



HAL
open science

Construction of pseudo-geometric integrators

Vladimir Salnikov, Daria Loziienko, Aziz Hamdouni

► **To cite this version:**

Vladimir Salnikov, Daria Loziienko, Aziz Hamdouni. Construction of pseudo-geometric integrators. Programming and Computer Software, 2021. hal-03444929

HAL Id: hal-03444929

<https://hal.science/hal-03444929>

Submitted on 23 Nov 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

УДК 514.8

ПОСТОРОЕНИЕ ПСЕВДО-ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ИНТЕГРАТОРОВ.

© 2022 г. Д. Лозиенко*, В. Сальников**, А. Хамдуни*

Университет города Ла Рошель17042 Ла Рошель, Проспект Мишеля Крепо, Франция****ЦНРС и Университет города Ла Рошель**17042 Ла Рошель, Проспект Мишеля Крепо, Франция**E-mail: daria.lozienko1@univ-lr.fr, vladimir.salnikov@univ-lr.fr, aziz.hamdowni@univ-lr.fr*

Поступила в редакцию 28.07.2021

В данной работе мы рассматриваем задачу построения геометрических интеграторов высшего порядка. В частности, мы изучаем случаи, когда точное сохранение геометрической структуры при дискретизации невозможно или неоправданно технически сложно. Для таких ситуаций мы вводим понятие псевдо-геометрических интеграторов и объясняем особенности их построения. Основным мотивирующим примером этого подхода являются структуры Дирака в контексте механических систем со связями, но область его применения гораздо шире.

1. ВВЕДЕНИЕ / МОТИВАЦИЯ

Данная статья – продолжение серии работ, касающихся геометрических интеграторов, применяемых для компьютерного моделирования механических систем. Изучение геометрических интеграторов – численных методов сохраняющих внутреннюю геометрическую структуру дифференциальных уравнений – в свою очередь, является важной частью более глобально проекта по “геометризации механики”.

Наиболее хорошо изученным примером этого подхода является использование симплектических и вариационных интеграторов для консервативных конечномерных механических систем. Динамика системы описывается в непрерывном случае либо Гамильтоновыми уравнениями, внутренняя структура которых задаётся симплектической формой, либо уравнениями Эйлера–Лагранжа, полученными применением вариационного принципа к некоторому функционалу (см. например, [1]). При дискретизации этих уравнений в Гамильтоновом случае сохраняется симплектическая форма (см. обзор таких методов в [2]). Тогда можно показать ([3]), что, так как динамика задаётся в точности функцией

полной энергии системы, некоторая её дискретная версия будет тоже сохраняться – разницу между этой дискретной версией и исходной непрерывной функцией можно оценить и тем самым контролировать сохранение энергии в численном счёте. В Лагранжевой картине строится дискретный аналог вариационного принципа (ДВП, [4]), что позволяет не только выписать соответствующую разностную схему, но и подобрать шаг интегрирования для точного сохранения энергии.

В связи с эффективностью и надёжностью симплектических и вариационных методов возникло естественное направление исследований более общих геометрических интеграторов: цель этих работ – расширить класс механических систем, для которых такой подход применим, описать их внутреннюю геометрическую структуру и построить соответствующие разностные схемы. Мы приводим обзор таких методов (возможно, не исчерпывающий) в [5], обращая особое внимание на так называемую обобщённую и градуированную геометрию.

Под обобщённой геометрией мы понимаем, в первую очередь, структуры Дирака, которые естественным образом возникают при описании

диссипативных и взаимодействующих систем, а также систем со связями. Последним и посвящена эта статья. В предыдущей работе по этой теме ([6]) мы сформулировали ряд открытых вопросов, для решения которых может быть полезна компьютерная алгебра. Один из них, а именно построение разностной схемы по заданной структуре Дирака, оказался концептуально более глубоким, чем просто применение существующих алгоритмов символьных вычислений – мы формулируем его снова здесь и предложим алгоритмический метод его решения.

