

УДК 517.9+519.6+533

ПРИМЕНЕНИЕ ВАРИАЦИОННЫХ ПРИНЦИПОВ МЕХАНИКИ
ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ДИСКРЕТНЫХ ПО ВРЕМЕНИ
РАЗНОСТНЫХ МОДЕЛЕЙ ГАЗОДИНАМИКИ.
8. СОХРАНЕНИЕ ФАЗОВОГО ОБЪЕМА И КАНОНИЧНОСТИ
В НЕЯВНЫХ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫХ СХЕМАХ

Ю. А. Бондаренко
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Доказывается сохранение фазового объема и каноничности (гамильтоновости) в конечно-разностных схемах лагранжевой газовой динамики, построенных последовательным вариационным методом, использующим дискретную по времени и пространству формулировку принципа наименьшего действия Гамильтона—Остроградского. Приведен пример конечно-разностных схем, которые не удается построить последовательным вариационным методом и в которых для произвольного переменного шага по времени при любом способе выбора *скрытых* обобщенных координат и *скрытых* обобщенных импульсов не сохраняется фазовый объем и тем самым не сохраняется каноничность.

Ключевые слова: лагранжева газовая динамика, принцип наименьшего действия, вариационные разностные схемы, неявные разностные схемы, схемы с весами, переменный шаг по времени, фазовый объем, каноничность, *скрытые* переменные.

Введение

Настоящая работа является непосредственным продолжением работы [1] и посвящена изучению свойств сохранения каноничности и фазового объема в неявных конечно-разностных схемах газовой динамики в переменных Лагранжа (данная работа составляет с [1] единое целое и разделена на две статьи только из-за ограничений по объему). Основное внимание уделяется сравнительному изучению неявных конечно-разностных схем, построенных последовательным вариационным методом [2, 3], и более традиционных конструкций, имеющих второй порядок аппроксимации по времени.

Последовательный вариационный метод [2] основан на использовании дискретной одновременно по времени и пространству аппроксимации функционала действия сплошной среды [4]; вычисление условий стационарности такого конечномерного функционала приводит сразу к конечно-разностным схемам. Это отличает метод [2] от вариационного подхода, предложенного в [5], в котором используются дискретные аналоги функционала действия в непрерывном времени для построения дифференциально-разностных схем, а конечно-разностные схемы строятся затем на основе принципа полной консервативности.

Отличительная особенность неявных вариационных схем состоит в том, что последовательный вариационный метод приводит в конечно-разностном уравнении для скорости к нестандартным коэффициентам, которые зависят от характера переменности шага по времени. При переменном шаге по времени не удалось найти таких конструкций дискретного функционала действия, которые приводили бы к неявному уравнению для скорости с постоянным весом $\theta = 1/2$. В [3] доказано, что в многомерных конечно-разностных схемах, которые построены последовательным вариационным

методом, при инвариантности действия относительно вращений выполнен закон сохранения момента количества движения. В то же время неявная конечно-разностная схема с постоянным весом $\theta = 1/2$ при произвольно переменном шаге по времени нарушает этот закон сохранения. Но это ничего не объясняет в одномерном случае.

Содержание данной работы — изучение свойств сохранения каноничности и фазового объема. Напомним их смысл [6, 7, 1]. Определяющей характеристикой гамильтоновых систем $\frac{dq_k}{dt} = \frac{\partial \mathbb{H}}{\partial p_k}$, $\frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial \mathbb{H}}{\partial q_k}$, $k = 1, \dots, K$, является каноничность фазового потока $(q^{(1)}, p^{(1)}) \mapsto (q(t, q^{(1)}, p^{(1)}), p(t, q^{(1)}, p^{(1)}))$, т. е. сохранение симплектической структуры $\omega^2 = dp \wedge dq$. Отображение $g: (q^{(1)}, p^{(1)}) \mapsto (q^{(2)}(q^{(1)}, p^{(1)}), p^{(2)}(q^{(1)}, p^{(1)}))$ будет каноническим тогда и только тогда, когда матрица Якоби $G = \frac{\partial (q^{(2)}, p^{(2)})}{\partial (q^{(1)}, p^{(1)})}$ удовлетворяет равенству

$$G^T \circ J \circ G = J, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Это равенство используется в качестве определения каноничности [7], такие матрицы называются симплектическими. Из (1) следует сохранение фазового объема (теорема Лиувилля), эквивалентное равенству $\det(G) = \frac{D(q^{(2)}, p^{(2)})}{D(q^{(1)}, p^{(1)})} = 1$.

Все используемые в тексте функции предполагаются достаточно гладкими (имеют столько непрерывных производных, сколько это необходимо по ходу вычислений) без дополнительных уточнений. Шаги по времени всегда предполагаются ограниченными сверху некоторыми значениями, которые обеспечивают разрешимость неявных разностных уравнений и существование встречающихся по ходу изложения обратных операторов. Предполагается, что в конечно-разностных уравнениях для скорости отсутствуют вязкие и иные диссипативные и неконсервативные силы. Конечно-разностные уравнения для внутренней энергии не рассматриваются, вместо них считается, что задана явно зависимость энтропии от времени и номера ячейки — именно это используется в стандартных формулировках принципа наименьшего действия для сплошных сред [4].

В тексте используются понятия и обозначения, введенные в предыдущей работе [1].

1. Сохранение каноничности и фазового объема в неявных конечно-разностных схемах с постоянным весом, построенных последовательным вариационным методом

Определим лагранжеву разностную сетку как совокупность узлов сетки с множеством номеров $\mathcal{Y} = \{\gamma\}$, с координатами $\vec{Z} = \{\vec{Z}_\gamma : \gamma \in \mathcal{Y}\}$ и скоростями $\vec{U} = \{\vec{U}_\gamma : \gamma \in \mathcal{Y}\}$ и совокупность ячеек $\mathcal{A} = \{\alpha\}$, вершины которых являются узлами сетки. В ячейках $\alpha \in \mathcal{A}$ определены термодинамические величины: плотность ρ_α , удельный объем $\eta_\alpha = 1/\rho_\alpha$, энтропия единицы массы H_α , внутренняя энергия единицы массы e_α и давление p_α ; соответствующие сеточные функции принадлежат пространству сеточных функций $H_{\mathcal{A}}$. Для сеточных функций типа координат и скоростей, образующих пространство сеточных функций $H_{\mathcal{Y}}$, наравне с векторными обозначениями (со "стрелками") будем использовать скалярные обозначения (без "стрелок"), тогда все координаты всех узлов сетки, т. е. все степени свободы, нумеруем от 1 до K :

$$\vec{Z}^n = \{\vec{Z}_\gamma^n : \gamma \in \mathcal{Y}\} = Z^n = \{Z_k^n : k \in \mathcal{Y}\} \in H_{\mathcal{Y}}, \quad k = 1, 2, \dots, K.$$

В пространствах сеточных функций $H_{\mathcal{Y}}$ и $H_{\mathcal{A}}$ используются скалярные произведения

$$\begin{aligned} \langle Q^{(1)}, Q^{(2)} \rangle_{\mathcal{Y}} &= \sum_{\alpha \in \mathcal{Y}} M_{\alpha}^{\mathcal{Y}} Q_{\alpha}^{(1)} Q_{\alpha}^{(2)}, & Q^{(i)} &= \{Q_{\alpha}^{(i)} : \alpha \in \mathcal{Y}\} \in H_{\mathcal{Y}}; \\ \langle \vec{v}^{(1)}, \vec{v}^{(2)} \rangle_{\mathcal{Y}} &= \sum_{\gamma \in \mathcal{Y}} M_{\gamma}^{\mathcal{Y}} \langle \vec{v}_{\gamma}^{(1)}, \vec{v}_{\gamma}^{(2)} \rangle = \sum_{k \in \mathcal{Y}} M_k^{\mathcal{Y}} v_k^{(1)} v_k^{(2)}, & \vec{v}^{(i)} &= \{\vec{v}_{\gamma}^{(i)} : \gamma \in \mathcal{Y}\} = \{v_k^{(i)} : k \in \mathcal{Y}\} \in H_{\mathcal{Y}}; \\ \langle \vec{v}^{(1)}, \vec{v}^{(2)} \rangle_{0(\mathcal{Y})} &= \sum_{\gamma \in \mathcal{Y}} \langle \vec{v}_{\gamma}^{(1)}, \vec{v}_{\gamma}^{(2)} \rangle = \sum_{k \in \mathcal{Y}} v_k^{(1)} v_k^{(2)}, & \vec{v}^{(i)} &= \{\vec{v}_{\gamma}^{(i)} : \gamma \in \mathcal{Y}\} = \{v_k^{(i)} : k \in \mathcal{Y}\} \in H_{0(\mathcal{Y})}, \end{aligned} \quad (2)$$

где через $M_{\alpha}^{\mathcal{Y}}$, $\alpha \in \mathcal{Y}$, и $M_{\gamma}^{\mathcal{Y}}$, $\gamma \in \mathcal{Y}$, обозначены не зависящие от времени положительные массы ячеек и узлов сетки соответственно. Функция $\Omega_{\alpha} = \Omega_{\alpha}(\vec{Z})$ выражает объем ячейки $\alpha \in \mathcal{Y}$ через координаты ее вершин.

