УДК 517.9+519.6+533

ПРИМЕНЕНИЕ ВАРИАЦИОННЫХ ПРИНЦИПОВ МЕХАНИКИ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ДИСКРЕТНЫХ ПО ВРЕМЕНИ РАЗНОСТНЫХ МОДЕЛЕЙ ГАЗОДИНАМИКИ. 7. СОХРАНЕНИЕ ФАЗОВОГО ОБЪЕМА И КАНОНИЧНОСТИ В КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫХ СХЕМАХ ТИПА "КРЕСТ"

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.

Ключевые слова: лагранжева газовая динамика, принцип наименьшего действия, вариационные разностные схемы, разностные схемы типа *крест*, фазовый объем, каноничность.

Введение

Вариационный подход построения дифференциально-разностных схем нестационарной газовой динамики был предложен в работе [1] и впоследствии развит в большом количестве работ сотрудников школы А. А. Самарского, в первую очередь А. П. Фаворского, В. М. Головизнина и В. Ф. Тишкина; для примера укажем обзорную работу [2] с большим числом ссылок на работы этого направления. В вариационном подходе для получения уравнений движения (уравнений для скорости) используется принцип наименьшего действия Гамильтона—Остроградского для сплошной среды [3]. Функционал действия сплошной среды аппроксимируется на дискретной пространственной лагранжевой сетке подходящим функционалом действия соответствующей конечномерной механической системы. Из этого функционала на основе принципа наименьшего действия Гамильтона—Остроградского строится дифференциально-разностная схема (с производными по времени и разностями по пространству). Затем производные по времени заменяются разностными соотношениями на основе требования полной консервативности — так в этом подходе строятся конечно-разностные схемы лагранжевой газовой динамики.

В [4] был предложен последовательный вариационный метод построения конечно-разностных схем газовой динамики, основанный на аппроксимации интегрального функционала действия сразу на дискретной сетке по пространству и по времени и решении соответствующей конечномерной вариационной задачи. Настоящая статья продолжает серию работ, начатых в [4] и опубликованных в журнале ВАНТ данной серии в 1985—1992 гг.

В работах [5, 6] рассмотрены многопараметрические семейства разностных схем типа Рунге—Кутты—Нистрема для гамильтоновой системы обыкновенных дифференциальных уравнений классической механики, выделены разностные схемы, сохраняющие каноничность. При этом в [6] доказано, что схемы выделенного класса, сохраняющие каноничность, получаются из подходящего разностного принципа наименьшего действия.

В настоящей работе изучается свойство сохранения каноничности в конечно-разностных схемах газовой динамики на лагранжевых сетках. Здесь ограничиваемся только разностными схемами типа *крест* (схемы на разнесенных по времени сетках), построенными последовательным вариационным методом.

По своему смыслу свойство сохранения каноничности справедливо только в системах без трения. Поэтому в данном исследовании предполагается отсутствие искусственной вязкости и иных диссипативных механизмов, действующих на скорости. Вместо рассмотрения конкретных разностных уравнений для внутренней энергии предполагается известной эволюция энтропии, как это делается в стандартных формулировках принципа наименьшего действия Гамильтона—Остроградского для сплошных сред [3].

Все используемые функции предполагаются достаточно гладкими (имеют столько непрерывных производных, сколько 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 обратных операторов.

Все установленные в работе результаты остаются справедливыми, если в конечно-разностные уравнения для скорости добавить произвольно зависящие от времени и номеров узлов сетки (но не от координат узлов сетки) заданные внешние силы (эти силы можно при желании использовать для моделирования вязкости). В формулировках и обоснованиях эти силы не учитываются, чтобы не загромождать формулы.

Построение конечно-разностных схем многомерной газовой динамики в переменных Лагранжа

Основные понятия и обозначения. Определим лагранжеву разностную сетку как совокупность узлов сетки с множеством номеров $\text{У} = \{\gamma\}$, с координатами $\vec{Z} = \left\{\vec{Z}_\gamma : \gamma \in \text{У}\right\}$ и скоростями $\vec{U} = \left\{\vec{U}_\gamma : \gamma \in \text{У}\right\}$ и совокупность ячеек $\text{Я} = \{\alpha\}$, вершины которых являются узлами сетки. В ячейках $\alpha \in \text{Я}$ 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 $H_{\text{Я}}$. Для сеточных функций типа координат и скоростей, образующих пространство сеточных функций $H_{\text{У}}$, 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:

$$\vec{Z}^n = \left\{\vec{Z}^n_\gamma : \gamma \in \text{У}\right\} = Z^n = \{Z^n_k : k \in \text{У}\} \in H_{\text{У}}, \quad k = 1, 2, \ldots, K.$$

В пространствах сеточных функций $H_{\text{У}}$ и $H_{\text{Я}}$ введем скалярные произведения

$$\left\langle Q^{(1)}, Q^{(2)}\right\rangle_{\text{Я}} = \sum_{\alpha\in\text{Я}} M^{\text{Я}}_\alpha Q^{(1)}_\alpha Q^{(2)}_\alpha, \qquad Q^{(i)} = \left\{Q^{(i)}_\alpha : \alpha \in \text{Я}\right\} \in H_{\text{Я}};$$

$$\left\langle \vec{v}^{(1)}, \vec{v}^{(2)}\right\rangle_{\text{У}} = \sum_{\gamma\in\text{У}} M^{\text{У}}_\gamma \left\langle \vec{v}^{(1)}_\gamma, \vec{v}^{(2)}_\gamma\right\rangle = \sum_{k\in\text{У}} M^{\text{У}}_k v^{(1)}_k v^{(2)}_k, \qquad \vec{v}^{(i)} = \left\{\vec{v}^{(i)}_\gamma : \gamma \in \text{У}\right\} = \left\{v^{(i)}_k : k \in \text{У}\right\} \in H_{\text{У}};$$

$$\left\langle \vec{v}^{(1)}, \vec{v}^{(2)}\right\rangle_{0(\text{У})} = \sum_{\gamma\in\text{У}} \left\langle \vec{v}^{(1)}_\gamma, \vec{v}^{(2)}_\gamma\right\rangle = \sum_{k\in\text{У}} v^{(1)}_k v^{(2)}_k, \qquad \vec{v}^{(i)} = \left\{\vec{v}^{(i)}_\gamma : \gamma \in \text{У}\right\} = \left\{v^{(i)}_k : k \in \text{У}\right\} \in H_{0(\text{У})},$$

где через $M^{\text{Я}}_\alpha$, $\alpha \in \text{Я}$, и $M^{\text{У}}_\gamma$, $\gamma \in \text{У}$, обозначены не зависящие от времени положительные массы ячеек и узлов сетки соответственно. Связь между узлами и ячейками определяем функцией $\Omega_\alpha = \Omega_\alpha\left(\vec{Z}\right)$, выражающей объем ячейки $\alpha \in \text{Я}$ через координаты ее вершин. Закон сохранения массы аппроксимируем соотношением

$$\eta = \frac{\Omega\left(\vec{Z}\right)}{M^{\text{Я}}}; \qquad \eta_\alpha = \frac{\Omega_\alpha\left(\vec{Z}\right)}{M^{\text{Я}}_\alpha}, \quad \alpha \in \text{Я}. \tag{1}$$