2. СОХРАНЕНИЕ СТРУКТУР ДИРАКА

Как мы уже упомянули, структуры Дирака возникают в достаточно общих ситуациях при качественном анализе механических систем. Они определены, в частности, с этой мыслью в оригинальной работе [7], упрощённое изложение которой мы привели в [6]. Для самодостаточности этой статьи напомним, что речь по-прежнему идет о двойственности описания механических систем: динамику можно рассматривать в терминах векторных или ковекторных полей на фазовом пространстве. Структуры Дирака дают геометрическое описание связи между двумя картинками: в каждой точке обобщенного фазового пространства выполняется некоторое линейное соотношение между объектами, а глобальная структура удовлетворяет дифференциальному условию инволютивности.

Структура Дирака для систем со связями – вполне естественный пример, с точки зрения геометра, она является (деформированным) образом так называемого распределения связей. Её применение для построения численного метода, сохраняющего связи, по-видимому, впервые подробно описано в [8], основываясь на вариационном подходе ([4]). В [9] мы построили естественную модификацию этого метода, позволяющую улучшить точность интегрирования. Именно этот процесс построения разностной схемы мы и предложили автоматизировать в [6].

Чтобы понять трудность этого процесса, подчеркнём важное отличие метода, основанного на структуре Дирака от симплектического и некоторых других геометрических интеграторов. Для симплектических интеграторов, вне зависимости от порядка метода, соответствующая

дифференциальная форма сохраняется точно, то есть можно ожидать, что её погрешность будет близка к машинному нулю. В таком случае повысить порядок разностной схемы можно стандартными подходами, например, методом сплиттинга: шаг интегрирования делится на меньшие интервалы, на каждом из которых применяется исходная разностная схема. В случае же структуры Дирака исходная схема получена применением ДВП, в котором некоторые приближения зафиксированы путём выбора, пусть даже естественного, но априори ничем не обусловленного. Это значит, что гарантировать сохранение структуры с машинной точностью нельзя: по крайней мере, соответствующее утверждение нам не известно и оно не подтверждается численным экспериментом.

Для случаев, когда точное сохранение геометрической структуры невозможно или технически неоправданно сложно, разумно допустить её сохранение приближённо. Сформулируем следующее естественное определение:

Определение 1. Будем называть разностную схему *псевдо-геометрическим интегратором порядка (k, m)* , если она определяет численный метод порядка k по решению и сохраняет геометрическую структуру с точностью до порядка m по шагу интегрирования.

Понятно, что интересные случаи соответствуют значениям порядка $m > k$. В этих обозначениях настоящий геометрический интегратор будет псевдо-геометрическим порядка (k, ∞) .

Ниже мы объясним, как такие интеграторы строятся для структур Дирака, избегая, в частности, необходимости “угадывания” дискретизации. Построение основано на использовании обобщения семейства методов Рунге–Кутты.

3. АЛГОРИТМ

С учётом вышесказанного алгоритм построения разностной схемы выглядит вполне естественно. В качестве входных данных мы будем считать известными уравнения движения системы и некоторое явное (алгебраическое) описание их геометрической структуры в терминах динамических переменных.

Алгоритм 1.

1. Для всех динамических переменных системы записать метод Рунге–Кутты с числом стадий s с неопределёнными коэффициентами.
2. Предположить, что в момент времени n все динамические переменные выполняют условие принадлежности структуре Дирака, оценить в общем виде погрешность этого условия в момент времени $(n + 1)$ с учётом приближения, записанного в пункте 1).
3. В порядке возрастания степеней разложения погрешности по шагу интегрирования приравнять к нулю максимально возможное количество слагаемых – получить условия на коэффициенты из пункта 1).

Несмотря на кажущуюся простоту данного алгоритма, важно понимать ряд деталей.

Замечание 1. Методы Рунге–Кутты, используемые в пункте 1) могут и, в общем случае, должны быть неявными, то есть таблицы Батчера будут полными, а не треугольными. Это наблюдение следует из того факта, что для частного симплектического случая структуры Дирака соответствующий интегратор должен воспроизвести известный симплектический ([10]).