Рассмотрим неявную конечно-разностную схему с постоянным весом θ , $0 \leq \theta \leq 1$,

$$\frac{\vec{Z}_{\gamma}^{n+1} - \vec{Z}_{\gamma}^n}{\Delta t^{n+1/2}} = (1 - \theta) \vec{U}_{\gamma}^n + \theta \vec{U}_{\gamma}^{n+1}, \quad \gamma \in \mathcal{Y}; \quad (3)$$

$$\eta^n = \eta(\vec{Z}^n) = \frac{\Omega(\vec{Z}^n)}{M^{\mathcal{Y}}}; \quad \eta_{\alpha}^n = \eta_{\alpha}(\vec{Z}^n) = \frac{\Omega_{\alpha}(\vec{Z}^n)}{M_{\alpha}^{\mathcal{Y}}}, \quad \alpha \in \mathcal{Y}; \quad (4)$$

$$\frac{\vec{U}^{n+1} - \vec{U}^n}{\Delta t^{n+1/2}} = -\theta \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \text{GRAD}(\vec{Z}^n) p^n - (1 - \theta) \frac{\Delta t^{n+3/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \text{GRAD}(\vec{Z}^{n+1}) p^{n+1}. \quad (5)$$

Эта конечно-разностная схема строится последовательным вариационным методом из условия стационарности дискретного функционала действия [2, 3]

$$A = \sum_n \Delta t^n (K(\vec{U}^n) - E^n(\eta^n)) = \sum_n \Delta t^n \left(\frac{1}{2} \langle \vec{U}^n, \vec{U}^n \rangle_{\mathcal{Y}} - \langle 1_{\mathcal{Y}}, e(\eta^n, H^n) \rangle_{\mathcal{Y}} \right), \quad (6)$$

где шаг интегрирования Δt^n определен формулой

$$\Delta t^n = \theta \Delta t^{n-1/2} + (1 - \theta) \Delta t^{n+1/2}. \quad (7)$$

При вычислении условий стационарности действия (6) и выводе из них уравнения (5) уравнения (3) и закон сохранения массы (4) используются в качестве связей и дополнительно применяются соотношения [5, 8, 2, 9]

$$\delta e(\eta, H, c) = -p(\eta, H, c) \delta \eta; \quad (8)$$

$$\delta \eta^n = \text{DIV}(\vec{Z}^n) \delta \vec{Z}^n, \quad \delta \vec{Z}^n \in H_{\mathcal{Y}}, \quad \delta \eta^n \in H_{\mathcal{Y}};$$

$$\delta \eta_{\alpha}^n = \text{DIV}_{\alpha}(\vec{Z}^n) \delta \vec{Z}^n = \frac{1}{M_{\alpha}^{\mathcal{Y}}} \sum_{\gamma \in \mathcal{Y}} \left\langle \frac{\partial \Omega_{\alpha}(\vec{Z}^n)}{\partial \vec{Z}_{\gamma}^n}, \delta \vec{Z}_{\gamma}^n \right\rangle, \quad \alpha \in \mathcal{Y}; \quad (9)$$

$$p^n = \left\{ p_{\alpha}^n = p_{\alpha}(\eta_{\alpha}^n, H_{\alpha}^n) = -\frac{\partial e_{\alpha}(\eta_{\alpha}^n, H_{\alpha}^n)}{\partial \eta_{\alpha}^n} : \alpha \in \mathcal{Y} \right\} \in H_{\mathcal{Y}}. \quad (10)$$

Разностный аналог $\text{GRAD}(Z) : H_{\mathcal{Y}} \rightarrow H_{\mathcal{Y}}$ дифференциального оператора $\rho^{-1} \text{grad}$ определен формулой

$$\left(\text{GRAD}(\vec{Z}^n) Q \right)_{\gamma} = \text{GRAD}_{\gamma}(\vec{Z}^n) Q = -\frac{1}{M_{\gamma}^{\mathcal{Y}}} \sum_{\alpha \in \mathcal{Y}} Q_{\alpha} \frac{\partial \Omega_{\alpha}(\vec{Z}^n)}{\partial \vec{Z}_{\gamma}^n}, \quad \gamma \in \mathcal{Y}, \quad Q = \{Q_{\alpha}\}_{\alpha \in \mathcal{Y}} \in H_{\mathcal{Y}}. \quad (11)$$

Теорема 1. *Рассмотрим вариационную неявную конечно-разностную схему с постоянным весом, определенную уравнениями (3)–(5). Предположим, что произвольная зависимость энтропии*

единицы массы от времени и номера ячейки задана сеточной функцией $H^n = \{H_\alpha^n : \alpha \in \mathbf{Я}\} \in H_{\mathbf{Я}}$, в уравнении для скорости (5) отсутствует вязкость, а давление зависит от удельного объема и заданной энтропии по формуле (10). Определим скрытые обобщенные координаты и импульсы узлов сетки формулами

$$\vec{Z}^{(\theta)n} = \vec{Z}^n + \theta(1-\theta)\Delta t^{n-1/2}\Delta t^{n+1/2}A\frac{\partial E^n(\vec{Z}^n)}{\partial \vec{Z}^n}; \quad (12)$$

$$\vec{w}^n = M^{\mathbf{Y}}\vec{U}^n = \left\{ \vec{w}_\gamma^n = M_\gamma^{\mathbf{Y}}\vec{U}_\gamma^n : \gamma \in \mathbf{Y} \right\} \in H_{\mathbf{Y}}, \quad A = (M^{\mathbf{Y}})^{-1} : H_{\mathbf{Y}} \rightarrow H_{\mathbf{Y}}. \quad (13)$$

Тогда в эквивалентной разностной схеме для скрытых обобщенных координат и обобщенных импульсов сохраняется каноничность и фазовый объем в том смысле, что матрица Якоби $G^{(\theta)n+1/2} = \frac{\partial(\vec{Z}^{(\theta)n+1}, \vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^{(\theta)n}, \vec{w}^n)}$ удовлетворяет (1), а якобиан равен единице.

Другие способы определения скрытых обобщенных координат и скрытых обобщенных импульсов, отличные от (12) и также обеспечивающие сохранение каноничности, приведены для более общего случая в теореме 3.

Доказательство теоремы 1. Из (11), (4) и (10) следует соотношение

$$M^{\mathbf{Y}} \circ \text{GRAD}(\vec{Z}^n) p^n = \frac{\partial E^n(\vec{Z}^n)}{\partial \vec{Z}^n}, \quad (14)$$

$$E^n(\vec{Z}^n) = E(\vec{Z}^n, t^n) = \left\langle 1_{\mathbf{Я}}, e(\eta(\vec{Z}^n), H^n) \right\rangle_{\mathbf{Я}} = \sum_{\alpha \in \mathbf{Я}} M_\alpha^{\mathbf{Я}} e_\alpha(\eta_\alpha(\vec{Z}^n), H_\alpha^n). \quad (15)$$

Подстановка (14) и (13) в уравнения (3) и (5) дает

$$\frac{\vec{Z}^{n+1} - \vec{Z}^n}{\Delta t^{n+1/2}} = A[(1-\theta)\vec{w}^n + \theta\vec{w}^{n+1}]; \quad (16)$$

$$\frac{\vec{w}^{n+1} - \vec{w}^n}{\Delta t^{n+1/2}} = -\theta \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \frac{\partial E^n(\vec{Z}^n)}{\partial \vec{Z}^n} - (1-\theta) \frac{\Delta t^{n+3/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \frac{\partial E^{n+1}(\vec{Z}^{n+1})}{\partial \vec{Z}^{n+1}}. \quad (17)$$