Разностный аналог $\mathrm{DIV} : H_{\text{У}} \to H_{\text{Я}}$ дифференциального оператора $\rho^{-1}\mathrm{div}$ определяется, как в [1, 7, 8, 2, 4, 9], вычислением первой вариации удельного объема (1)

$$\delta\eta = \mathrm{DIV}\left(\vec{Z}\right)\delta\vec{Z}, \qquad \delta\vec{Z} \in H_{\text{У}}, \qquad \delta\eta \in H_{\text{Я}};$$

$$\delta\eta_\alpha = \mathrm{DIV}_\alpha\left(\vec{Z}\right)\delta\vec{Z} = \frac{1}{M_\alpha^{\text{Я}}}\sum_{\gamma\in\text{У}}\left\langle \frac{\partial\Omega_\alpha\left(\vec{Z}\right)}{\partial\vec{Z}_\gamma}, \delta\vec{Z}_\gamma\right\rangle, \quad \alpha \in \text{Я}.$$

Здесь и ниже используются сокращенные обозначения вида (на примере двумерного случая) $\dfrac{\partial\Omega_\alpha\left(\vec{Z}\right)}{\partial\vec{Z}_\gamma} = \left(\dfrac{\partial\Omega_\alpha\left(\vec{Z}\right)}{\partial X_\gamma}, \dfrac{\partial\Omega_\alpha\left(\vec{Z}\right)}{\partial Y_\gamma}\right)$, $\vec{Z}_\gamma = (X_\gamma, Y_\gamma)$. Разностный аналог $\mathrm{GRAD}\,(Z) : H_{\text{Я}} \to H_{\text{У}}$, дифференциального оператора $\rho^{-1}\,\mathrm{grad}$ определен формулами

$$\mathrm{GRAD}\left(\vec{Z}\right) = \left(-\mathrm{DIV}\left(\vec{Z}\right)\right)^* : H_{\text{Я}} \to H_{\text{У}};$$

$$\left\langle \mathrm{GRAD}\left(\vec{Z}\right)Q, \vec{v}\right\rangle_{\text{У}} = -\left\langle Q, \mathrm{DIV}\left(\vec{Z}\right)\vec{v}\right\rangle_{\text{Я}}, \quad \forall\, Q \in H_{\text{Я}}, \quad \forall\, \vec{v} \in H_{\text{У}};$$

$$\left(\mathrm{GRAD}\left(\vec{Z}\right)Q\right)_\gamma = \mathrm{GRAD}_\gamma\left(\vec{Z}\right)Q = -\frac{1}{M_\gamma^{\text{У}}}\sum_{\alpha\in\text{Я}} Q_\alpha \frac{\partial\Omega_\alpha\left(\vec{Z}\right)}{\partial\vec{Z}_\gamma}, \quad \gamma \in \text{У}, \quad Q = \{Q_\alpha\}_{\alpha\in\text{Я}} \in H_{\text{Я}}; \quad (2)$$

$\mathrm{GRAD}\,(Z)$ и $\mathrm{DIV}\,(Z)$ — линейные разностные операторы, коэффициенты которых зависят от координат узлов сетки (этой зависимости нет только в одномерном плоском случае).

Последовательный вариационный метод. Для построения конечно-разностной схемы последовательным вариационным методом [4, 10] надо определить связь между координатами узлов лагранжевой сетки и их скоростями, аппроксимирующую на дискретном множестве точек пространства-времени уравнение $\dfrac{d\vec{Z}}{dt} = \vec{U}$, и аппроксимировать на выбранной сетке пространства-времени интегральный функционал действия, для сжимаемого газа равный [3]

$$A = A\left(X\left(t,\zeta\right)\right) = \int\limits_0^{t_{\text{кон}}} \left(K\left(t\right) - E_{\text{внутр}}\left(t\right)\right)dt = \int\limits_0^{t_{\text{кон}}} \iiint\limits_{\Omega_\zeta} \rho_0\left(\zeta\right)\frac{\partial X_0\left(\zeta\right)}{\partial\zeta}\left(\frac{U^2}{2} - e\left(\eta, H, c\right)\right)d\zeta^3 dt.$$

Принцип наименьшего действия Гамильтона—Остроградского, в данном случае условие стационарности (*минимальности*) конечномерного функционала действия, с учетом закона сохранения массы (1) (записанного на дискретной по времени сетке) однозначно определяет конечно-разностное уравнение для скоростей узлов сетки. При этом используется уравнение состояния в виде зависимости $e = e\left(\eta, H, c\right)$, где e — внутренняя энергия единицы массы газа, $\eta = 1/\rho$ — удельный объем, H — энтропия единицы массы, c — другие внутренние степени свободы (например, массовые концентрации).

При вычислении условий стационарности действия энтропия и внутренние степени свободы не варьируются (их динамика считается заданной) и применяется соотношение

$$\delta e\left(\eta, H, c\right) = -p\left(\eta, H, c\right)\delta\eta, \qquad (3)$$

вытекающее из термодинамического тождества [11]

$$p\left(\eta, H, c\right) = -\frac{\partial e\left(\eta, H, c\right)}{\partial\eta} = \left(\frac{\partial e}{\partial\eta}\right)_{\substack{H=\text{const}\\ c=\text{const}}}.$$

В рассматриваемых здесь разностных схемах газодинамическое давление равно

$$p^n = \left\{ p_\alpha^n = p_\alpha\left(\eta_\alpha^n, H_\alpha^n\right) = -\frac{\partial e_\alpha\left(\eta_\alpha^n, H_\alpha^n\right)}{\partial \eta_\alpha^n} : \alpha \in Я \right\} \in H_Я, \tag{4}$$

при этом уравнение состояния может быть своим в каждой ячейке сетки.

Полные внутренняя и кинетическая энергии в рассматриваемых здесь схемах равны

$$E^n\left(\vec{Z}^n\right) = E\left(\vec{Z}^n, t^n\right) = \left\langle 1_Я, e\left(\eta\left(\vec{Z}^n\right), H^n\right)\right\rangle_Я = \sum_{\alpha\in Я} M_\alpha^Я e_\alpha\left(\eta_\alpha\left(\vec{Z}^n\right), H_\alpha^n\right), \tag{5}$$

$$K\left(\vec{U}\right) = \frac{1}{2}\left\langle T_K\vec{U}, \vec{U}\right\rangle_У,$$

где $T_K : H_У \to H_У$ — линейный самосопряженный положительно определенный разностный оператор, близкий к единичному. Обычно $T_K = I_У$. Рассматриваются также разностные схемы с оператором $T_K = T_K\left(\vec{Z}\right)$, зависящим от координат узлов сетки [9, 12].

Будем предполагать, что в конечно-разностных уравнениях для скорости отсутствуют вязкие и иные диссипативные и неконсервативные силы. Конечно-разностные уравнения для внутренней энергии здесь рассматривать не будем, считая, что зависимость энтропии от времени и номера ячейки задана сеточной функцией $H^n = \{H_\alpha^n : \alpha \in Я\} \in H_Я$.

