

SZIMPLEKTIKUS NUMERIKUS MÓDSZEREK ÉS MŰSZAKI ALKALMAZÁSUK NÉHÁNY GYAKORLATI SZEMPONTJA

Takács Donát M. 

PhD-hallgató, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
Gépészmérnöki Kar, Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3., e-mail: takacs@energia.bme.hu

Montavid Termodinamikai Kutatócsoport
c/o ETTE, 1012 Budapest, Lovas út 18.

Fülöp Tamás 

egyetemi docens, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
Gépészmérnöki Kar, Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3., e-mail: fulop.tamas@gpk.bme.hu

Montavid Termodinamikai Kutatócsoport
c/o ETTE, 1012 Budapest, Lovas út 18.

Absztrakt

Napjaink gépészmérnöki gyakorlatában elengedhetetlen fontosságúnak bizonyul a különféle numerikus szimulációk használata. Jelen írásban a dinamikai rendszerekre alkalmazható numerikus módszerek egy kitüntetett típusát, a szimplektikus sémákat vizsgáljuk, melyek a szerkezetőrző numerikus módszerek nagyobb családjába tartoznak. A szimplektikus sémákat egy nemlineáris dinamikai rendszerre, a rugós síkinga mechanikai modelljére alkalmazzuk, és az így kapott eredményeken keresztül hasonlítjuk össze néhány elterjedt, hagyományos módszerrel. Ezekhez képest a szimplektikus módszerek kvantitatív és kvalitatív szempontból is pontosabb eredményt adnak, azonos vagy akár kisebb számítási igény mellett is. Megemlítjük a szimplektikus módszerek korlátait, tárgyaljuk sajátosságait a gyakorlati problémákra való alkalmazásuk esetén, a lehetséges kiterjesztéseiket, valamint a számítási eredmények koordináta-rendszertől való függését is bemutatjuk.

Kulcsszavak: numerikus módszerek, szimplektikus sémák, szerkezetőrző módszerek, időintegrálás

Abstract

The use of various numerical simulations proves to be indispensable in contemporary mechanical engineering. The present work investigates a special type of the numerical methods used for simulating dynamical systems, the symplectic schemes, which belong to the broader class of structure-preserving numerical methods. We apply the symplectic schemes to a nonlinear dynamic system, the mechanical model of a planar elastic pendulum, and using our results we contrast them with a few widely used classical methods. Compared to these, the symplectic methods give more accurate results in both the quantitative and qualitative sense, with the same or even lower computational demand. We also mention the limitations and discuss the specifics of their practical applications, some of their possible extensions, and show that the accuracy of the numerical results depends on the chosen coordinate system.

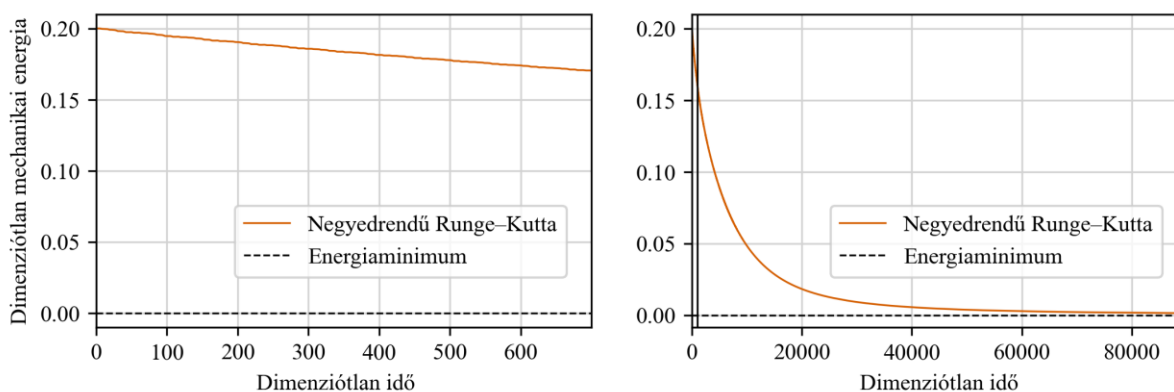
Keywords: numerical methods, symplectic schemes, structure-preserving schemes, time integration

