f_j^{[1]} \right| \le \|\partial D_2\| \cdot \|D_1\| \\ \left| \frac{\partial f_i^{[1]}}{\partial y_j} f_j^{[2]} \right| \le \|\partial D_1\| \cdot \|D_2\| \end{cases} \implies$$

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

Здесь n - размерность пространства.

Оценки на норму коммутаторов

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:

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

Доказательство.

Следует непосредственно из предыдущей оценки. $\square$

Оценки локальных ошибок 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**

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

О локальной ошибки общего метода Ёсиды

Theorem (О локальной ошибки общего метода Ёсиды)

Для локальной ошибки метода Ёсиды порядка 2k справедлива оценка:

$$\|\mathcal{E}_{2k+1}\| \leq$$

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

Доказательство.

Основное соотношение:

$$\|\mathcal{E}_{2k+3}\| = \|\mathcal{E}_{2k+1}\| \cdot \frac{n^2\Delta t^2}{4} \left(\|D^{[1]}\|^2\|D^{[2]}\| + \|D^{[2]}\|^2\|D^{[1]}\| \right).$$

□

Обобщенный метод Ёсиды в случае разбиения на N векторых полей

В первую очередь построим базовый метод 2-го порядка и сопряженный к нему:

$$\Phi_h^{(2)} = \varphi_h^{[1]} \circ \varphi_h^{[2]} \circ \ldots \circ \varphi_h^{[N]}$$

$$\left(\Phi_h^{(2)}\right)^* = \varphi_h^{[N]} \circ \ldots \circ \varphi_h^{[2]} \circ \varphi_h^{[1]}$$

Теперь рекуррентно построим симметричный метод порядка произвольного:

$$\Phi_h^{(2(k+1))} = \Phi_{sh}^{(2k)} \circ \left(\Phi_{(1-2s)h}^{(2k)}\right)^* \circ \Phi_{sh}^{(2k)}$$

Таким образом, обобщенный метод имеет следующий вид:

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

Theorem

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

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

Доказательство.

Ошибка порядка $2k+3$ возникает из коммутаторов, содержащих $2k+3$ операторов $f[j]$. Каждый коммутатор порядка $2k+3$ оценивается через коммутаторы порядка $2k+1$:

$$\|[\mathcal{E}_{2k+1}, f[j]]\| \leq n \left(\|\partial \mathcal{E}_{2k+1}\| \cdot \|f[j]\| + \|\partial f[j]\| \cdot \|\mathcal{E}_{2k+1}\| \right).$$

□

Устойчивость нового метода

Вблизи положения равновесия каждое векторное поле аппроксимируется линейной системой:

$$f^{[j]}(y) \approx \lambda^{[j]} y.$$

Theorem

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*

Численный эксперимент для устойчивости

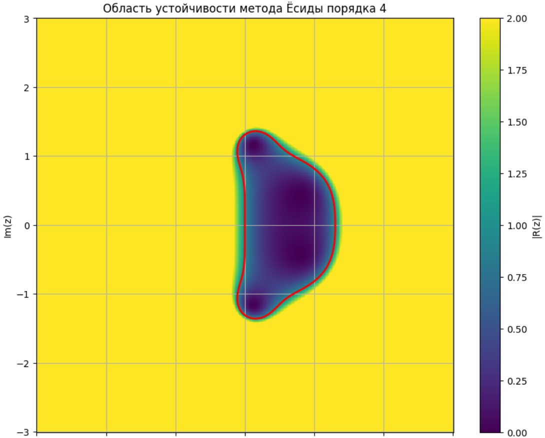
Исследование областей устойчивости будем проводить для уравнения Ходжкина-Хаксли.

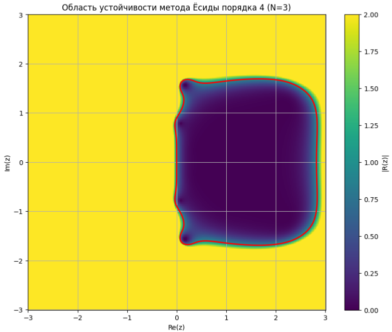
$$\begin{cases} C\dot{V} = I_{\mathrm{ext}} - g_{\mathrm{Na}} m^3 h (V - E_{\mathrm{Na}}) - g_{\mathrm{K}} n^4 (V - E_{\mathrm{K}}) - g_{\mathrm{L}} (V - E_{\mathrm{L}}), \\ \dot{m} = \alpha_m(V)(1 - m) - \beta_m(V) m, \\ \dot{h} = \alpha_h(V)(1 - h) - \beta_h(V) h, \\ \dot{n} = \alpha_n(V)(1 - n) - \beta_n(V) n, \end{cases}$$

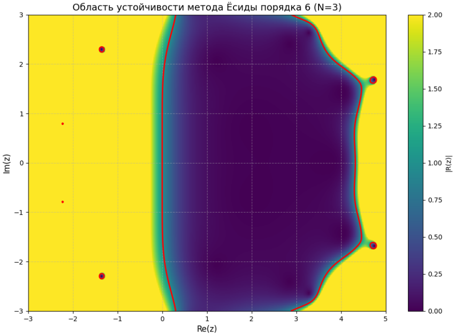
Два векторных поля, метод порядка 4

Функция устойчивости для метода Ёсиды 4-го порядка:

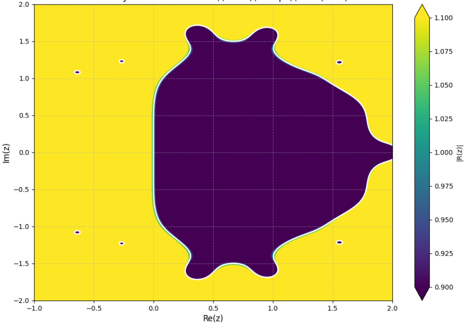
$$R(z) = \prod_{m=1}^{4} \left(1 + w_m z\lambda + \frac{(w_m z\lambda)^2}{2} + \frac{(w_m z\lambda)^3}{6} + \frac{(w_m z\lambda)^4}{24} \right),$$



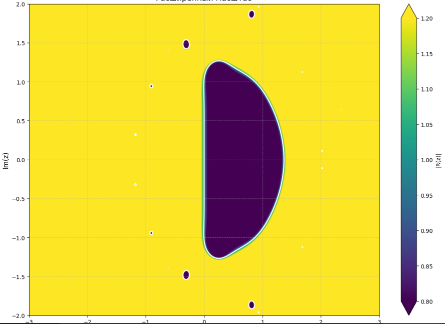

Область устойчивости метода Ёсиды порядка 4 (N=3)
Re(z)
Im(z)
|R(z)|


Область устойчивости метода Ёсиды порядка 6 (N=3)
Re(z)
Im(z)
|R(z)|

Область устойчивости метода Ёсиды порядка 6 (N=4)



Область устойчивости метода Ёсиды порядка 8 (N=4)
Расширенный масштаб



Результаты исследования

1. Получены оценки на супремумные нормы коммутаторов
2. Получены оценки локальных ошибок классических методов
3. Построен симметрический метод в случае разбиения исходного ДУ на N векторных полей (оригинальные статьи предполагают разбиение лишь на два векторных поля)
4. Получена оценка на локальную ошибку нового метода произвольного порядка
5. Исследованы области стабильности нового метода

Литература

1. E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner, Geometric numerical integration: structure preserving algorithms for ordinary differential equations, vol. 31, Springer Science Business 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!