Лагранжева и гамильтонова механика

Напомним простейшие понятия лагранжевой и гамильтоновой механики [13, 14]. Состояние классических механических систем с конечным числом степеней свободы описывается их обобщенными координатами $q = q(t) = (q_1, \dots, q_K)$ и скоростями $\dot{q} = \dfrac{dq}{dt}$. Механическая система определяется функцией Лагранжа $L = L(q, \dot{q}, t)$. Принцип наименьшего действия Гамильтона—Остроградского утверждает, что движение механической системы определяется требованием стационарности функционала действия

$$\delta A = 0, \quad A = \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q}, t)\, dt \tag{6}$$

для произвольных вариаций $\delta q(t)$ обобщенных координат, которые удовлетворяют ограничению $\delta q(t_0) = \delta q(t_1) = 0$. Часто вместо этого ограничения удобнее использовать требование $\delta q(t) \in C_0^k[t_0, t_1]$ для некоторой гладкости $k \geq 1$. Условие стационарности действия (6) дает уравнения движения (или второй закон Ньютона)

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, \dots, K. \tag{7}$$

Величины

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad i = 1, \dots, K \tag{8}$$

называются обобщенными импульсами.

Для перехода от формализма Лагранжа к формализму Гамильтона строится функция Гамильтона $\mathbb{H}(q, p, t)$, которая определяется преобразованием Лежандра

$$\mathbb{H}(q, p, t) = \sum_{k=1}^{K} p_k \dot{q}_k - L(q, \dot{q}, t) = \sum_{k=1}^{K} \dot{q}_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - L(q, \dot{q}, t). \tag{9}$$

В правой части определения (9) обобщенные скорости надо исключить, выразив их через обобщенные импульсы и обобщенные координаты с помощью (8). Уравнения движения (7) при переходе к обобщенным координатам и обобщенным импульсам преобразуются в канонические дифференциальные уравнения Гамильтона

$$\frac{dq_k}{dt} = \frac{\partial \mathbb{H}}{\partial p_k}, \quad k = 1, \ldots, K; \qquad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial \mathbb{H}}{\partial q_k}, \quad k = 1, \ldots, K. \tag{10}$$

Определяющей характеристикой гамильтоновых систем (10) является каноничность фазового потока $\left(q^{(1)}, p^{(1)}\right) \mapsto \left(q\left(t, q^{(1)}, p^{(1)}\right), p\left(t, q^{(1)}, p^{(1)}\right)\right)$, т. е. сохранение симплектической структуры $\omega^2 = dp \wedge dq = dp_1 \wedge dq_1 + \ldots + dp_K \wedge dq_K$. Отображения $g : R^{2K} \to R^{2K}$, которые сохраняют эту *2-форму*, называются каноническими (или сохраняющими симплектическую структуру). Непрерывно дифференцируемое отображение $g : \left(q^{(1)}, p^{(1)}\right) \mapsto \left(q^{(2)}\left(q^{(1)}, p^{(1)}\right), p^{(2)}\left(q^{(1)}, p^{(1)}\right)\right)$ будет каноническим тогда и только тогда, когда матрица Якоби

$$G = \frac{\partial\left(q_1^{(2)}, \ldots, q_K^{(2)}, p_1^{(2)}, \ldots, p_K^{(2)}\right)}{\partial\left(q_1^{(1)}, \ldots, q_K^{(1)}, p_1^{(1)}, \ldots, p_K^{(1)}\right)} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial\left(q^{(2)}\right)}{\partial\left(q^{(1)}\right)} & \dfrac{\partial\left(q^{(2)}\right)}{\partial\left(p^{(1)}\right)} \\ \dfrac{\partial\left(p^{(2)}\right)}{\partial\left(q^{(1)}\right)} & \dfrac{\partial\left(p^{(2)}\right)}{\partial\left(p^{(1)}\right)} \end{pmatrix}$$

удовлетворяет равенству

$$G^T \circ J \circ G = J, \qquad J = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Равенство (11) будем использовать в качестве определения каноничности [6]. Матрицы, удовлетворяющие (11), называются симплектическими, они обладают набором полезных для практики спектральных свойств [15], тесно связанных с устойчивостью. Условие (11), очевидно, эквивалентно условию одновременного выполнения следующих трех равенств для квадратных матриц размерности $K \times K$

$$\left(\frac{\partial\left(q^{(2)}\right)}{\partial\left(q^{(1)}\right)}\right)^T \circ \frac{\partial\left(p^{(2)}\right)}{\partial\left(p^{(1)}\right)} - \left(\frac{\partial\left(p^{(2)}\right)}{\partial\left(q^{(1)}\right)}\right)^T \circ \frac{\partial\left(q^{(2)}\right)}{\partial\left(p^{(1)}\right)} = I; \tag{12}$$

$$\left(\frac{\partial\left(q^{(2)}\right)}{\partial\left(q^{(1)}\right)}\right)^T \circ \frac{\partial\left(p^{(2)}\right)}{\partial\left(q^{(1)}\right)} = \left(\frac{\partial\left(p^{(2)}\right)}{\partial\left(q^{(1)}\right)}\right)^T \circ \frac{\partial\left(q^{(2)}\right)}{\partial\left(q^{(1)}\right)}; \tag{13}$$

$$\left(\frac{\partial\left(q^{(2)}\right)}{\partial\left(p^{(1)}\right)}\right)^T \circ \frac{\partial\left(p^{(2)}\right)}{\partial\left(p^{(1)}\right)} = \left(\frac{\partial\left(p^{(2)}\right)}{\partial\left(p^{(1)}\right)}\right)^T \circ \frac{\partial\left(q^{(2)}\right)}{\partial\left(p^{(1)}\right)}. \tag{14}$$

Из критерия каноничности (11), очевидно, следует сохранение фазового объема (теорема Лиувилля), эквивалентное равенству

$$\frac{D\left(q_1, \ldots, q_K, p_1, \ldots, p_K\right)}{D\left(q_1^{(1)}, \ldots, q_K^{(1)}, p_1^{(1)}, \ldots, p_K^{(1)}\right)} = 1.$$

Для отображения $f : x \mapsto f(x)$, $x \in R^N$, $f(x) \in R^N$, матрицу из первых производных (матрицу Якоби) обозначаем (не будем различать операторы и изображающие их матрицы)

$$\frac{\partial(f)}{\partial(x)} = \frac{\partial\left(f_1, \ldots, f_N\right)}{\partial\left(x_1, \ldots, x_N\right)} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial f_1}{\partial x_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial f_N}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial f_N}{\partial x_N} \end{pmatrix}, \tag{15}$$

а ее определитель (якобиан) обозначаем

$$\frac{D(f)}{D(x)} = \frac{D(f_1,\ldots,f_N)}{D(x_1,\ldots,x_N)} = \det\left(\frac{\partial(f)}{\partial(x)}\right) = \det\left(\frac{\partial(f_1,\ldots,f_N)}{\partial(x_1,\ldots,x_N)}\right).$$

Для матриц из вторых производных от скалярных функций $E = E(x)$ и $H = H(x,p)$, $x \in R^N$, $p \in R^N$, используем обозначения

$$\partial^2 E = \frac{\partial^2 E(x)}{(\partial x)^2} = \frac{\partial\left(\dfrac{\partial E(x)}{\partial x}\right)}{\partial(x)} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 E(x)}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial^2 E(x)}{\partial x_1 \partial x_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 E(x)}{\partial x_N \partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial^2 E(x)}{\partial x_N \partial x_N} \end{pmatrix} = \left(\frac{\partial^2 E(x)}{(\partial x)^2}\right)^T; \tag{16}$$

$$\frac{\partial^2 H(x,p)}{\partial x \partial p} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 H(x,p)}{\partial x_1 \partial p_1} & \cdots & \dfrac{\partial^2 H(x,p)}{\partial x_1 \partial p_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 H(x,p)}{\partial x_N \partial p_1} & \cdots & \dfrac{\partial^2 H(x,p)}{\partial x_N \partial p_N} \end{pmatrix}; \qquad \frac{\partial^2 H(x,p)}{\partial p \partial x} = \left(\frac{\partial^2 H(x,p)}{\partial x \partial p}\right)^T. \tag{17}$$