Замечание 2. Для разных переменных методы могут и, в общем случае, должны иметь разные коэффициенты. Именно это обобщение стандартных методов Рунге–Кутты позволяет (ценой введения дополнительных динамических переменных) достичь дополнительной свободы, помогающей сохранять геометрическую структуру. Однако не нужно думать, что коэффициенты для разных переменных не будут повторяться совсем. Разумное разделение слова “подскажет” структура Дирака: естественно, например, объединить в три группы, соответственно, координаты, скорости и импульсы системы.

Замечание 3. Используемое условие на принадлежность структуре Дирака может содержать производные некоторых функций, характеризующих систему, но не производные динамических переменных – мы рассмотрим эту ситуацию в примере ниже. Это значит, что условие, выражаемое в пункте 2), чисто алгебраическое. Погрешность же получается явным его разложением в ряды Тейлора вокруг точки в момент времени n , используя пункт 1) как приращение аргумента.

4. ИМПЛЕМЕНТАЦИЯ

Каждый пункт приведённого алгоритма – совершенно явное символьное вычисление, которое разумно производить средствами компьютерной алгебры. Единственный этап, который мы не описали, связан непосредственно с нахождением коэффициентов из условий пункта 3). Заметим, что по построению, эти условия полиномиальные, а некоторые даже линейные. Поэтому задача решается стандартными методами компьютерной алгебры. Заметим также, что если решение уравнений на коэффициенты неединственно, разумно выбрать наиболее явный метод, чтобы ускорить дальнейший численный счёт.

Основная цель данного алгоритма – построение разностных схем высокого порядка. То есть, число стадий методов Рунге–Кутты интересно сделать достаточно большим. С ростом числа стадий количество неопределённых коэффициентов растёт квадратично, и промежуточные приближения будут входить в условия нелинейно – это может вызвать технические трудности связанные с решением системы из пункта 3). Напомним, однако, что для каждой группы переменных результат будет представителем семейства методов Рунге–Кутты. Это значит, что даже если самое общее решение получить не удастся, например, из-за нехватки вычислительных ресурсов, можно рассмотреть комбинации известных классических решений.

Для наших тестовых примеров мы использовали язык программирования Python с открытыми библиотеками символьного вычисления. Но для имплементации подойдёт любой программный пакет компьютерной алгебры с функциями решения систем полиномиальных уравнений.

5. ПРИМЕР СИСТЕМ СО СВЯЗЯМИ

Достаточно характерный пример применения приведенного выше алгоритма – изучение механических систем со связями. Речь идёт о механических системах, на координаты и скорости которых наложены некоторые ограничения. Уравнения, описывающие их динамику имеют вид:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = \sum_{a=1}^m \lambda_a \alpha^a, \quad (5.1)$$

где $L(q, \dot{q})$ – Лагранжиан системы, а α^a – генераторы идеала порождённого связями, λ_a – соответствующие множители Лагранжа. Условия на принадлежность этому идеалу обычно заданы явно и имеют вид $\varphi^a(q, \dot{q}) = 0$. На практике такие системы решаются введением дополнительных переменных¹ $v := \dot{q}$, что позволяет переписать (5.1) как систему первого порядка. Систему можно численно интегрировать классическими методами, если множители Лагранжа явно вычисляются по координатам и скоростям в каждый момент времени.

Подход с использованием структур Дирака подразумевает, в дополнение к v , введение переменных p , соответствующим импульсам системы. Они получаются при рассмотрении Гамильтонова описания системы, то есть после преобразования Лежандра. Отличие от классического подхода заключается в том, что переменные v и p теперь будут рассматриваться одновременно, а их соотношение через преобразование Лежандра, а также связи, наложенные на систему, будут учитываться отдельными условиями – эти условия в точности соответствуют определению структуры Дирака \mathbb{D}_Δ для тройки (q, v, p) (см. [6]). Опуская геометрические подробности, приведём явный вид описанных выше условий:

$$\dot{q} = v, \quad \dot{p} - \frac{\partial L}{\partial q} \in \Delta_0 \quad (5.2)$$

$$\dot{q} \in \Delta, \quad p = \frac{\partial L}{\partial v}; \quad (5.3)$$

здесь Δ обозначает распределение связей, то есть, в каждой точке конфигурационного пространства – множество совместных со связями

¹Все переменные (q, v, \dots) , естественно, многомерные. Но чтобы не перегружать уравнения дополнительными обозначениями, мы опускаем соответствующие индексы, если это не создаёт неоднозначности.