1. Bevezetés

A gépészmérnöki gyakorlatban univerzálisan megjelenő dinamikai rendszerek viselkedésének jellemzése, időbeli előrejelzése igen gyakran a fizikai modellt leíró közönséges differenciálegyenletek (DE), ill. differenciálegyenlet-rendszerek megoldásán, vizsgálatán alapul. Olyan egyszerűbb esetekben, mint például a lineáris rendszerek szabad rezgése (Ebben a cikkben mechanikai példákkal illusztráljuk az elmondottakat, de természetesen számos más műszaki területen, pl. termodinamikában, hidrodinamikában, szabályozástechnikában, kémiai folyamatoknál stb. is gyakoriak az olyan közönséges differenciálegyenlet-rendszerekkel leírható jelenségek, melyek megoldásához használhatóak a bemutatott (szimplektikus vagy egyéb) numerikus módszerek.), ezek megoldása kézenfekvő, szinte rutinszerű. Sőt, a lineáris DE-rendszerek általános tulajdonságait kihasználó eredmények – mint például a sajátérték-számítás eljárása a sajátfrekvenciák és lengésképek meghatározásához – az eredeti DE-rendszer időfüggő megoldása nélkül is hasznosíthatóak, és egyes esetekben akár hasznosabbnak is bizonyulhatnak annál. Például egy összetett szerkezet sajátfrekvenciái kísérleti úton is meghatározhatóak, melyek hasznos információt jelentenek a tervező, ill. üzemeltetőmérnök számára is, a mögöttes DE-rendszer további elemzése nélkül.

Ugyanakkor nem szabad figyelmen kívül hagyni, hogy a (geometriai, anyagi, szerkezeti vagy egyéb okokból) nemlineáris dinamikai viselkedést mutató szerkezetek esetén a lineáris viselkedést feltételező hagyományos módszerek alkalmazása helytelen eredményt adhat, és a modellt leíró DE-rendszer megoldása általában analitikusan nem, csak numerikus módon valósítható meg. Ehhez számos, a mérnöki gyakorlatban elterjedt szoftver áll rendelkezésre, melyek különféle numerikus módszereket, numerikus sémákat (pl.: Runge–Kutta, Newmark, HHT- α) valósítanak meg és tesznek könnyen kezelhetővé a felhasználó számára.

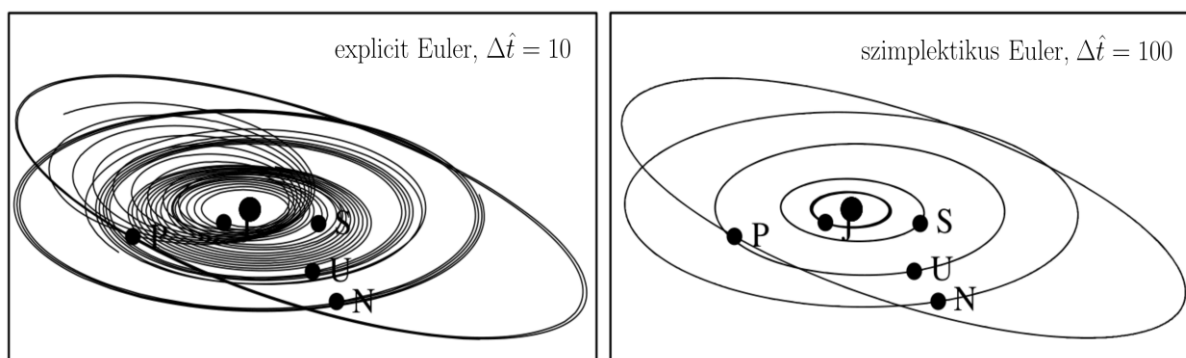
A nemlineáris dinamikai rendszerek azonban gyakran kaotikus viselkedést mutatnak (azaz a DE-rendszerek megoldása, és így a szimulációk eredménye is nagyon érzékeny a kezdeti feltételekre), mely esetekben célravezetőbb kvalitatív vizsgálatot folytatni a számítások kvantitatív értékelése helyett. Így ismét hasznossá válnak olyan analitikus, matematikai módszerek, melyek a nemlineáris dinamikai rendszerek jellemzését teszik lehetővé (pl.: fázistérképek, bifurkációanalízis, stabilitásvizsgálat), és így kiegészítik a numerikus módszerek alkalmazását.