Сохранение каноничности и фазового объема в конечно-разностных схемах типа *крест*

Вариационная конечно-разностная схема типа *крест* описывается уравнениями

$$\frac{\vec{Z}_\gamma^{n+1} - \vec{Z}_\gamma^n}{\Delta t^{n+1/2}} = \vec{U}_\gamma^{n+1/2}, \quad \gamma \in У; \tag{18}$$

$$\eta^n = \eta\left(\vec{Z}^n\right) = \frac{\Omega\left(\vec{Z}^n\right)}{M^{Я}}; \qquad \eta_\alpha^n = \eta_\alpha\left(\vec{Z}^n\right) = \frac{\Omega_\alpha\left(\vec{Z}^n\right)}{M_\alpha^{Я}}, \quad \alpha \in Я; \tag{19}$$

$$\frac{\vec{U}^{n+1/2} - \vec{U}^{n-1/2}}{\Delta t^n} = -\mathrm{GRAD}\left(\vec{Z}^n\right) p^n. \tag{20}$$

Уравнение (20) получается из условия стационарности разностного функционала действия

$$\begin{aligned} A &= \sum_n \Delta t^{n+1/2} K\left(\vec{U}^{n+1/2}\right) - \sum_n \Delta t^n E^n(\eta^n) = \\ &= \sum_n \frac{\Delta t^{n+1/2}}{2}\left\langle \vec{U}^{n+1/2}, \vec{U}^{n+1/2}\right\rangle_{У} - \sum_n \Delta t^n \left\langle 1_{Я}, e(\eta^n, H^n)\right\rangle_{Я} \end{aligned} \tag{21}$$

при использовании (3) и уравнений (18) и (19) как связей [4].

Теорема 1. *В вариационной конечно-разностной схеме типа крест (18)–(20) обобщенный импульс узлов сетки определим формулой*

$$\vec{w}^{n+1/2} = M^{У}\vec{U}^{n+1/2} = \left\{\vec{w}_\gamma^{n+1/2} = M_\gamma^{У}\vec{U}_\gamma^{n+1/2} : \gamma \in У\right\} \in H_{У}. \tag{22}$$

Предполагаем, что зависимость энтропии единицы массы от времени и номера ячейки известна и задана сеточной функцией $H^n = \{H_\alpha^n : \alpha \in Я\} \in H_{Я}$, *в уравнении для скорости (20) отсутствует вязкость, а давление зависит от удельного объема и заданной энтропии по формуле (4). Для любого фиксированного параметра* $\Theta \in [0,1]$ *определим обобщенные координаты узлов сетки формулой*

$$\vec{Z}^{n-\Theta} = (1-\Theta)\vec{Z}^n + \Theta\vec{Z}^{n-1}, \quad \Theta = \mathrm{const}, \quad 0 \le \Theta \le 1. \tag{23}$$

В эквивалентной разностной схеме для обобщенных импульсов (22) и координат (23) сохраняется каноничность и фазовый объем в том смысле, что матрица Якоби

$$G = G^{(X)n+1/2} = \frac{\partial\left(\vec{Z}^{n-\Theta+1}, \vec{w}^{n+1/2}\right)}{\partial\left(\vec{Z}^{n-\Theta}, \vec{w}^{n-1/2}\right)} \tag{24}$$

удовлетворяет равенству (11), а якобиан равен единице.

В газодинамических разностных схемах для обобщенного импульса, чтобы отличать его от газодинамического давления, вместо принятой в гамильтоновой механике буквы p используем букву w. Через $M^{\text{У}} : H_{\text{У}} \to H_{\text{У}}$ обозначим диагональный обратимый оператор, действующий как умножение скорости узла сетки на массу этого узла; этот оператор превращает скорость каждого узла сетки в его импульс. Обратный ему оператор обозначим через $A = \left(M^{\text{У}}\right)^{-1} : H_{\text{У}} \to H_{\text{У}}$.

Доказательство теоремы 1. Из (2), (19) и (4) следует соотношение

$$M^{\text{У}} \circ \mathrm{GRAD}\left(\vec{Z}^n\right) p^n = \frac{\partial E^n\left(\vec{Z}^n\right)}{\partial \vec{Z}^n}, \tag{25}$$

тогда с помощью (22) перепишем конечно-разностные уравнения (18) и (20) в виде

$$\frac{\vec{Z}^{n+1} - \vec{Z}^n}{\Delta t^{n+1/2}} = A\vec{w}^{n+1/2}; \tag{26}$$

$$\frac{\vec{w}^{n+1/2} - \vec{w}^{n-1/2}}{\Delta t^n} = -\frac{\partial E^n\left(\vec{Z}^n\right)}{\partial \vec{Z}^n}. \tag{27}$$

Уравнения (26), (27) после перехода к сдвинутым координатам (23) принимают вид

$$\frac{\vec{Z}^{n-\Theta+1} - \vec{Z}^{n-\Theta}}{\Delta t^{n+1/2}(1-\Theta) + \Delta t^{n-1/2}\Theta} = A\frac{\Delta t^{n+1/2}(1-\Theta)\,\vec{w}^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}\Theta\vec{w}^{n-1/2}}{\Delta t^{n+1/2}(1-\Theta) + \Delta t^{n-1/2}\Theta}; \tag{28}$$

$$\frac{\vec{w}^{n+1/2} - \vec{w}^{n-1/2}}{\Delta t^n} = \left.\frac{\partial E^n\left(\vec{Z}^n\right)}{\partial \vec{Z}^n}\right|_{\vec{Z}^n = \vec{Z}^{n-\Theta} + \Theta A\Delta t^{n-1/2}\vec{w}^{n-1/2}} = -\frac{\partial E^n\left(\vec{Z}^{n-\Theta} + \Theta A\Delta t^{n-1/2}\vec{w}^{n-1/2}\right)}{\partial \vec{Z}^{n-\Theta}}. \tag{29}$$

Из (28), (29) получаем явные формулы нелинейного разностного оператора перехода

$$\begin{aligned}\vec{Z}^{n-\Theta+1} = \vec{Z}^{n-\Theta} &+ \left[\Delta t^{n+1/2}(1-\Theta) + \Delta t^{n-1/2}\Theta\right] A\vec{w}^{n-1/2} - \\ &- \Delta t^n \Delta t^{n+1/2}(1-\Theta)\, A\frac{\partial E^n\left(\vec{Z}^n\left(\vec{Z}^{n-\Theta}, \vec{w}^{n-1/2}\right)\right)}{\partial \vec{Z}^{n-\Theta}};\end{aligned} \tag{30}$$

$$\vec{w}^{n+1/2} = \vec{w}^{n-1/2} - \Delta t^n \frac{\partial E^n\left(\vec{Z}^n\left(\vec{Z}^{n-\Theta}, \vec{w}^{n-1/2}\right)\right)}{\partial \vec{Z}^{n-\Theta}}, \tag{31}$$