Координаты и импульсы верхнего слоя по времени при однозначной разрешимости разностной схемы (3)–(5) являются однозначными функциями координат и импульсов нижнего слоя, т. е. $\vec{Z}^{n+1} = \vec{Z}^{n+1}(\vec{Z}^n, \vec{w}^n)$ и $\vec{w}^{n+1} = \vec{w}^{n+1}(\vec{Z}^n, \vec{w}^n)$. Дифференцированием уравнений (16), (17) по \vec{Z}^n и отдельно по \vec{w}^n получим систему четырех линейных уравнений для блочных компонент матрицы Якоби оператора перехода

$$\frac{\partial(\vec{Z}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^n)} - I_{\mathbf{Y}} = \theta \Delta t^{n+1/2} A \circ \frac{\partial(\vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^n)};$$

$$\frac{\partial(\vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^n)} = -\theta \Delta t^{n-1/2} \frac{\partial^2 E^n(\vec{Z}^n)}{(\partial \vec{Z}^n)^2} - (1-\theta) \Delta t^{n+3/2} \frac{\partial^2 E^{n+1}(\vec{Z}^{n+1})}{(\partial \vec{Z}^{n+1})^2} \circ \frac{\partial(\vec{Z}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^n)};$$

$$\frac{\partial(\vec{Z}^{n+1})}{\partial(\vec{w}^n)} = \Delta t^{n+1/2} A \circ \left[(1-\theta) I_{\mathbf{Y}} + \theta \frac{\partial(\vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{w}^n)} \right];$$

$$\frac{\partial(\vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{w}^n)} - I_{\mathbf{Y}} = -(1-\theta) \Delta t^{n+3/2} \frac{\partial^2 E^{n+1}(\vec{Z}^{n+1})}{(\partial \vec{Z}^{n+1})^2} \circ \frac{\partial(\vec{Z}^{n+1})}{\partial(\vec{w}^n)}.$$

Решение этой системы имеет вид

$$\frac{\partial(\vec{Z}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^n)} = (B^{n+1})^{-1} - \theta^2 \Delta t^{n-1/2} \Delta t^{n+1/2} (B^{n+1})^{-1} \circ A \circ \partial^2 E^n; \quad (18)$$

$$\frac{\partial(\vec{Z}^{n+1})}{\partial(\vec{w}^n)} = \Delta t^{n+1/2} (B^{n+1})^{-1} \circ A; \quad (19)$$

$$\frac{\partial(\vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^n)} = -(1-\theta) \Delta t^{n+3/2} \partial^2 E^{n+1} \circ (B^{n+1})^{-1} - \theta \Delta t^{n-1/2} A^{-1} \circ (B^{n+1})^{-1} \circ A \circ \partial^2 E^n; \quad (20)$$

$$\frac{\partial(\vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{w}^n)} = I_Y - (1-\theta) \Delta t^{n+1/2} \Delta t^{n+3/2} \partial^2 E^{n+1} \circ (B^{n+1})^{-1} \circ A, \quad (21)$$

где $\partial^2 E^n = \frac{\partial^2 E^n(\vec{Z}^n)}{(\partial \vec{Z}^n)^2}$ и введено обозначение

$$B^n \equiv I_Y + \theta(1-\theta) \Delta t^{n-1/2} \Delta t^{n+1/2} A \circ \partial^2 E^n = \frac{\partial(\vec{Z}^{(\theta)n})}{\partial(\vec{Z}^n)}. \quad (22)$$

Ограничимся случаем $0 < \theta < 1$, когда $\theta(1-\theta) \neq 0$. Тогда формулы (18)–(21) принимают вид

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\vec{Z}^{n+1}, \vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^n, \vec{w}^n)} = \\ & = \begin{pmatrix} \frac{1}{1-\theta} (B^{n+1})^{-1} (I_Y - \theta B^n) & \Delta t^{n+1/2} (B^{n+1})^{-1} A \\ -\frac{1}{\Delta t^{n+1/2}} (B^{n+1} A)^{-1} \left[\frac{1}{\theta} (B^{n+1} - I_Y) + \frac{1}{1-\theta} (B^n - I_Y) \right] & \frac{1}{\theta} \left[(B^{n+1} A)^{-1} A - (1-\theta) I_Y \right] \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Теперь многомерное правило дифференцирования сложной функции дает выражение для матрицы Якоби

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\vec{Z}^{(\theta)n+1}, \vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^{(\theta)n}, \vec{w}^n)} = \frac{\partial(\vec{Z}^{(\theta)n+1}, \vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^{n+1}, \vec{w}^{n+1})} \circ \frac{\partial(\vec{Z}^{n+1}, \vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^n, \vec{w}^n)} \circ \left(\frac{\partial(\vec{Z}^{(\theta)n}, \vec{w}^n)}{\partial(\vec{Z}^n, \vec{w}^n)} \right)^{-1} = \\ & = \begin{pmatrix} B^{n+1} & 0 \\ 0 & I_Y \end{pmatrix} \circ \frac{\partial(\vec{Z}^{n+1}, \vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^n, \vec{w}^n)} \circ \begin{pmatrix} (B^n)^{-1} & 0 \\ 0 & I_Y \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} \frac{1}{1-\theta} (I_Y - \theta B^n) (B^n)^{-1} & \Delta t^{n+1/2} A \\ -\frac{1}{\Delta t^{n+1/2}} (B^{n+1} A)^{-1} \left[\frac{1}{\theta} (B^{n+1} - I_Y) + \frac{1}{1-\theta} (B^n - I_Y) \right] (B^n)^{-1} & \frac{1}{\theta} \left[(B^{n+1} A)^{-1} A - (1-\theta) I_Y \right] \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Использование симметричности матриц $B^n \circ A$ и $B^{n+1} \circ A$, а также тождеств $(B^n)^T = A^{-1} \circ B^n \circ A$ и $(B^{n+1})^T = A^{-1} \circ B^{n+1} \circ A$ дает

$$\left(\frac{\partial(\vec{Z}^{(\theta)n+1})}{\partial(\vec{Z}^{(\theta)n})} \right)^T \circ \frac{\partial(\vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{w}^n)} - \left(\frac{\partial(\vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^{(\theta)n})} \right)^T \circ \frac{\partial(\vec{Z}^{(\theta)n+1})}{\partial(\vec{w}^n)} =$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{\theta(1-\theta)} \left((B^n)^{-1} \right)^T \circ \left[I_Y - \theta (B^n)^T \right] \circ \left[(B^{n+1}A)^{-1} \circ A - (1-\theta) I_Y \right] + \\
 &+ \frac{1}{\theta(1-\theta)} \left((B^n)^{-1} \right)^T \circ \left[(1-\theta) (B^{n+1})^T + \theta (B^n)^T - I_Y \right] \circ (B^{n+1}A)^{-1} \circ A = \\
 &= -\frac{1}{\theta} \left((B^n)^{-1} \right)^T \circ \left[I_Y - \theta (B^n)^T \right] + \frac{1}{\theta} \left((B^n)^{-1} \right)^T \circ (B^{n+1})^T \circ (B^{n+1}A)^{-1} \circ A = \\
 &= \frac{1}{\theta} \left((B^n)^{-1} \right)^T \circ \left[(B^{n+1})^T \circ (B^{n+1}A)^{-1} \circ A - I_Y + \theta (B^n)^T \right] = \\
 &= \frac{1}{\theta} \left((B^n)^{-1} \right)^T \circ \left[(A^{-1}B^{n+1}A) \circ (B^{n+1}A)^{-1} \circ A - I_Y + \theta (B^n)^T \right] = \frac{1}{\theta} \left((B^n)^{-1} \right)^T \circ \left[\theta (B^n)^T \right] = I_Y. \quad (23)
 \end{aligned}$$

Аналогичными более простыми вычислениями проверяется справедливость равенств

$$\left(\frac{\partial \left(\vec{Z}^{(\theta)n+1} \right)}{\partial \left(\vec{Z}^{(\theta)n} \right)} \right)^T \circ \frac{\partial \left(\vec{w}^{n+1} \right)}{\partial \left(\vec{Z}^{(\theta)n} \right)} - \left(\frac{\partial \left(\vec{w}^{n+1} \right)}{\partial \left(\vec{Z}^{(\theta)n} \right)} \right)^T \circ \frac{\partial \left(\vec{Z}^{(\theta)n+1} \right)}{\partial \left(\vec{Z}^{(\theta)n} \right)} = 0; \quad (24)$$

$$\left(\frac{\partial \left(\vec{Z}^{(\theta)n+1} \right)}{\partial \left(\vec{w}^n \right)} \right)^T \circ \frac{\partial \left(\vec{w}^{n+1} \right)}{\partial \left(\vec{w}^n \right)} - \left(\frac{\partial \left(\vec{w}^{n+1} \right)}{\partial \left(\vec{w}^n \right)} \right)^T \circ \frac{\partial \left(\vec{Z}^{(\theta)n+1} \right)}{\partial \left(\vec{w}^n \right)} = 0. \quad (25)$$

Совокупность матричных равенств (23)–(25) эквивалентна условию симплектичности (1).