1. ábra. Rugós síkinga (ld. 4. szakasz) szimulációja negyedrendű Runge–Kutta-módszerrel, $\Delta t = 0,7$ időlépés mellett

A numerikus módszerek közismert tulajdonsága, hogy általánosan csak a $\Delta t \rightarrow 0$ végtelenül kicsi időlépés határesetében adnak egzakt, kvantitatívan pontos megoldást ismert kezdeti feltételek mellett. Kevésbé ismert azonban, hogy a legtöbb, gyakorlatban elterjedt numerikus módszer sokszor nemcsak kvantitatív, de kvalitatív szempontból is helytelen eredményt ad $\Delta t > 0$ időlépés mellett. Például egy negyedrendű Runge–Kutta-módszerrel szimulált rendszer síkbeli mozgása hosszabb szimulációs idő után lecsillapodik (ld. 1. ábra), annak ellenére is, hogy a mechanikai rendszer csillapításmentes: ez a *numerikus disszipáció* jelensége. Konzervatív, zárt rendszerek esetében ez a jelenség könnyen megfigyelhető az összenergia időbeli megváltozásán, melynek mechanikailag definíció szerint állandónak kellene lennie. Disszipatív rendszerek esetében ezt nehezebb tetten érni, hiszen a valódi és a numerikus disszipáció hatása nehezen megkülönböztethető, a végeredmény kvalitatív helytelensége azonban továbbra is megmarad.

A klasszikus numerikus módszerek fenti és azokhoz hasonló további tulajdonságai (numerikus diszperzió, a léptetés hamiltoni szempontból nem-kanonikus jellege, a konfigurációs tér differenciálgeometriájának figyelmen kívül hagyása stb.) inspirálták a szerkezetőrző numerikus módszerek (Szintén elterjedt, hasonló jelentésű még a „geometriai numerikus módszerek” megjelölés is.) családját, melyek a matematikai modell – és ezen keresztül a fizikai rendszer – bizonyos belső szerkezetének megőrzésén keresztül hivatottak biztosítani valamely fontos mennyiség (pl.: összenergia, perdület) megmaradását, illetve a megoldás kvalitatív helyességét (pl. konfigurációs tér geometriájának megőrzése, megfelelő esetben zárt trajektóriák biztosítása). A szerkezetőrző numerikus módszerek egyik első példájaként jelentek meg a szimplektikus numerikus módszerek (de Vogelaere, 1956), melyek hamiltoni rendszerek szimulációjához alkalmazhatóak. Egy klasszikus alkalmazási példát mutat a 2. ábra (Hairer et al., 2006) nyomán, melyen jól látható, hogy a Naprendszer modelljének szimulációja esetén egy szimplektikus séma biztosítja a bolygók szimulált pályájának zártságát, míg egy hagyományos séma erre nem alkalmas.



2. ábra. A Naprendszer newtoni modelljének szimulációja szimplektikus ill. explicit Euler-módszerrel (Hairer et al., 2006)

Jelen írás célja a hagyományos (2. szakasz) és szimplektikus numerikus sémák (3. szakasz) bemutatása elméleti háttérük rövid áttekintésével, majd egy nemlineáris dinamikai esettanulmány (rugós síkinga, 4. szakasz) ismertetése numerikus eredményekkel, melyen tetten érhetőek a szimplektikus módszerek előnyei, hátrányai és sajátosságai.

2. Numerikus módszerek DE-rendszerek megoldására

Egy DE-rendszer kezdetiérték-feladata az

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, t), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \quad (1)$$

alakban írható, ahol \mathbf{y} a rendszer állapotváltozóit tartalmazó (n -dimenziós) vektor, $\dot{\mathbf{y}} \equiv d\mathbf{y}/dt$ ennek idő szerinti deriváltja, t az idő, \mathbf{f} a differenciálegyenlethez tartozó vektormező, \mathbf{y}_0 pedig a kezdetiérték-vektor. (Abban az esetben, ha a vektormező időfüggetlen, azaz $\mathbf{f}(\mathbf{y}, t) \equiv \mathbf{f}(\mathbf{y})$, a differenciálegyenlet autonómnak nevezzük.)

A DE-rendszer $\mathbf{y}(t)$ megoldását jellemző

$$\varphi_t: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad \varphi_t(\mathbf{y}(t_0), t_0) = \mathbf{y}(t_0 + t) \quad (2)$$

függvény (A tárgyalás \mathbb{R}^n -ről általánosabb vektorterekre, sokaságokra is kiterjeszhető.) a *folyam* („flow”), amely a megoldás értékét adja meg a t_0 időpillanattól és $\mathbf{y}(t_0)$ állapotból indulva, t idő elteltével.