где для экономии места использовано обозначение

$$\vec{Z}^n = \vec{Z}^n\left(\vec{Z}^{n-\Theta}, \vec{w}^{n-1/2}\right) = \vec{Z}^{n-\Theta} + \Theta A\Delta t^{n-1/2}\vec{w}^{n-1/2}.$$

С использованием обозначений (15) и (16) легко вычисляются компоненты блочной матрицы Якоби (24), т. е. первые *частные производные* отображений (30) и (31) (через $I_{\text{У}}$ и $I_{\text{Я}}$ обозначаем единичные квадратные матрицы соответствующего размера):

$$\frac{\partial\left(\vec{Z}^{n-\Theta+1}\right)}{\partial\left(\vec{Z}^{n-\Theta}\right)} = I_{У} - \Delta t^n \Delta t^{n+1/2}\left(1-\Theta\right) A\circ\partial^2 E^n;$$

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

$$\frac{\partial\left(\vec{w}^{n+1/2}\right)}{\partial\left(\vec{Z}^{n-\Theta}\right)} = -\Delta t^n \partial^2 E^n; \qquad \frac{\partial\left(\vec{w}^{n+1/2}\right)}{\partial\left(\vec{w}^{n-1/2}\right)} = I_{У} - \Delta t^{n-1/2}\Delta t^n \Theta \partial^2 E^n\circ A.$$

После этого прямыми вычислениями с учетом симметричности матриц $\partial^2 E^n$ и A проверяется справедливость тождеств (12)—(14), эквивалентных (11), что завершает доказательство теоремы 1.

Так как матрицы, удовлетворяющие условию (11), образуют группу, то матрица Якоби оператора перехода разностной схемы (28), (29) с любого шага по времени n_1 на шаг n_2 также удовлетворяет условию каноничности (11).

Замечание 1. Из (21), (5) и (22) получаем разностную функцию Гамильтона

$$\mathbb{H}\left(\vec{Z}^n,\vec{w}^{n+1/2},t^n\right) = \frac{1}{2}\left\langle A\vec{w}^{n+1/2}, A\vec{w}^{n+1/2}\right\rangle_{У} + E\left(\vec{Z}^n,t^n\right) = \\ = \frac{1}{2}\sum_{\gamma\in У}\left\langle \vec{w}_\gamma^{n+1/2}, \left(A\vec{w}^{n+1/2}\right)_\gamma\right\rangle + \sum_{\alpha\in Я} M_\alpha^{Я} e_\alpha\left(\eta_\alpha\left(\vec{Z}^n\right), H_\alpha^n\right),$$

которая позволяет переписать конечно-разностные уравнения (26), (27) в виде

$$\frac{\vec{Z}_\gamma^{n+1}-\vec{Z}_\gamma^n}{\Delta t^{n+1/2}} = \frac{\partial\mathbb{H}\left(\vec{Z}^n,\vec{w}^{n+1/2},t^n\right)}{\partial\vec{w}_\gamma^{n+1/2}}, \quad \gamma\in У; \tag{32}$$

$$\frac{\vec{w}_\gamma^{n+1/2}-\vec{w}_\gamma^{n-1/2}}{\Delta t^n} = -\frac{\partial\mathbb{H}\left(\vec{Z}^n,\vec{w}^{n+1/2},t^n\right)}{\partial\vec{Z}_\gamma^n}, \quad \gamma\in У. \tag{33}$$

Оказывается, система конечно-разностных уравнений (32), (33) (и тем самым система (18)—(20)) для $\Delta t^{n+1/2} = t^{n+1} - t^n$ эквивалентна каноническим дифференциальным уравнениям Гамильтона (10), если в последних использовать *импульсную* функцию Гамильтона

$$\mathbb{H}\left(\vec{Z},\vec{w},t\right) = \frac{1}{2}\sum_{\gamma\in У}\left\langle \vec{w}_\gamma, \left(A\vec{w}\right)_\gamma\right\rangle + \sum_n \Delta t^n \delta\left(t-t^n\right)\sum_{\alpha\in Я} M_\alpha^{Я} e_\alpha\left(\eta_\alpha\left(\vec{Z}\right), H_\alpha\left(t\right)\right),$$

где $\delta\left(t\right)$ есть обобщенная δ-функция Дирака, а зависимость импульса и координат узлов сетки от непрерывного времени определена формулами $\vec{w}\left(t\right) = \vec{w}^{n+1/2}$, $\vec{Z}\left(t\right) = \vec{Z}^n + \dfrac{t-t^n}{t^{n+1}-t^n}\left(\vec{Z}^{n+1}-\vec{Z}^n\right)$ для $t^n \le t \le t^{n+1}$.

Сохранение каноничности и фазового объема в конечно-разностных схемах с переменным оператором кинетической энергии на разнесенных по времени сетках

Рассмотрим конечно-разностную схему с переменным оператором кинетической энергии $T_K^{n+1/2} = T_K\left(\vec{Z}^n,\vec{Z}^{n+1}\right) : H_{У} \to H_{У}$, построенную последовательным вариационным методом в [10] по аналогии со схемой типа *крест* и описываемую уравнениями

$$\frac{\vec{Z}_{\gamma}^{n+1}-Z_{\gamma}^{n}}{\Delta t^{n+1/2}}=\vec{U}_{\gamma}^{n+1/2},\quad \gamma\in\text{У}; \tag{34}$$

$$\eta^{n}=\eta\left(\vec{Z}^{n}\right)=\frac{\Omega\left(\vec{Z}^{n}\right)}{M^{\text{Я}}};\qquad \eta_{\alpha}^{n}=\eta_{\alpha}\left(\vec{Z}^{n}\right)=\frac{\Omega_{\alpha}\left(\vec{Z}^{n}\right)}{M_{\alpha}^{\text{Я}}},\quad \alpha\in\text{Я}; \tag{35}$$

$$\begin{gathered}\frac{T_K\left(\vec{Z}^{n},\vec{Z}^{n+1}\right)\vec{U}^{n+1/2}-T_K\left(\vec{Z}^{n-1},\vec{Z}^{n}\right)\vec{U}^{n-1/2}}{\Delta t^{n}}=-\mathrm{GRAD}\left(\vec{Z}^{n}\right)p^{n}+\\+\frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^{n}}\vec{D}_{K}^{n}\left(\vec{Z}^{n-1},\vec{Z}^{n};\vec{U}^{n-1/2}\right)+\frac{\Delta t^{n+1/2}}{\Delta t^{n}}\vec{D}_{K,n}\left(\vec{Z}^{n},\vec{Z}^{n+1};\vec{U}^{n+1/2}\right).\end{gathered} \tag{36}$$

Уравнение (36) получается из условия стационарности дискретного функционала действия

$$\begin{gathered}A=\sum_{n}\Delta t^{n+1/2}K\left(\vec{Z}^{n},\vec{Z}^{n+1};\vec{U}^{n+1/2}\right)-\sum_{n}\Delta t^{n}E^{n}\left(\eta^{n}\right)=\\=\sum_{n}\Delta t^{n+1/2}\frac{1}{2}\left\langle T_K\left(\vec{Z}^{n},\vec{Z}^{n+1}\right)\vec{U}^{n+1/2},\vec{U}^{n+1/2}\right\rangle_{\text{У}}-\sum_{n}\Delta t^{n}\left\langle 1_{\text{Я}},e\left(\eta^{n},H^{n}\right)\right\rangle_{\text{Я}},\end{gathered} \tag{37}$$