В случае $\theta(1-\theta) = 0$ имеем $B^n = B^{n+1} = I_Y$. Тогда симплектичность матрицы Якоби, определенной формулами (18)–(21), после подстановки $\theta = 0$ или $\theta = 1$ в (18)–(21) проверяется совсем просто. Это завершает доказательство теоремы 1.

Формула (12) для скрытых обобщенных координат получена *интегрированием* оператора (22). Происхождение этого оператора объясняет следующий результат.

Лемма 1. Пусть для вариационной конечно-разностной схемы (3)–(5) выполнены предположения теоремы 1 и обобщенный импульс сетки определен формулой (13). Тогда в эквивалентной разностной схеме (16), (17) при $\theta \neq 0$ и $\theta \neq 1$ фазовый объем не сохраняется, точнее, якобиан нелинейного разностного оператора перехода в общем случае не равен единице, он равен

$$\frac{D \left(\vec{Z}^{n+1}, \vec{w}^{n+1} \right)}{D \left(\vec{Z}^n, \vec{w}^n \right)} = \frac{\det(B^n)}{\det(B^{n+1})},$$

где операторы $B^n : H_Y \rightarrow H_Y$ и $B^{n+1} : H_Y \rightarrow H_Y$ определены формулой (22).

Доказательство этой леммы сводится к вычислению определителя матрицы с компонентами (18)–(21). Выкладки опустим, так как они в терминах определителей повторяют вычисления, использованные при доказательстве теоремы 1.

2. Несохранение фазового объема при переменном шаге по времени

в неявных конечно-разностных схемах второго порядка аппроксимации по времени

Рассмотрим в случае $\theta = 1/2$ неявные конечно-разностные схемы второго порядка аппроксимации по времени, которые отличаются от вариационной конечно-разностной схемы (3)–(5) только уравнением для скорости, которое вместо (5) имеет вид

$$\frac{\vec{U}^{n+1} - \vec{U}^n}{\Delta t^{n+1/2}} = -\frac{1}{2} \left(\text{GRAD} \left(\vec{Z}^n \right) p^n + \text{GRAD} \left(\vec{Z}^{n+1} \right) p^{n+1} \right). \quad (26)$$

Полученное последовательным вариационным методом конечно-разностное уравнение (5) принимает вид (26) только при постоянном шаге по времени $\Delta t^{n+1/2} = \text{const}$. При переменном шаге по

времени конечно-разностное уравнение для скорости (26) не удалось получить последовательным вариационным методом.

Определение 1. Будем говорить, что полная внутренняя энергия (15) существенно нелинейно зависит от координат узлов сетки, если для почти всех \vec{Z}^n и для почти всех $\vec{Z}^{n+1} \neq \vec{Z}^n$, $\vec{Z}^{n+1} - \vec{Z}^n = O(\Delta t^{n+1/2})$, выполнено условие

$$\frac{1}{\Delta t^{n+1/2}} \operatorname{tr} \left(A \circ \left(\frac{\partial^2 E(\vec{Z}^{n+1})}{(\partial \vec{Z}^{n+1})^2} - \frac{\partial^2 E(\vec{Z}^n)}{(\partial \vec{Z}^n)^2} \right) \right) = O(1) \neq 0. \quad (27)$$

На примере теоремы 1 видно, что сохранение каноничности и фазового объема удается установить не для тех координат, которые присутствуют в исходной разностной схеме (3)–(5), а для некоторых скрытых координат (12). Поэтому при изучении несохранения фазового объема надо рассматривать широкий класс скрытых переменных.

Определение 2. Координаты $\vec{Z}^{(X)n}$ и импульсы $\vec{w}^{(X)n}$ узлов сетки называем скрытыми обобщенными координатами и скрытыми обобщенными импульсами, если выполнены следующие два условия. Во-первых, скрытые обобщенные координаты и скрытые обобщенные импульсы являются однозначными достаточно гладкими функциями от обычных координат узлов сетки, от импульсов узлов сетки, определенных формулой (13), взятых с $2(N+1)$ последовательных шагов по времени для некоторого фиксированного числа $N \geq 0$, и от соответствующих шагов по времени, т. е.

$$\begin{aligned} \vec{Z}^{(X)n} &= z^{(X)} \left(\vec{Z}^{n,(N)}, \vec{w}^{n,(N)}; \Delta t^{n+1/2,(N)} \right); \\ \vec{w}^{(X)n} &= W^{(X)} \left(\vec{Z}^{n,(N)}, \vec{w}^{n,(N)}; \Delta t^{n+1/2,(N)} \right); \\ \vec{Z}^{n,N} &= \left\{ \vec{Z}^{n-N}, \vec{Z}^{n-N+1}, \dots, \vec{Z}^n, \dots, \vec{Z}^{n+N+1} \right\}; \\ \vec{w}^{n,N} &= \left\{ \vec{w}^{n-N}, \vec{w}^{n-N+1}, \dots, \vec{w}^n, \dots, \vec{w}^{n+N+1} \right\}; \\ \Delta t^{n+1/2,(N)} &= \left\{ \Delta t^{n+1/2-N}, \Delta t^{n+3/2-N}, \dots, \Delta t^{n+1/2}, \dots, \Delta t^{n+1/2+N} \right\}. \end{aligned} \quad (28)$$

Во-вторых, скрытые обобщенные координаты и скрытые обобщенные импульсы мало отличаются от обычных координат узлов сетки и импульсов (13) в том смысле, что справедливы асимптотические представления

$$\begin{aligned} \vec{Z}^{(X)n} &= \vec{Z}^n + \tau^n O_{Z,1} + (\tau^n)^2 O_{Z,2} + \dots; \\ \vec{w}^{(X)n} &= \vec{w}^n + \tau^n O_{W,1} + (\tau^n)^2 O_{W,2} + \dots; \\ O_{Z,k} &= O_{Z,k} \left(\vec{Z}^{n,(N)}, \vec{w}^{n,(N)}; \Delta t^{n+1/2,(N)} \right), \quad k = 1, \dots; \\ O_{W,k} &= O_{W,k} \left(\vec{Z}^{n,(N)}, \vec{w}^{n,(N)}; \Delta t^{n+1/2,(N)} \right), \quad k = 1, \dots; \\ \tau^n &= \tau \left(\Delta t^{n+1/2,(N)} \right); \\ \min \left\{ \Delta t^{n+1/2-N}, \dots, \Delta t^{n+1/2+N} \right\} &\leq \tau \left(\Delta t^{n+1/2,(N)} \right) \leq \max \left\{ \Delta t^{n+1/2-N}, \dots, \Delta t^{n+1/2+N} \right\}. \end{aligned} \quad (29)$$

Следующий результат объясняет, почему, на первый взгляд, более естественная аппроксимация по времени (26) хуже, чем полученное последовательным вариационным методом конечно-разностное уравнение (5) для $\theta = 1/2$, которое выглядит менее естественным.

Теорема 2. Рассмотрим неявную конечно-разностную схему второго порядка аппроксимации по времени, определенную уравнением (3) с $\theta = 1/2$ и уравнениями (4) и (26). Предположим, что произвольная зависимость энтропии единицы массы от времени и номера ячейки задана сеточной функцией $H^n = \{H_\alpha^n : \alpha \in \mathcal{Y}\} \in H_{\mathcal{Y}}$, в уравнении для скорости (26) отсутствует вязкость, а

давление зависит от удельного объема и заданной энтропии по формуле (10). Фазовый объем в такой разностной схеме обладает следующими свойствами:

1. В эквивалентной разностной схеме для обычных координат узлов сетки и для обобщенных импульсов (13) якобиан оператора перехода $(\vec{Z}^n, \vec{w}^n) \mapsto (\vec{Z}^{n+1}, \vec{w}^{n+1})$ равен

$$\frac{D(\vec{Z}^{n+1}, \vec{w}^{n+1})}{D(\vec{Z}^n, \vec{w}^n)} = \frac{\det(B_+^n)}{\det(B_-^{n+1})}, \quad (30)$$

где

$$B_{\pm}^n = I_Y + \frac{1}{4} (\Delta t^{n\pm 1/2})^2 A \circ \frac{\partial^2 E^n(\vec{Z}^n)}{(\partial \vec{Z}^n)^2} : H_Y \rightarrow H_Y. \quad (31)$$

2. Для любого определения скрытых обобщенных координат $\vec{Z}^{(X)n}$ и скрытых обобщенных импульсов $\vec{w}^{(X)n}$ узлов сетки в случае существенно нелинейной зависимости полной внутренней энергии (15) от координат узлов сетки при переменном шаге по времени фазовый объем не сохраняется в том смысле, что, вообще говоря, для таких обобщенных координат и обобщенных импульсов якобиан разностного оператора перехода $(\vec{Z}^{(X)n}, \vec{w}^{(X)n}) \mapsto (\vec{Z}^{(X)n+1}, \vec{w}^{(X)n+1})$ в условиях общего положения (т. е. при нетривиальном движении,

отличающемся от состояния покоя) не равен единице: $\frac{D(\vec{Z}^{(X)n+1}, \vec{w}^{(X)n+1})}{D(\vec{Z}^{(X)n}, \vec{w}^{(X)n})} \neq 1$.