скоростей, а Δ_0 , как и в уравнении (5.1), соответствующий идеал. Таким образом, при условиях (5.3), уравнения (5.2) эквивалентны (5.1) в непрерывном случае.

Рассмотрим для примера, согласно алгоритму выше, семейство двустадийных методов Рунге–Кутты с шагом h :

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= q_n + h(b_1 l_1 + b_2 l_2) \\ p_{n+1} &= p_n + h(\tilde{b}_1 \tilde{l}_1 + \tilde{b}_2 \tilde{l}_2), \\ v_{n+1} &= v_n + h(\bar{b}_1 \bar{l}_1 + \bar{b}_2 \bar{l}_2), \end{aligned} \quad (5.4)$$

где в правых частях разностной схемы стоят стандартные приближения правых частей дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} l_1 &= RHS_q(q_n + ha_{11}l_1 + ha_{12}l_2), \\ l_2 &= RHS_q(q_n + ha_{21}l_1 + ha_{22}l_2), \end{aligned}$$

и аналогично для \tilde{l}, \bar{l} , с очевидными изменениями. Подчеркнём ещё раз, что методы могут быть неявными, то есть изначально все коэффициенты $a_{ij}, \tilde{a}_{ij}, \bar{a}_{ij}$ не равны нулю. Вспомним также, что все переменные системы многомерные, но коэффициенты мы различаем лишь для трёх групп: для координат, скоростей и импульсов системы.

Теперь подставим разложения (5.4) в условия (5.3) на принадлежность структуре Дирака, которые в данном случае распадается на два: импульсы определены преобразованием Лежандра: $\psi(q, p, v) := (p - \frac{\partial L}{\partial v}) = 0$, и скорости удовлетворяют связям: $\varphi^a(q, v) = 0$. Выпишем, как и предполагает пункт 2) алгоритма соответствующие ряды Тейлора для ψ и φ^a , с учётом уравнений движения (5.1) и (5.2). Приравняв к нулю коэффициенты при разных степенях h , получим следующее утверждение.

Теорема 1. *Разностная схема (5.4) определяет численный метод по крайней мере второго порядка, если выполнены следующие условия на коэффициенты:*

$$\begin{aligned} b_1 + b_2 &= 1, \quad \tilde{b}_1 + \tilde{b}_2 = 1, \quad \bar{b}_1 + \bar{b}_2 = 1, \\ b_1 a_{11} + b_2 a_{21} + b_1 a_{12} + b_2 a_{22} &= \frac{1}{2}, \\ \tilde{b}_1 \tilde{a}_{11} + \tilde{b}_2 \tilde{a}_{21} + \tilde{b}_1 \tilde{a}_{12} + \tilde{b}_2 \tilde{a}_{22} &= \frac{1}{2}, \\ \bar{b}_1 \bar{a}_{11} + \bar{b}_2 \bar{a}_{21} + \bar{b}_1 \bar{a}_{12} + \bar{b}_2 \bar{a}_{22} &= \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Этот численный метод сохраняет структуру Дирака \mathbb{D}_Δ и, как следствие, преобразование Лежандра и связи системы, по крайней мере с точностью до третьего порядка, если к тому же выполнены следующие условия:

$$\begin{aligned} \tilde{b}_1 a_{11} + \tilde{b}_2 a_{21} + \tilde{b}_2 a_{22} + \tilde{b}_1 a_{12} &= \frac{1}{2}, \\ \tilde{b}_1 \bar{a}_{11} + \tilde{b}_2 \bar{a}_{21} + \tilde{b}_2 \bar{a}_{22} + \tilde{b}_1 \bar{a}_{12} &= \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