уравнения (34) и (35) при этом используются как связи. Частные вариационные производные кинетической энергии $K\left(\vec{Z}^{n},\vec{Z}^{n+1};\vec{U}^{n+1/2}\right)$ по координатам равны

$$\begin{gathered}\left\langle\vec{D}_{K,n}\left(\vec{Z}^{n},\vec{Z}^{n+1};\vec{U}^{n+1/2}\right),\vec{v}\right\rangle_{\text{У}}=\left[\frac{d}{d\varepsilon}\frac{1}{2}\left\langle T_K\left(\vec{Z}^{n}+\varepsilon\vec{v},\vec{Z}^{n+1}\right)\vec{U}^{n+1/2},\vec{U}^{n+1/2}\right\rangle_{\text{У}}\right]_{\varepsilon=0},\quad\forall\,\vec{v}\in H_{\text{У}};\\\left\langle\vec{D}_{K}^{n+1}\left(\vec{Z}^{n},\vec{Z}^{n+1};\vec{U}^{n+1/2}\right),\vec{v}\right\rangle_{\text{У}}=\left[\frac{d}{d\varepsilon}\frac{1}{2}\left\langle T_K\left(\vec{Z}^{n},\vec{Z}^{n+1}+\varepsilon\vec{v}\right)\vec{U}^{n+1/2},\vec{U}^{n+1/2}\right\rangle_{\text{У}}\right]_{\varepsilon=0},\quad\forall\,\vec{v}\in H_{\text{У}}.\end{gathered} \tag{38}$$

Неудобство уравнений (34)—(36), (38) состоит в том, что в (36) справа присутствуют координаты с трех слоев по времени: t^{n-1}, t^{n} и t^{n+1}. В таком трехслойном случае неясно, как определять само понятие сохранения каноничности, по смыслу требующее рассмотрения всего двух слоев по времени. Поэтому надо подходящим преобразованием избавиться в (36) от трехслойности по координатам.

Кинетическую энергию из разностного функционала действия (37) с помощью уравнения для координат (34) перепишем в виде

$$\begin{gathered}K^{n+1/2}\left(U^{n+1/2}\right)=\widetilde{K}\left(Z^{n};U^{n+1/2}\right)=\frac{1}{2}\left\langle T_K\left(Z^{n},Z^{n}+\Delta t^{n+1/2}U^{n+1/2}\right)U^{n+1/2},U^{n+1/2}\right\rangle_{\text{У}}=\\=K\left(Z^{n},Z^{n+1};U^{n+1/2}\right)\Big|_{Z^{n+1}=Z^{n}+\Delta t^{n+1/2}U^{n+1/2}}.\end{gathered} \tag{39}$$

Такая кинетическая энергия $\widetilde{K}\left(Z^{n};U^{n+1/2}\right)$ зависит от скорости более сложным образом, чем квадратично. Дифференцирование (39) по скорости с учетом второй формулы (38) дает

$$T_K\left(Z^{n},Z^{n+1}\right)U^{n+1/2}=\frac{1}{M^{\text{У}}}\frac{\partial\widetilde{K}\left(Z^{n};U^{n+1/2}\right)}{\partial U^{n+1/2}}-\Delta t^{n+1/2}D_{K}^{n+1}\left(Z^{n},Z^{n+1};U^{n+1/2}\right). \tag{40}$$

Аналогично, дифференцирование (39) по координатам Z^{n} с учетом (38) дает

$$\frac{1}{M^{\text{У}}}\frac{\partial\widetilde{K}\left(Z^{n};U^{n+1/2}\right)}{\partial Z^{n}}=D_{K,n}\left(Z^{n},Z^{n+1};U^{n+1/2}\right)+D_{K}^{n+1}\left(Z^{n},Z^{n+1};U^{n+1/2}\right). \tag{41}$$

Подставляя в уравнение для скорости (36) равенства (40), (41) и (25), получаем новую эквивалентную форму конечно-разностного уравнения для скорости:

$$\frac{\dfrac{\partial\widetilde{K}\left(Z^{n};U^{n+1/2}\right)}{\partial U^{n+1/2}}-\dfrac{\partial\widetilde{K}\left(Z^{n-1};U^{n-1/2}\right)}{\partial U^{n-1/2}}}{\Delta t^{n}}=-\frac{\partial}{\partial Z^{n}}\left[E^{n}\left(Z^{n}\right)-\frac{\Delta t^{n+1/2}}{\Delta t^{n}}\widetilde{K}\left(Z^{n};U^{n+1/2}\right)\right]. \tag{42}$$

Система двух уравнений (34) и (42) уже имеет двухслойный по времени вид.

Замечание 2. Определенная в (39) кинетическая энергия $\widetilde{K}\left(Z^n; U^{n+1/2}\right)$ в общем случае уже не квадратично зависит от скорости. Нетрудно проверить, что если вместо (37) разностный функционал действия возьмем в виде

$$A = \sum_n \Delta t^{n+1/2} \widetilde{K}\left(Z^n; U^{n+1/2}\right) - \sum_n \Delta t^n \left(1_{\text{Я}}, e\left(\eta^n, H^n\right)\right)_{\text{Я}} \tag{43}$$

с произвольной кинетической энергией $\widetilde{K}\left(Z^n; U^{n+1/2}\right)$ (вне связи с (39)), то условие стационарности нового функционала (43) с учетом (34) и (35) даст конечно-разностное уравнение для скорости (42). В этом плане конечно-разностное уравнение для скорости (42) является более общим по сравнению с (36). Для осмысленности и физической разумности системы уравнений (34), (35) и (42) достаточно потребовать неограниченности и невырожденности (т. е. строгой выпуклости по скорости) кинетической энергии

$$\lim_{\|U^{n+1/2}\|_{\text{У}} \to \infty} \left\langle \frac{\partial \widetilde{K}\left(Z^n; U^{n+1/2}\right)}{\partial U^{n+1/2}}, \frac{U^{n+1/2}}{\|U^{n+1/2}\|_{\text{У}}} \right\rangle_{\text{У}} = +\infty; \tag{44}$$

$$\frac{\partial^2 \widetilde{K}\left(Z^n; U^{n+1/2}\right)}{\left(\partial U^{n+1/2}\right)^2} > 0. \tag{45}$$

Для кинетической энергии $\widetilde{K}\left(Z^n; U^{n+1/2}\right)$ из (39) условие (44) выполнено для операторов кинетической энергии, удовлетворяющих необременительной равномерной оценке

$$0 < C_1 \le T_K\left(Z^n, Z^{n+1}\right) \le C_2 < +\infty. \tag{46}$$

Кинетическая энергия (39) при наличии оценки (46) удовлетворяет и условию (45) для всех достаточно малых значений шага по времени $\Delta t^{n+1/2}$.