Доказательство теоремы 2. После перехода в (3) для $\theta = 1/2$ и в (26) к обобщенному импульсу (13) и применения (14) разностная схема принимает вид

$$\frac{\vec{Z}^{n+1} - \vec{Z}^n}{\Delta t^{n+1/2}} = \frac{1}{2} A (\vec{w}^n + \vec{w}^{n+1}); \quad (32)$$

$$\frac{\vec{w}^{n+1} - \vec{w}^n}{\Delta t^{n+1/2}} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial E^n(\vec{Z}^n)}{\partial \vec{Z}^n} + \frac{\partial E^{n+1}(\vec{Z}^{n+1})}{\partial \vec{Z}^{n+1}} \right). \quad (33)$$

Полагая, что $\vec{Z}^{n+1} = \vec{Z}^{n+1}(\vec{Z}^n, \vec{w}^n)$ и $\vec{w}^{n+1} = \vec{w}^{n+1}(\vec{Z}^n, \vec{w}^n)$, дифференцируем эти уравнения по \vec{Z}^n и отдельно по \vec{w}^n и с учетом обозначений (31) аналогично (18)–(21) получаем формулы для компонент матрицы Якоби оператора перехода:

$$\frac{\partial(\vec{Z}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^n)} = (B_-^{n+1})^{-1} \circ (2I_Y - B_+^n); \quad (34)$$

$$\frac{\partial(\vec{Z}^{n+1})}{\partial(\vec{w}^n)} = \Delta t^{n+1/2} (B_-^{n+1})^{-1} \circ A; \quad (35)$$

$$\frac{\partial(\vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{Z}^n)} = \frac{2}{\Delta t^{n+1/2}} A^{-1} \circ (B_-^{n+1})^{-1} \circ (2I_Y - B_+^n - B_-^{n+1}); \quad (36)$$

$$\frac{\partial(\vec{w}^{n+1})}{\partial(\vec{w}^n)} = A^{-1} \circ (B_-^{n+1})^{-1} \circ (2I_Y - B_-^{n+1}) \circ A. \quad (37)$$

Матрица Якоби с блочными компонентами (34)–(37) имеет разложение на множители

$$\frac{\partial \left(\vec{Z}^{n+1}, \vec{w}^{n+1} \right)}{\partial \left(\vec{Z}^n, \vec{w}^n \right)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \left(\vec{Z}^{n+1} \right)}{\partial \left(\vec{Z}^n \right)} & \frac{\partial \left(\vec{Z}^{n+1} \right)}{\partial \left(\vec{w}^n \right)} \\ \frac{\partial \left(\vec{w}^{n+1} \right)}{\partial \left(\vec{Z}^n \right)} & \frac{\partial \left(\vec{w}^{n+1} \right)}{\partial \left(\vec{w}^n \right)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_Y & 0 \\ 0 & \frac{1}{\Delta t^{n+1/2}} A^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (B_-^{n+1})^{-1} & 0 \\ 0 & (B_-^{n+1})^{-1} \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} I_Y & 0 \\ 2I_Y & I_Y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_Y & 0 \\ 0 & B_-^{n+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2I_Y - B_+^n & I_Y \\ -2I_Y & -I_Y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_Y & 0 \\ 0 & \Delta t^{n+1/2} A \end{pmatrix}.$$

Отсюда с помощью формулы Шура для определителя блочной матрицы сразу получаем равенство (30) первой части теоремы 2.

Перейдем к доказательству второй, итоговой и самой главной части теоремы 2. Так как здесь доказывается только отрицательный результат, достаточно установить его в каком-нибудь частном случае. Ограничимся случаем постоянной (точнее, не зависящей от времени и номера шага по времени) энтропии.

Будем действовать от противного. Допустим, для примера, что существуют некие скрытые обобщенные координаты и скрытые обобщенные импульсы следующего вида:

$$\begin{aligned} Z^{(X)n} &= z \left(Z^{n-1}, w^{n-1}, Z^n, w^n, Z^{n+1}, w^{n+1}, Z^{n+2}, w^{n+2}; \Delta t^{n-1/2}, \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2} \right); \\ w^{(X)n} &= W \left(Z^{n-1}, w^{n-1}, Z^n, w^n, Z^{n+1}, w^{n+1}, Z^{n+2}, w^{n+2}; \Delta t^{n-1/2}, \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2} \right), \end{aligned} \quad (38)$$

для которых точно выполнен закон сохранения фазового объема в форме

$$\frac{D \left(Z^{(X)n+1}, w^{(X)n+1} \right)}{D \left(Z^{(X)n}, w^{(X)n} \right)} = 1. \quad (39)$$

Приведенное ниже доказательство, как будет видно, повторяется и для большего числа слоев по времени, определяющих в формулах (28), аналогичных (38), скрытые обобщенные координаты и скрытые обобщенные импульсы, лишь бы этих слоев по времени было фиксированное конечное число.

С помощью нелинейных операторов, разрешающих систему конечно-разностных уравнений (32) и (33), скрытые обобщенные координаты и скрытые обобщенные импульсы (38) всегда можно записать в виде следующих функциональных зависимостей:

$$\begin{aligned} Z^{(X)n} &= z \left(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2}, \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2} \right); \\ w^{(X)n} &= W \left(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2}, \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2} \right). \end{aligned} \quad (40)$$

Обозначим

$$\frac{D \left(Z^{(X)n}, w^{(X)n} \right)}{D \left(Z^{n-1}, w^{n-1} \right)} = F \left(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2}, \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2} \right). \quad (41)$$

С помощью многомерного правила дифференцирования сложных функций получаем

$$\frac{\partial \left(Z^{(X)n+1}, w^{(X)n+1} \right)}{\partial \left(Z^{(X)n}, w^{(X)n} \right)} = \frac{\partial \left(Z^{(X)n+1}, w^{(X)n+1} \right)}{\partial \left(Z^n, w^n \right)} \circ \frac{\partial \left(Z^n, w^n \right)}{\partial \left(Z^{n-1}, w^{n-1} \right)} \circ \left(\frac{\partial \left(Z^{(X)n}, w^{(X)n} \right)}{\partial \left(Z^{n-1}, w^{n-1} \right)} \right)^{-1}.$$

Подставив сюда (41), (30) и (39), получим равенство

$$\frac{\det \left(B_+^{n-1} \right)}{\det \left(B_-^n \right)} = \frac{F \left(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2}, \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2} \right)}{F \left(Z^n, w^n; \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2}, \Delta t^{n+5/2} \right)},$$

которое с учетом (31) запишем в виде

$$\frac{F(Z^n, w^n; \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2}, \Delta t^{n+5/2})}{\det\left(I_Y + \frac{1}{4}(\Delta t^{n-1/2})^2 A \circ \frac{\partial^2 E^n(Z^n)}{(\partial Z^n)^2}\right)} = \frac{F(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2}, \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2})}{\det\left(I_Y + \frac{1}{4}(\Delta t^{n-1/2})^2 A \circ \frac{\partial^2 E^n(Z^{n-1})}{(\partial Z^{n-1})^2}\right)}. \quad (42)$$

В уравнении (42) правая часть не зависит от $\Delta t^{n+5/2}$, значит, и левая часть должна не зависеть от $\Delta t^{n+5/2}$. Поэтому функция $F(Z^n, w^n; \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2}, \Delta t^{n+5/2})$, стоящая слева в (42), должна не зависеть от $\Delta t^{n+5/2}$. Отсюда функция $F(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2}, \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2})$ в (41) также должна не зависеть от $\Delta t^{n+3/2}$. С учетом этого уравнение (42) принимает вид

$$\frac{F(Z^n, w^n; \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2})}{\det\left(I_Y + \frac{1}{4}(\Delta t^{n-1/2})^2 A \circ \frac{\partial^2 E^n(Z^n)}{(\partial Z^n)^2}\right)} = \frac{F(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2}, \Delta t^{n+1/2})}{\det\left(I_Y + \frac{1}{4}(\Delta t^{n-1/2})^2 A \circ \frac{\partial^2 E^n(Z^{n-1})}{(\partial Z^{n-1})^2}\right)}. \quad (43)$$