A DE-rendszer numerikus megoldását diszkrét t^j időpillanatokban számítjuk ki ($\mathbf{y}^j \approx \mathbf{y}(t^j)$), a kezdeti feltételből kiindulva, azaz $\mathbf{y}^0 = \mathbf{y}_0$. Egyenközű módszerek (tehát állandó időlépés) esetében az \mathbf{y}^j értékeket, azaz a közelítő megoldást a $t^j = j\Delta t$ időpillanatokban állítjuk elő. A továbbiakban az egyszerűség kedvéért csak egyenközű sémákra szorítkozunk.

Egy általános, Δt időlépéssel rendelkező egylépéses explicit numerikus séma megadható

$$\mathbf{y}^{j+1} = \Phi_{\Delta t}(\mathbf{y}^j, t^j), \quad (3)$$

alakban, ahol $\Phi_{\Delta t}$ a numerikus módszerhez tartozó $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ leképezés („map”), amely egy konkrét sémára jellemző. Például az explicit Euler-séma esetén

$$\Phi_{\Delta t}(\mathbf{y}^j, t^j) = \mathbf{y}^j + \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{y}^j, t^j), \quad (4)$$

azaz a léptetés

$$\mathbf{y}^{j+1} = \mathbf{y}^j + \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{y}^j, t^j) \quad (5)$$

lesz.

Egylépéses, implicit séma esetén a leképezés $\Phi_{\Delta t}(\mathbf{y}^j, \mathbf{y}^{j+1}, t)$ alakú; ebben az esetben \mathbf{y}^{j+1} meghatározásához egy algebrai egyenlet(rendszer) megoldására van szükség, a konkrét DE-rendszer vektormezőjétől függően mátrixinverzióval vagy valamilyen iterációval. Autonóm rendszer és explicit séma esetében a leképezés $\Phi_{\Delta t}(\mathbf{y}^j)$ alakra egyszerűsödik; a továbbiakban csak ilyen numerikus sémákat tárgyalunk.

Érdemes megjegyezni, hogy a probléma jellegéből fakadóan $\Phi_\tau \neq \varphi_\tau$ bármely $\tau > 0$ időtartamra; hiszen ha ismernénk φ -t, akkor ismernénk az egzakt megoldást is, és nem lenne szükségünk a numerikus módszerre. A diszkrét idejű numerikus séma jóslata azonban folytonos időre is kiterjeszhető, az *inverzhiba-elemzés* („backward error analysis”, BEA) segítségével (Reich, 1999; Hairer et al., 2000; Moan, 2006). A $\Phi_{\Delta t}$ leképezés ugyanis értelmezhető egy folytonos idejű $\tilde{\varphi}_{\Delta t}$ folyam leszűkítéseként is, melyhez tartozó $\tilde{\mathbf{y}}(t)$ módosult vagy torzult folytonos megoldás éppen a numerikus séma által előállított értékeket veszi fel a megfelelő pontokban, azaz

$$\tilde{\mathbf{y}}(j\Delta t) = \mathbf{y}^j. \quad (6)$$

Másképp megfogalmazva: az eredeti rendszer *közelítő* megoldása egy „közeli” rendszer *egzakt* megoldása.

A BEA-eljárás részletesebb tárgyalása túlmutat a jelen cikk keretein, azonban a megközelítés szemléletformáló ereje és a felhasználásával kapható eredmények segítségünkre lesznek a továbbiakban.

3. Hamiltoni rendszerek és szimplektikus sémák

Holonom (Holonom rendszereknek nevezzük a *geometriai* kényszerfeltételekkel kifejezhető kényszerezésű rendszereket, szemben a *kinematikai* kényszerfeltételeket tartalmazó, ún. anholonom rendszerekkel.) rendszerek potenciális erők által meghatározott viselkedésének leírására alkalmazhatóak a Hamilton-egyenletek, melyek a Legendre-transzformáción keresztül kaphatóak meg a másodfajú Lagrange-féle mozgásegyenletből (ld. pl. Arnold, 1985; Gantmacher, 1975). A Hamilton-egyenletek az ún. *kanonikus változók* szerint vannak megfogalmazva: ezek a változók a \mathbf{q} általános koordináták és a \mathbf{p} általános impulzusok, szemben a másodfajú Lagrange-egyenlet \mathbf{q} általános koordinátaival és $\dot{\mathbf{q}}$ koordinátasebességeivel. A Hamilton-féle mozgásegyenletek így