Теорема 2. *Пусть в вариационной конечно-разностной схеме, определенной уравнениями (34)—(36), используется зависящий от координат самосопряженный положительно определенный оператор кинетической энергии* $T_K\left(Z^n, Z^{n+1}\right) : H_{\text{У}} \to H_{\text{У}}$, *удовлетворяющий условию (46). Предполагаем, что зависимость энтропии единицы массы от времени и номера ячейки известна и задана сеточной функцией* $H^n = \{H^n_\alpha : \alpha \in \text{Я}\} \in H_{\text{Я}}$, *в уравнении для скорости (36) отсутствует вязкость, а давление зависит от удельного объема и энтропии по формуле (4). Определим скрытый обобщенный импульс узлов сетки формулой*

$$\widetilde{w}^{n+1/2} = \frac{\partial \widetilde{K}\left(Z^n; U^{n+1/2}\right)}{\partial U^{n+1/2}}, \tag{47}$$

где используется кинетическая энергия (39). Тогда для обобщенных импульсов (47) и для координат Z^n *узлов сетки в эквивалентной разностной схеме сохраняется каноничность и фазовый объем, т. е. матрица Якоби* $\widetilde{G}^{n+1/2} = \dfrac{\partial\left(Z^{n+1}, \widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial\left(Z^n, \widetilde{w}^{n-1/2}\right)}$ *удовлетворяет тождеству (11), а якобиан равен единице.*

Доказательство. Из условия (46) следует справедливость условий (44) и (45), и уравнение (47) однозначно разрешимо относительно скорости для любого значения обобщенного импульса (это следует, например, из теоремы 14.6 книги [16]). Это решение обозначим через

$$U^{n+1/2} = \widetilde{U}\left(Z^n; \widetilde{w}^{n+1/2}\right). \tag{48}$$

Из (47) и (48) дифференцированием устанавливается справедливость тождеств

$$\frac{\partial \widetilde{U}\left(Z^n;\widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial Z^n} = -\left(\frac{\partial^2 \widetilde{K}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right)}{\left(\partial U^{n+1/2}\right)^2}\right)^{-1} \circ \frac{\partial^2 \widetilde{K}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right)}{\partial U^{n+1/2}\partial Z^n}; \tag{49}$$

$$\frac{\partial \widetilde{U}\left(Z^n;\widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}} = \left(\frac{\partial^2 \widetilde{K}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right)}{\left(\partial U^{n+1/2}\right)^2}\right)^{-1}. \tag{50}$$

По аналогии с (9) определим *сопряженную разностную кинетическую энергию*

$$\widetilde{k}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right) = \left\langle U^{n+1/2}, \frac{\partial \widetilde{K}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right)}{\partial U^{n+1/2}}\right\rangle_{0(\text{У})} - \widetilde{K}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right) =$$

$$= \sum_{j=1}^{K} U_j^{n+1/2}\frac{\partial \widetilde{K}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right)}{\partial U_j^{n+1/2}} - \widetilde{K}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right); \tag{51}$$

$$\widetilde{\widetilde{k}}\left(Z^n;\widetilde{w}^{n+1/2}\right) = \widetilde{k}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right)\Big|_{U^{n+1/2}=\widetilde{U}\left(Z^n;\widetilde{w}^{n+1/2}\right)} = \widetilde{k}\left(Z^n;\widetilde{U}\left(Z^n;\widetilde{w}^{n+1/2}\right)\right). \tag{52}$$

По теореме Эйлера $\widetilde{k}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right) = \widetilde{K}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right)$ тогда и только тогда, когда кинетическая энергия $\widetilde{K}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right)$ есть однородная квадратичная функция скорости. В остальных случаях переход к сопряженной кинетической энергии нетривиален.

Из (51), (52) с помощью (49), (50) устанавливается справедливость равенств

$$\frac{\partial \widetilde{\widetilde{k}}\left(Z^n;\widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}} = U^{n+1/2}; \tag{53}$$

$$\frac{\partial \widetilde{\widetilde{k}}\left(Z^n;\widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial Z^n} = -\frac{\partial \widetilde{K}\left(Z^n;U^{n+1/2}\right)}{\partial Z^n}. \tag{54}$$

Подставляя (47), (53) и (54) в (34) и (42), получаем

$$\frac{Z^{n+1} - Z^n}{\Delta t^{n+1/2}} = \frac{\partial \widetilde{\widetilde{k}}\left(Z^n;\widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}; \tag{55}$$

$$\frac{\widetilde{w}^{n+1/2} - \widetilde{w}^{n-1/2}}{\Delta t^n} = -\left(\frac{\partial E^n\left(Z^n\right)}{\partial Z^n} + \frac{\Delta t^{n+1/2}}{\Delta t^n}\frac{\partial \widetilde{\widetilde{k}}\left(Z^n;\widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial Z^n}\right). \tag{56}$$

Введем обозначение для разностной функции Гамильтона

$$\widetilde{\widetilde{\mathbb{H}}}^n\left(Z^n,\widetilde{w}^{n+1/2}\right) = \frac{\Delta t^{n+1/2}}{\Delta t^n}\widetilde{\widetilde{k}}\left(Z^n;\widetilde{w}^{n+1/2}\right) + E^n\left(Z^n\right). \tag{57}$$

Тогда конечно-разностные уравнения (55), (56) принимают *гамильтонов* вид

$$\frac{Z^{n+1} - Z^n}{\Delta t^n} = \frac{\partial \widetilde{\widetilde{\mathbb{H}}}^n\left(Z^n,\widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}; \tag{58}$$

$$\frac{\widetilde{w}^{n+1/2} - \widetilde{w}^{n-1/2}}{\Delta t^n} = -\frac{\partial \widetilde{\widetilde{\mathbb{H}}}^n\left(Z^n,\widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial Z^n}. \tag{59}$$

В (58) по сравнению с (55) изменился шаг по времени, что связано с наличием множителя перед кинетической энергией в разностной функции Гамильтона (57).

В принципе сохранение каноничности разностной схемой (58), (59) является частным случаем общей теоремы, установленной в [6]. Но формально в работах [5, 6] рассмотрен только случай функции Гамильтона, не зависящей явно от времени. Поэтому приводим в Приложении простое прямое доказательство сохранения каноничности схемой (58), (59), что завершает доказательство теоремы 2.

Замечание 3. В силу замечания 2 аналог теоремы 2 справедлив и для разностной схемы (34), (42) с кинетической энергией $\widetilde{K}\left(Z^n; U^{n+1/2}\right)$, произвольно зависящей от скорости. Формулировку и доказательство не приводим, так как отличие сводится только к использованию ограничений (44), (45) вместо (46).

Заключение

Таким образом, для конечно-разностных схем газовой динамики в переменных Лагранжа на разнесенных по времени сетках (типа *крест*), построенных последовательным вариационным методом, доказано сохранение каноничности и тем самым сохранение фазового объема. Эти результаты дополняют результаты работы [6] в том смысле, что найдены такие согласованные с разностными схемами определения обобщенного импульса, которые приводят к сохранению каноничности и фазового объема.