Здесь правая часть не зависит от $\Delta t^{n+3/2}$, значит, и левая часть должна не зависеть от $\Delta t^{n+3/2}$. Поэтому функция $F(Z^n, w^n; \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2})$ слева в (43) также должна не зависеть от $\Delta t^{n+3/2}$. Отсюда функция $F(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2}, \Delta t^{n+1/2})$ также должна не зависеть от $\Delta t^{n+1/2}$. Следовательно, уравнение (43) принимает вид

$$\frac{F(Z^n, w^n; \Delta t^{n+1/2})}{\det\left(I_Y + \frac{1}{4}(\Delta t^{n-1/2})^2 A \circ \frac{\partial^2 E^n(Z^n)}{(\partial Z^n)^2}\right)} = \frac{F(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2})}{\det\left(I_Y + \frac{1}{4}(\Delta t^{n-1/2})^2 A \circ \frac{\partial^2 E^n(Z^{n-1})}{(\partial Z^{n-1})^2}\right)}. \quad (44)$$

Применяя аналогичные рассуждения для независимого аргумента $\Delta t^{n+1/2}$ в уравнении (44), получаем, что функция $F(Z^n, w^n; \Delta t^{n+1/2})$ должна явно не зависеть от $\Delta t^{n+1/2}$ и функция $F(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2})$ также должна не зависеть явно от $\Delta t^{n-1/2}$. Этим доказано, что

$$F\left(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2}, \Delta t^{n+1/2}, \Delta t^{n+3/2}\right) = F\left(Z^{n-1}, w^{n-1}\right). \quad (45)$$

Условие (29) для скрытых обобщенных координат и импульсов (40) запишем в виде

$$\frac{\partial(Z^{(X)n}, w^{(X)n})}{\partial(Z^{n-1}, w^{n-1})} = \begin{pmatrix} I_Y + \Delta t^{n-1/2} O_1 & \Delta t^{n-1/2} O_2 \\ \Delta t^{n-1/2} O_3 & I_Y + \Delta t^{n-1/2} O_4 \end{pmatrix}, \quad (46)$$

где матрицы $O_k = O_k(Z^{n-1}, w^{n-1}; \Delta t^{n-1/2})$ также могут зависеть от шага по времени, но относительно слабо. В силу (45) определитель матрицы (46) совсем не зависит от шагов по времени, и от $\Delta t^{n-1/2}$ в частности. Поэтому перед вычислением определителя можно в (46) перейти к пределу $\Delta t^{n-1/2} \rightarrow +0$, и тогда получаем

$$\begin{aligned} F(Z^{n-1}, w^{n-1}) &= \det \begin{pmatrix} I_Y + \Delta t^{n-1/2} O_1 & \Delta t^{n-1/2} O_2 \\ \Delta t^{n-1/2} O_3 & I_Y + \Delta t^{n-1/2} O_4 \end{pmatrix} = \\ &= \lim_{\Delta t^{n-1/2} \rightarrow +0} \det \begin{pmatrix} I_Y + \Delta t^{n-1/2} O_1 & \Delta t^{n-1/2} O_2 \\ \Delta t^{n-1/2} O_3 & I_Y + \Delta t^{n-1/2} O_4 \end{pmatrix} = \\ &= \det \lim_{\Delta t^{n-1/2} \rightarrow +0} \begin{pmatrix} I_Y + \Delta t^{n-1/2} O_1 & \Delta t^{n-1/2} O_2 \\ \Delta t^{n-1/2} O_3 & I_Y + \Delta t^{n-1/2} O_4 \end{pmatrix} = 1. \end{aligned}$$

Тем самым доказано, что $F(Z^{n-1}, w^{n-1}) = F(Z^n, w^n) = 1$. Тогда из (42) и (45) получим

$$\det \left(I_Y + \frac{1}{4} (\Delta t^{n-1/2})^2 A \circ \frac{\partial^2 E^n(Z^n)}{(\partial Z^n)^2} \right) = \det \left(I_Y + \frac{1}{4} (\Delta t^{n-1/2})^2 A \circ \frac{\partial^2 E^n(Z^{n-1})}{(\partial Z^{n-1})^2} \right). \quad (47)$$

Используя разложение $\det(I + \varepsilon A) = 1 + \varepsilon \operatorname{tr}(A) + O(\varepsilon^2)$, $|\varepsilon| \ll 1$, получаем

$$\det \left(I_Y + \frac{1}{4} (\Delta t^{n-1/2})^2 A \circ \frac{\partial^2 E^n(Z^k)}{(\partial Z^k)^2} \right) = 1 + \frac{1}{4} (\Delta t^{n-1/2})^2 \operatorname{tr} \left(A \circ \frac{\partial^2 E^n(Z^k)}{(\partial Z^k)^2} \right) + O\left((\Delta t^{n-1/2})^4\right),$$

$$\Delta t^{n-1/2} \rightarrow +0, \quad k = n-1, n.$$

Подставим эти выражения в (47) и получим

$$\operatorname{tr} \left(A \circ \left(\frac{\partial^2 E^n(Z^n)}{(\partial Z^n)^2} - \frac{\partial^2 E^n(Z^{n-1})}{(\partial Z^{n-1})^2} \right) \right) = O\left((\Delta t^{n-1/2})^2\right),$$

что противоречит предположению теоремы о существенной нелинейности (27) полной внутренней энергии. Это противоречие завершает доказательство теоремы 2.

3. Сохранение каноничности и фазового объема в неявных конечно-разностных схемах с переменным оператором кинетической энергии, построенных последовательным вариационным методом

Рассмотрим аналог схемы (3)–(5) для переменного оператора кинетической энергии $T_K^n = T_K(\vec{Z}^n) : H_Y \rightarrow H_Y$, зависящего от координат узлов сетки [9, 10]. Для постоянного веса θ , $0 \leq \theta \leq 1$, последовательным вариационным методом получается схема [11]

$$\frac{\vec{Z}_\gamma^{n+1} - \vec{Z}_\gamma^n}{\Delta t^{n+1/2}} = (1 - \theta) \vec{U}_\gamma^n + \theta \vec{U}_\gamma^{n+1}, \quad \gamma \in Y; \quad (48)$$

$$\eta^n = \eta(\vec{Z}^n) = \frac{\Omega(\vec{Z}^n)}{M_Y^n}; \quad \eta_\alpha^n = \eta_\alpha(\vec{Z}^n) = \frac{\Omega_\alpha(\vec{Z}^n)}{M_\alpha^n}, \quad \alpha \in Я; \quad (49)$$

$$\frac{T_K(\vec{Z}^{n+1}) \vec{U}^{n+1} - T_K(\vec{Z}^n) \vec{U}^n}{\Delta t^{n+1/2}} =$$

$$= -\theta \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \operatorname{GRAD}(\vec{Z}^n) p^n - (1 - \theta) \frac{\Delta t^{n+3/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \operatorname{GRAD}(\vec{Z}^{n+1}) p^{n+1} +$$

$$+ \theta \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \vec{D}^{(K)}(\vec{Z}^n, \vec{U}^n) + (1 - \theta) \frac{\Delta t^{n+3/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \vec{D}^{(K)}(\vec{Z}^{n+1}, \vec{U}^{n+1}). \quad (50)$$

Здесь вектор $\vec{D}^{(K)}(\vec{Z}^n, \vec{U}^n) \in H_Y$ есть частная вариационная производная кинетической энергии $K(\vec{U}) = \frac{1}{2} \langle T_K(\vec{Z}) \vec{U}, \vec{U} \rangle_Y$ по координатам, определенная формулой

$$\left\langle \vec{D}^{(K)}(\vec{Z}^n, \vec{U}^n), \vec{v} \right\rangle_Y = \left(\frac{d}{d\varepsilon} \frac{1}{2} \langle T_K(\vec{Z}^n + \varepsilon \vec{v}) \vec{U}^n, \vec{U}^n \rangle_Y \right)_{\varepsilon=0}, \quad \forall \vec{v} \in H_Y. \quad (51)$$

Уравнение (50) получается из условия стационарности дискретного функционала действия

$$A = \sum_n \Delta t^n \left(K^n(\vec{U}^n) - E^n(\eta^n) \right) \equiv \sum_n \Delta t^n \left(\frac{1}{2} \langle T_K(\vec{Z}^n) \vec{U}^n, \vec{U}^n \rangle_Y - \langle 1_Y, e(\eta^n, H^n) \rangle_Y \right) \quad (52)$$

с Δt^n из (7); соотношения (8)—(11) и уравнения (48), (49) используются как связи.