а также:

$$\begin{aligned} b_1 \bar{a}_{11} + b_1 \bar{a}_{12} + b_2 \bar{a}_{21} + b_2 \bar{a}_{22} &= \frac{1}{2}, \\ \bar{b}_1 a_{11} + \bar{b}_1 a_{12} + \bar{b}_2 a_{21} + \bar{b}_2 a_{22} &= \frac{1}{2}, \\ \bar{b}_1 \bar{a}_{11} + \bar{b}_1 \bar{a}_{12} + \bar{b}_2 \bar{a}_{21} + \bar{b}_2 \bar{a}_{22} &= \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Иными словами, при выполнении условий выше численный метод (5.4) является псевдо-геометрическим интегратором по крайней мере порядка (2, 3).

Замечание 4. Первый набор условий в теореме (5.5) не определяет никаких зависимостей между разными группами переменных – это суть классические условия для методов Рунге–Кутта. Остальные условия разделены на две группы, поскольку уравнения (5.6) получаются из сохранения преобразования Лежандра, а (5.7) из сохранения связей, но для произвольной структуры Дирака, конечно, нет никаких причин рассматривать их отдельно.

Замечание 5. Формулировка “по крайней мере” для порядка метода не случайна. В данном примере легко понять, какие условия независимы. В общем же случае, когда рассматриваются многостадийные методы Рунге–Кутта продолжение разложения Тейлора может быть громоздким с сильно нелинейными зависимостями. То есть определить алгоритмически, получают ли новые условия или следствия старых, может быть технически трудно или невозможно. Точное решение этого вопроса касается напрямую символьных вычислений и выходит за рамки данной статьи. На практике же он может решаться принудительной остановкой разложения до достижения максимального количества слагаемых в пункте 3) алгоритма.

Замечание 6. Заметим также, что достаточно часто уравнения (5.5–5.7) допускают множество решений, однако разложение до следующей степени шага дискретизации приводит к несовместным условиям. Тогда разумно рассмотреть частичное сохранение геометрической структуры: в нашем примере это может быть только преобразования Лежандра или только уточнение связей.

Замечание 7. В приведённой теореме мы рассматриваем наиболее общий случай структуры Дирака для систем со связями. То есть мы предполагаем, что нет никаких известных функциональных зависимостей между L и φ^a , и не ожидаем никаких упрощений рядов Тейлора из-за вырождения функций. В конкретных примерах механических систем некоторые условия могут быть ослаблены, или полученный метод может оказаться более высокого порядка.

В качестве иллюстрации метода мы применили данную теорему для системы описывающей движение математического маятника на плоскости в поле силы тяжести, подробно описанной в [9]. Динамика системы описывается в конфигурационном пространстве $Q = \mathbb{R}^2$, $q = (q_x, q_y)$, она задаётся свободным Лагранжианом

$$L = \frac{m}{2}(\dot{q}_x^2 + \dot{q}_y^2) - mgq_y$$

и связью $\varphi = \|q\|^2 - l^2$. Структура Дирака \mathbb{D}_Δ задаётся стандартным условием $p = \frac{\partial L}{\partial v}$ и идеалом, порождённым $\alpha := d\varphi$.

Таблица ниже показывает сравнение двух разных псевдо-геометрических методов порядка (2, 3) (RKD-2), построенных по нашему алгоритму, с двухшаговым методом из [9] (Dirac-2).

метод	шаг	погрешность	время
RKD-2 ver 1	10^{-2}	$\sim 10^{-2}$	1.64
	10^{-3}	$\sim 10^{-5}$	7.27
	10^{-4}	$\sim 10^{-7}$	80.36
RKD-2 ver 2	10^{-2}	$\sim 10^{-3}$	1.63
	10^{-3}	$\sim 10^{-5}$	6.64
	10^{-4}	$\sim 10^{-7}$	50.30
Dirac-2	10^{-2}	$\sim 3 \times 10^{-2}$	0.25
	10^{-3}	$\sim 2 \times 10^{-3}$	2.24
	10^{-4}	$\sim 10^{-4}$	24.63

Из таблицы видно, что за счёт неясности метода новый псевдо-геометрический интегратор проигрывает в производительности, однако существенно выигрывает в вопросе сохранения геометрической структуры. Заметим, что даже метод Dirac-2 превосходит классические методы сравнимого порядка, а наш подход позволил значительно улучшить его точность.