Приложение. Доказательство сохранения каноничности в конечно-разностной схеме (58), (59)

Докажем справедливость равенства (11) для матрицы Якоби оператора перехода разностной схемы (58), (59), имеющей гамильтонов вид. Полагаем в этих уравнениях $Z^{n+1} = Z^{n+1}\left(Z^n, \widetilde{w}^{n-1/2}\right)$ и $\widetilde{w}^{n+1/2} = \widetilde{w}^{n+1/2}\left(Z^n, \widetilde{w}^{n-1/2}\right)$. Тогда с помощью многомерного правила дифференцирования сложных функций из (58), (59) получаем уравнения

$$\frac{\partial Z^{n+1}}{\partial Z^n} = I_{\text{У}} + \Delta t^n \frac{\partial^2 \widetilde{\widetilde{\mathbb{H}}}^n\left(Z^n, \widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial \widetilde{w}^{n+1/2} \partial Z^n} + \Delta t^n \frac{\partial^2 \widetilde{\widetilde{\mathbb{H}}}^n\left(Z^n, \widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\left(\partial \widetilde{w}^{n+1/2}\right)^2} \circ \frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial Z^n};$$

$$\frac{\partial Z^{n+1}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}} = \Delta t^n \frac{\partial^2 \widetilde{\widetilde{\mathbb{H}}}^n\left(Z^n, \widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\left(\partial \widetilde{w}^{n+1/2}\right)^2} \circ \frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}};$$

$$\frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial Z^n} = -\Delta t^n \frac{\partial^2 \widetilde{\widetilde{\mathbb{H}}}^n\left(Z^n, \widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\left(\partial Z^n\right)^2} - \Delta t^n \frac{\partial^2 \widetilde{\widetilde{\mathbb{H}}}^n\left(Z^n, \widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial Z^n \partial \widetilde{w}^{n+1/2}} \circ \frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial Z^n};$$

$$\frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}} = I_{\text{У}} - \Delta t^n \frac{\partial^2 \widetilde{\widetilde{\mathbb{H}}}^n\left(Z^n, \widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial Z^n \partial \widetilde{w}^{n+1/2}} \circ \frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}}.$$

Для всех достаточно малых шагов по времени Δt^n эта система уравнений разрешима и ее решение (блочные компоненты матрицы Якоби оператора перехода) имеет вид (используем сокращенные обозначения $\widetilde{\partial}^n_{wZ} = \dfrac{\partial^2 \widetilde{\widetilde{\mathbb{H}}}^n\left(Z^n, \widetilde{w}^{n+1/2}\right)}{\partial \widetilde{w}^{n+1/2} \partial Z^n}$ и т. п.)

$$\frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial Z^n} = -\Delta t^n \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ZZ};$$

$$\frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}} = \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1};$$

$$\frac{\partial Z^{n+1}}{\partial Z^n} = \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right) - \left(\Delta t^n\right)^2 \widetilde{\partial}^n_{ww} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ZZ};$$

$$\frac{\partial Z^{n+1}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}} = \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{ww} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1}.$$

Критерии симплектичности (12)—(14) проверяются прямыми вычислениями с учетом (17) при транспонировании. Проверяем (12):

$$\left(\frac{\partial Z^{n+1}}{\partial Z^n}\right)^T \circ \frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}} - \left(\frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial Z^n}\right)^T \circ \frac{\partial Z^{n+1}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}} =$$

$$= \left[\left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right) - (\Delta t^n)^2\, \widetilde{\partial}^n_{ZZ} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ww}\right] \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} +$$

$$+ (\Delta t^n)^2\, \widetilde{\partial}^n_{ZZ} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ww} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} =$$

$$= \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right) \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} - (\Delta t^n)^2\, \widetilde{\partial}^n_{ZZ} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ww} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} +$$

$$+ (\Delta t^n)^2\, \widetilde{\partial}^n_{ZZ} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ww} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} = I_{\text{У}}.$$

Проверяем (13):

$$\left(\frac{\partial Z^{n+1}}{\partial Z^n}\right)^T \circ \frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial Z^n} - \left(\frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial Z^n}\right)^T \circ \frac{\partial Z^{n+1}}{\partial Z^n} =$$

$$= -\left[\left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right) - (\Delta t^n)^2\, \widetilde{\partial}^n_{ZZ} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ww}\right] \circ \Delta t^n \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ZZ} +$$

$$+ \left[\Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{ZZ} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right)^{-1}\right] \circ \left[\left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right) - (\Delta t^n)^2\, \widetilde{\partial}^n_{ww} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ZZ}\right] =$$

$$= -\left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right) \circ \Delta t^n \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ZZ} +$$

$$+ (\Delta t^n)^2\, \widetilde{\partial}^n_{ZZ} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ww} \circ \Delta t^n \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ZZ} +$$

$$+ \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{ZZ} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right)^{-1} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right) -$$

$$- \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{ZZ} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right)^{-1} \circ (\Delta t^n)^2\, \widetilde{\partial}^n_{ww} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ZZ} = 0.$$

Проверяем (14):

$$\left(\frac{\partial Z^{n+1}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}}\right)^T \circ \frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}} - \left(\frac{\partial \widetilde{w}^{n+1/2}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}}\right)^T \circ \frac{\partial Z^{n+1}}{\partial \widetilde{w}^{n-1/2}} =$$

$$= \Delta t^n \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right)^{-1} \circ \widetilde{\partial}^n_{ww} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} -$$

$$- \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{wZ}\right)^{-1} \circ \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{ww} \circ \left(I_{\text{У}} + \Delta t^n \widetilde{\partial}^n_{Zw}\right)^{-1} = 0.$$

Тем самым установлена справедливость равенства (11), что и требовалось доказать.

Список литературы

1. *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.
2. *Коршия Т. К., Тишкин В. Ф., Самарский А. А., Фаворский А. П., Шашков М. Ю.* Вариационно-операторные разностные схемы для уравнений математической физики. Тбилиси: Изд-во Тбилисского университета, 1983.

3. *Бердичевский В. Л.* Вариационные принципы механики сплошной среды. М.: Наука, 1983.

4. *Бондаренко Ю. А.* Применение вариационных принципов механики для построения дискретных по времени разностных моделей газодинамики. 1. Описание метода на простейших примерах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1985. Вып. 2. С. 68—75.

5. *Сурис Ю. Б.* О каноничности отображений, порождаемых методами типа Рунге—Кутты при интегрировании систем $\ddot{x} = -\partial U/\partial x$ // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1989. Т. 29, № 2. С. 202—211.

6. *Сурис Ю. Б.* Гамильтоновы методы типа Рунге—Кутты и их вариационная трактовка // Математическое моделирование. 1990. Т. 2, № 4. С. 78—87.

7. *Фаворский А. П.* Вариационно-дискретные модели уравнений гидродинамики // Дифференциальные уравнения. 1980. Т. 16, № 7. С. 1308—1321.

8. *Волкова Р. А., Иванов А. А., Михайлова Н. В., Моисеенко Л. В., Тишкин В. Ф., Фаворский А. П.* Вариационно-разностные схемы для задач трехмерной газовой динамики в лагранжевых переменных: Препринт № 112, М.: ИПМ АН СССР, 1982.

9. *Самарский А. А., Колдоба А. В., Повещенко Ю. А., Тишкин В. Ф., Фаворский А. П.* Разностные схемы на нерегулярных сетках. Минск: Изд-во ЗАО "Критерий", 1996.

10. *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.

11. *Базаров И. П.* Термодинамика. М.: Высшая школа, 1991.

12. *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". 5—10 сентября 2005 г., г. Снежинск, Челябинская обл. http://www.vniitf.ru/events/2005/ZST/.

13. *Арнольд В. И.* Математические методы классической механики. М.: Наука, 1974.

14. *Шмутцер Э.* Основные принципы классической механики и классической теории поля (канонический аппарат). М.: Меркурий-ПРЕСС, 2000.

15. *Арнольд В. И., Авец А.* Эргодические проблемы классической механики. Ижевск, 1990.

16. *Вайнберг М. М.* Вариационный метод и метод монотонных операторов в теории нелинейных уравнений. М.: Наука, 1972.

Статья поступила в редакцию 25.05.10.