Вариационная производная кинетической энергии по скорости дает выражение (пока еще не скрытого) обобщенного импульса неявной конечно-разностной схемы (48)—(50):

$$\vec{w}^n = M^Y T_K \left(\vec{Z}^n \right) \vec{U}^n = \left\{ \vec{w}_\gamma^n = M_\gamma^Y \left(T_K \left(\vec{Z}^n \right) \vec{U}^n \right)_\gamma : \gamma \in Y \right\} \in H_Y. \quad (53)$$

Обозначим

$$A^n = A(Z^n) = (M^Y \circ T_K(Z^n))^{-1} : H_Y \rightarrow H_Y. \quad (54)$$

Операторы A^n в пространстве $H_{0(Y)}$ с тривиальной метрикой (2) — симметричные и положительно определенные. Кинетическая энергия из (52) с учетом (53), (54) примет вид

$$K^n(w^n) = K(Z^n, w^n) = \frac{1}{2} \left\langle (M^Y \circ T_K(Z^n) \circ M^Y)^{-1} w^n, w^n \right\rangle_Y = \frac{1}{2} \left\langle A(Z^n) w^n, w^n \right\rangle_{0(Y)}. \quad (55)$$

Из (51) и (54), (55) получаем

$$M^Y D^{(K)}(Z^n, w^n) = -\frac{\partial K(Z^n, w^n)}{\partial Z^n}; \quad (56)$$

$$U^n = A(Z^n) w^n = \frac{\partial K(Z^n, w^n)}{\partial w^n}. \quad (57)$$

С помощью (53)—(57) и (14) конечно-разностная схема (48)—(50) принимает вид

$$\frac{Z_k^{n+1} - Z_k^n}{\Delta t^{n+1/2}} = (1 - \theta) \frac{\partial K(Z^n, w^n)}{\partial w_k^n} + \theta \frac{\partial K(Z^{n+1}, w^{n+1})}{\partial w_k^{n+1}}, \quad k = 1, 2, \dots, K, \quad k \in Y; \quad (58)$$

$$\begin{aligned} \frac{w_k^{n+1} - w_k^n}{\Delta t^{n+1/2}} &= -\theta \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \frac{\partial E^n(Z^n)}{\partial Z_k^n} - (1 - \theta) \frac{\Delta t^{n+3/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \frac{\partial E^{n+1}(Z^{n+1})}{\partial Z_k^{n+1}} - \\ &- \theta \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \frac{\partial K(Z^n, w^n)}{\partial Z_k^n} - (1 - \theta) \frac{\Delta t^{n+3/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \frac{\partial K(Z^{n+1}, w^{n+1})}{\partial Z_k^{n+1}}, \quad k = 1, 2, \dots, K, \quad k \in Y. \end{aligned} \quad (59)$$

Очевидно, что для полной энергии (разностной функции Гамильтона)

$$\mathbb{H}^n(Z^n, w^n) = K(Z^n, w^n) + E^n(Z^n) = \frac{1}{2} \left\langle A(Z^n) w^n, w^n \right\rangle_{0(Y)} + \left\langle 1_{\mathcal{Y}}, e \left(\eta \left(\vec{Z}^n \right), H^n \right) \right\rangle_{\mathcal{Y}} \quad (60)$$

уравнения (58), (59) принимают еще более естественный гамильтонов вид

$$\frac{Z^{n+1} - Z^n}{\Delta t^{n+1/2}} = (1 - \theta) \frac{\partial \mathbb{H}^n(Z^n, w^n)}{\partial w^n} + \theta \frac{\partial \mathbb{H}^{n+1}(Z^{n+1}, w^{n+1})}{\partial w^{n+1}}; \quad (61)$$

$$\frac{w^{n+1} - w^n}{\Delta t^{n+1/2}} = -\theta \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \frac{\partial \mathbb{H}^n(Z^n, w^n)}{\partial Z^n} - (1 - \theta) \frac{\Delta t^{n+3/2}}{\Delta t^{n+1/2}} \frac{\partial \mathbb{H}^{n+1}(Z^{n+1}, w^{n+1})}{\partial Z^{n+1}}. \quad (62)$$

Для дальнейшего конкретный вид (60) разностной функции Гамильтона не важен.

Теорема 3. *Рассматриваем вариационную неявную конечно-разностную схему, определенную уравнениями (48)—(50). Предполагаем, что зависимость энтропии единицы массы от времени и номера ячейки задана сеточной функцией $H^n = \{H_\alpha^n : \alpha \in \mathcal{Y}\} \in H_{\mathcal{Y}}$, в уравнении для скорости (50) отсутствует вязкость, а давление зависит от удельного объема и заданной энтропии по формуле (10). Определим скрытые обобщенные координаты и скрытые обобщенные импульсы формулами (с обозначениями (53) и (60))*

$$\tilde{Z}^n = Z^n + \varepsilon^n \frac{\partial \mathbb{H}^n(Z^n, w^n)}{\partial w^n}; \quad \tilde{w}^n = w^n - \delta^n \frac{\partial \mathbb{H}^n(Z^n, w^n)}{\partial Z^n}. \quad (63)$$

Для следующих двух вариантов выбора коэффициентов ε^n и δ^n в (63):

$$\varepsilon_{(1)}^n = + (1 - \theta) \Delta t^{n+1/2}; \quad \delta_{(1)}^n = +\theta \Delta t^{n-1/2} \quad (64)$$

и

$$\varepsilon_{(2)}^n = -\theta \Delta t^{n-1/2}; \quad \delta_{(2)}^n = - (1 - \theta) \Delta t^{n+1/2} \quad (65)$$

в эквивалентной разностной схеме для скрытых обобщенных координат и скрытых обобщенных импульсов сохраняется каноничность и фазовый объем в том смысле, что матрица Якоби $\tilde{G}^{\approx n+1/2} = \frac{\partial(\tilde{Z}^{n+1}, \tilde{w}^{n+1})}{\partial(\tilde{Z}^n, \tilde{w}^n)}$ удовлетворяет (1), а якобиан равен единице.

Доказательство. Из (63) с помощью обозначений $\partial^2 \mathbb{H}^n = \begin{pmatrix} \partial_{ZZ}^n & \partial_{Zw}^n \\ \partial_{wZ}^n & \partial_{ww}^n \end{pmatrix} = (\partial^2 \mathbb{H}^n)^T$, $\partial_{ww}^n = \frac{\partial^2 \mathbb{H}^n(Z^n, w^n)}{(\partial w^n)^2}$, $\partial_{wZ}^n = \frac{\partial^2 \mathbb{H}^n(Z^n, w^n)}{\partial w^n \partial Z^n}$, $\partial_{Zw}^n = (\partial_{wZ}^n)^T$, $\partial_{ZZ}^n = \frac{\partial^2 \mathbb{H}^n(Z^n, w^n)}{(\partial Z^n)^2}$ получаем

$$Q^n \equiv \frac{\partial(\tilde{Z}^n, \tilde{w}^n)}{\partial(Z^n, w^n)} = I_{2Y} + \begin{pmatrix} \varepsilon^n & 0 \\ 0 & \delta^n \end{pmatrix} \circ J \circ \partial^2 \mathbb{H}^n. \quad (66)$$

Уравнения (61), (62) определяют однозначные функции $Z^{n+1} = Z^{n+1}(Z^n, w^n)$ и $w^{n+1} = w^{n+1}(Z^n, w^n)$. Продифференцировав уравнения (61) и (62) по Z^n и отдельно по w^n , получим четыре линейных уравнения для блочных компонент матрицы Якоби, которые запишем в виде

$$R^{n+1} \circ \frac{\partial(Z^{n+1}, w^{n+1})}{\partial(Z^n, w^n)} = S^n, \quad (67)$$

где

$$\begin{aligned} R^{n+1} &= I_{2Y} - \begin{pmatrix} \theta \Delta t^{n+1/2} & 0 \\ 0 & (1 - \theta) \Delta t^{n+3/2} \end{pmatrix} \circ J \circ \partial^2 \mathbb{H}^{n+1}; \\ S^n &= I_{2Y} + \begin{pmatrix} (1 - \theta) \Delta t^{n+1/2} & 0 \\ 0 & \theta \Delta t^{n-1/2} \end{pmatrix} \circ J \circ \partial^2 \mathbb{H}^n. \end{aligned} \quad (68)$$