Конечно, движение математического маятника – это лишь “академический пример”, где динамика хорошо изучена. Но именно поэтому он позволяет проиллюстрировать особенности интегратора, не отвлекаясь на, возможно, сложное нелинейное поведение системы.

6. ВМЕСТО ЗАКЛЮЧЕНИЯ

В этой работе мы ввели понятие псевдо-геометрических интеграторов и предложили алгоритм их построения. При всей своей естественности и кажущейся простоте, алгоритм оказывается чрезвычайно эффективным.

В рамках универсального подхода он позволяет воспроизвести результат [8] – предложенный там метод в наших обозначениях будет псевдо-геометрическим порядка (1,2) для структуры Дирака. Кроме того, когда структура Дирака строится по симплектической структуре (случай описанный здесь, но без связей), метод позволяет восстановить симплектический метод описанный в [11] и всё семейство симплектических методов Рунге–Кутты ([10]).

С точки зрения приложений в геометризации механики, наш подход обладает важным преимуществом: он применим как для Лагранжева формализма, так и для Гамильтонова описания. Первый важен, например, в контексте вариационной формулировки динамики на структурах Дирака ([12]), второе естественно возникает при построении разностных схем, сохраняющих структуру Пуассона ([13]). А для конкретных задач компьютерного моделирования применение псевдо-геометрических интеграторов позволяет более точно различать динамические режимы даже для потенциально хаотических систем ([14]).

Благодарности. В.С. благодарен С.А. Абрамову и А. Прокопене за полезные замечания при подготовке рукописи. Эта работа частично поддержана проектом CNRS 80 Prime “GraNum”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *B. И. Арнольд*, Математические методы классической механики // 3-е изд. – М.: Наука, 1989.
2. *E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner*, Geometric Numerical Integration // Springer Series in Computational Mathematics, 2006.
3. *D. Razafindralandy, A. Hamdouni, M. Chhay*, A review of some geometric integrators // Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences, SpringerOpen, 2018, 5 (1), pp.16.
4. *J. E. Marsden, M. West*, Discrete mechanics and variational integrators // Acta Numer. 10 (2001).
5. *V. Salnikov, A. Hamdouni, D. Loziienko*, Generalized and graded geometry for mechanics: a comprehensive introduction // Mathematics and Mechanics of Complex Systems, 9, 1, 2021.
6. *В. Сальников, А. Хамдуни*, Дифференциальная геометрия и механика – источник задач для компьютерной алгебры // Программирование, 2020, № 2, с. 57–63
7. *T.J Courant*, Dirac manifolds // Trans. Am. Math. Soc. 1990. V. 319. pp. 631–661.
8. *H. Yoshimura, J.E. Marsden*, Dirac Structures in Lagrangian Mechanics Part I: Implicit Lagrangian Systems // Journal of Geometry and Physics, 57, (2006), 133–156.
9. *V. Salnikov, A. Hamdouni*, From modelling of systems with constraints to generalized geometry and back to numerics // Z Angew Math Mech., Vol. 99, Issue 6, 2019.
10. *D. Razafindralandy, V. Salnikov, A. Hamdouni, and A. Deeb*, Some robust integrators for large time dynamics, // Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences, 6, 5, 2019.
11. *V. Salnikov, A. Hamdouni*, Revisiting geometric integrators in mechanics, // Proceedings of The Fourth International Conference “Computer algebra”, 2021, Moscow, Russia.
12. *O. Cosserat, C. Laurent–Gengoux, A. Kotov, L. Ryvkin, V. Salnikov*, On Dirac structures admitting a variational approach // final preparation, 2021.
13. *O. Cosserat*, Discretizations respecting Poisson structures // in preparation, 2021.
14. *D. Loziienko, V. Salnikov*, Pseudo-geometric integrators – some applications in mechanics // in preparation, 2021.