Тогда из многомерного правила дифференцирования сложных функций

$$\tilde{G}^{\approx n+1/2} \equiv \frac{\partial(\tilde{Z}^{n+1}, \tilde{w}^{n+1})}{\partial(\tilde{Z}^n, \tilde{w}^n)} = \frac{\partial(\tilde{Z}^{n+1}, \tilde{w}^{n+1})}{\partial(Z^{n+1}, w^{n+1})} \circ \frac{\partial(Z^{n+1}, w^{n+1})}{\partial(Z^n, w^n)} \circ \left(\frac{\partial(\tilde{Z}^n, \tilde{w}^n)}{\partial(Z^n, w^n)} \right)^{-1}$$

с помощью (67) и (66) получим

$$\tilde{G}^{\approx n+1/2} \equiv \frac{\partial(\tilde{Z}^{n+1}, \tilde{w}^{n+1})}{\partial(\tilde{Z}^n, \tilde{w}^n)} = Q^{n+1} \circ (R^{n+1})^{-1} \circ S^n \circ (Q^n)^{-1}. \quad (69)$$

Условие (1) симплектичности матрицы Якоби (69) преобразуется к виду

$$(S^n)^T \circ \left((R^{n+1})^{-1} \right)^T \circ \left((Q^{n+1})^T \circ J \circ Q^{n+1} \right) \circ (R^{n+1})^{-1} \circ S^n = (Q^n)^T \circ J \circ Q^n. \quad (70)$$

В матричном уравнении (70) можно избавиться от обратных матриц двумя способами выбора Q^n : для этого можно взять или $Q^n = S^n$, или $Q^n = R^n$. Из сравнения (66) с (68) следует, что первый вариант $Q^n = S^n$ соответствует выбору коэффициентов (64) в формуле (63), а второй вариант $Q^n = R^n$ соответствует выбору коэффициентов (65).

В обоих этих случаях (70) превращается по сути в одинаковые уравнения:

$$Q^n = S^n \Rightarrow (S^{n+1})^T \circ J \circ S^{n+1} = (R^{n+1})^T \circ J \circ R^{n+1}; \quad (71)$$

$$Q^n = R^n \Rightarrow (S^n)^T \circ J \circ S^n = (R^n)^T \circ J \circ R^n. \quad (72)$$

Прямыми вычислениями из (68) с учетом свойства $J^T = -J$ получаем равенство

$$(R^n)^T \circ J \circ R^n = J + \left[(1 - \theta) \Delta t^{n+1/2} - \theta \Delta t^{n-1/2} \right] \begin{pmatrix} 0 & \partial_{Zw}^n \\ -\partial_{wZ}^n & 0 \end{pmatrix} + \\ + \theta (1 - \theta) \Delta t^{n-1/2} \Delta t^{n+1/2} \partial^2 \mathbb{H}^n \circ J \circ \partial^2 \mathbb{H}^n = (S^n)^T \circ J \circ S^n,$$

из которого следует справедливость сразу двух вариантов — (71) и (72) условия сохранения каноничности (70). Это завершает доказательство теоремы 3.

Необходимость использования скрытых обобщенных координат и/или скрытых обобщенных импульсов для сохранения фазового объема, и тем более для сохранения каноничности, вытекает из следующего утверждения.

Лемма 2. Пусть для вариационной конечно-разностной схемы (48)–(50) выполнены предположения теоремы 3 и обобщенный импульс определен формулой (53). Тогда в эквивалентной разностной схеме (61), (62) при $\theta \neq 0$ и $\theta \neq 1$ фазовый объем не сохраняется, точнее, якобиан нелинейного разностного оператора перехода в общем случае не равен единице, он равен

$$\frac{D(Z^{n+1}, w^{n+1})}{D(Z^n, w^n)} = \frac{\det(B^n)}{\det(B^{n+1})}, \quad (73)$$

где операторы $B^n : H_Y \rightarrow H_Y$ и $B^{n+1} : H_Y \rightarrow H_Y$ определены формулой

$$B^n = [I_Y + (1 - \theta) \Delta t^{n+1/2} \partial_{wZ}^n] \circ \\ \circ \left\{ I_Y - \theta \Delta t^{n-1/2} \partial_{Zw}^n + \theta (1 - \theta) \Delta t^{n-1/2} \Delta t^{n+1/2} \partial_{ZZ}^n [I_Y + (1 - \theta) \Delta t^{n+1/2} \partial_{wZ}^n]^{-1} \partial_{ww}^n \right\}. \quad (74)$$

Доказательство этого утверждения в силу уравнения (67) сводится к простому вычислению определителей матриц (68), отношение которых дает формулы (73), (74).

В случае единичного оператора кинетической энергии $T_K = I_Y$, рассматриваемого в разд. 1, имеем $\partial_{wZ}^n = \partial_{Zw}^n = 0$, $\partial_{ww}^n = A$, и тогда транспонирование (74) дает (22).

Заключение

Основные результаты работы [1] и данной работы следующие.

Во-первых, для всех рассмотренных конечно-разностных схем, построенных последовательным вариационным методом, доказано сохранение каноничности и фазового объема. Сохранение каноничности означает, что матрицы Якоби операторов перехода разностной схемы являются симплектическими матрицами, которые обладают набором полезных для практики спектральных свойств [12], тесно связанных с устойчивостью.

Во-вторых, для большинства рассмотренных конечно-разностных схем каноничность и фазовый объем сохраняются только для некоторых *скрытых* координат и/или *скрытых* импульсов. Необходимость использования скрытых координат и скрытых импульсов существенно отличает полученные результаты от [7].

В-третьих, доказано, что в неявных конечно-разностных схемах с постоянным весом $\theta = 1/2$ (в уравнениях для координат и для скорости) для произвольного переменного шага по времени при любом способе выбора скрытых обобщенных координат и скрытых обобщенных импульсов не сохраняется фазовый объем. Тем более не сохраняется каноничность. Такие конечно-разностные схемы не удалось построить последовательным вариационным методом.

Список литературы

1. *Бондаренко Ю. А.* Применение вариационных принципов механики для построения дискретных по времени разностных моделей газодинамики. 7. Сохранение фазового объема и каноничности в конечно-разностных схемах типа "крест" // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 1. С. 3–16.
2. *Бондаренко Ю. А.* Применение вариационных принципов механики для построения дискретных по времени разностных моделей газодинамики. 1. Описание метода на простейших примерах // Там же. 1985. Вып. 2. С. 68–75.
3. *Бондаренко Ю. А.* Применение вариационных принципов механики для построения дискретных по времени разностных моделей газодинамики. 5. Законы сохранения импульса и момента импульса в разностных схемах с голономными связями // Там же. 1992. Вып. 1. С. 21–27.
4. *Бердичевский В. Л.* Вариационные принципы механики сплошной среды. М.: Наука, 1983.
5. *Головизнин В. М., Самарский А. А., Фаворский А. П.* Вариационный подход к построению конечно-разностных математических моделей в гидродинамике // Докл. АН СССР. 1977. Т. 235, № 6. С. 1285–1288.
6. *Арнольд В. И.* Математические методы классической механики. М.: Наука, 1974.
7. *Суриц Ю. Б.* Гамильтоновы методы типа Рунге—Кутты и их вариационная трактовка // Математическое моделирование. 1990. Т. 2, № 4. С. 78–87.
8. *Фаворский А. П.* Вариационно-дискретные модели уравнений гидродинамики // Дифференциальные уравнения. 1980. Т. 16, № 7. С. 1308–1321.
9. *Самарский А. А., Колдоба А. В., Повеценок Ю. А., Тишкин В. Ф., Фаворский А. П.* Разностные схемы на нерегулярных сетках. Минск: Изд-во ЗАО "Критерий", 1996.
10. *Еськов Н. С., Пронин Я. В.* Один из способов построения полностью консервативной по энергии разностной схемы газовой динамики в лагранжевых переменных // Межд. конф. "Забабахинские науч. чтения". Снежинск, 5–10 сентября 2005 г. <http://www.vniitf.ru/events/2005/ZST/>.
11. *Бондаренко Ю. А.* Применение вариационных принципов механики для построения дискретных по времени разностных моделей газодинамики. 6. Законы сохранения импульса и момента импульса в разностных схемах с переменным оператором кинетической энергии // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1992. Вып. 1. С. 28–33.
12. *Арнольд В. И., Авец А.* Эргодические проблемы классической механики. Ижевск, 1990.

Статья поступила в редакцию 25.05.10.