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}, \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}\end{aligned}\tag{7}$$

alakban írhatóak, ahol \mathcal{H} a rendszer egészét jellemző, $\mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ jellegű *Hamilton-függvény*. Ennek fontos tulajdonsága, hogy (kanonikus, azaz a \mathbf{q} és \mathbf{p} változók közötti kapcsolatot megőrző) koordináta-transzformációkra nézve invariáns, továbbá autonóm rendszerek esetén időben állandó. Autonóm, szkleronom (időfüggetlen kényszerezésű) rendszerek esetében pedig értéke megegyezik a rendszer összenergiájával, azaz a \mathcal{T} kinetikus és az \mathcal{U} potenciális energia összegével. Ezen és további tulajdonságok (pl. a hatás–szög-transzformáció lehetősége) a hamiltoni mechanikát igen hatásos eszközzé teszik komplex problémák elegáns megoldásához (Jacobi, 1842; Kolmogorov, 1954; Moser, 1962; Arnold, 1963).

A fenti (7) egyenletek alakja definíció szerint invariáns a kanonikus változótranszformációkra. Ezek az egyenletek megfogalmazhatóak a $\mathbf{z} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ fázistérvektor bevezetésével (blokk)mátrixos alakban is:

$$\begin{pmatrix} \dot{\mathbf{q}} \\ \dot{\mathbf{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial \mathcal{H} / \partial \mathbf{q} \\ \partial \mathcal{H} / \partial \mathbf{p} \end{pmatrix},\tag{8}$$

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathcal{J} \nabla \mathcal{H}(\mathbf{z}),\tag{9}$$

(ahol \mathbf{I} az $n \times n$ -es egységmátrix), mely egyenletek segítségével juthatunk el a hamiltoni fázistér szimplektikus szerkezetének megfogalmazásához.

A hamiltoni egyenletekkel leírható dinamikai rendszerek φ_t folyamának egy jellegzetes, definiáló tulajdonsága az ún. *szimplektikusság*, mely az időfejlődésre invariáns. [Ez differenciálgeometriai szempontból azt jelenti, hogy \mathcal{J} inverze egy nemelfajuló, zárt 2-formát definiál a fázistérsokaságon, melyet a folyam felvisz a megoldások sokaságára (Arnold, 1985; Lee, 2012; Morrison, 2017).] Ennek egy szemléletes következménye a Liouville-tétel: a fázistér egy tetszőleges tartománya állandó térfogatú marad a hamiltoni időfejlődés mellett.

A szimplektikusság azonban ennél erősebb tulajdonság: nemcsak a $2n$ -dimenziós fázistértérfogatok, hanem minden páros dimenziós, fázistérterület jellegű mennyiség (a szimplektikus 2-forma minden külső hatványa) állandó az időfejlődés során (Morrison, 2017).

A szimplektikusság szükséges és elégséges feltétele ennek megfelelően a

$$\left(\frac{\partial\varphi_t}{\partial\mathbf{z}}\right)^T \mathcal{J}^{-1} \left(\frac{\partial\varphi_t}{\partial\mathbf{z}}\right) = \mathcal{J}^{-1} \quad (10)$$

egyenlőség teljesülése.

Ehhez hasonlóan, a szimplektikus tulajdonság értelmezhető a folytonos idejű φ_t folyam mellett a diszkrét idejű numerikus módszerek $\Phi_{\Delta t}$ leképezésére is, mely differenciálgeometriai fogalmak nélkül is megadható: $\Phi_{\Delta t}$ egy szimplektikus sémát ad meg (Hairer et al., 2006), ha teljesül a

$$\left(\frac{\partial\Phi_{\Delta t}}{\partial\mathbf{z}}\right)^T \mathcal{J}^{-1} \left(\frac{\partial\Phi_{\Delta t}}{\partial\mathbf{z}}\right) = \mathcal{J}^{-1} \quad (11)$$

egyenlőség, azaz a leképezés megőrzi \mathcal{J}^{-1} -et. Ez értelmezhető a \mathcal{J}^{-1} által reprezentált teljes hamiltoni szerkezet ilyen szempontból való megőrzéseként is.

A szimplektikus szerkezet megőrzése kulcsfontosságúnak bizonyul a hamiltoni rendszerek kvalitatíve helyes numerikus szimulációjához, ami abból fakad, hogy a Hamilton-egyenletek összes tulajdonsága (pl. magára hagyott rendszer esetében a Hamilton-függvény, ill. az összenergia állandósága, megfelelő esetekben a zárt trajektóriák létezése) a fázistér szimplektikus szerkezetének eredménye. Ha ezt a szerkezetet nem tiszteli a felhasznált numerikus módszer, elveszítjük ezeket a fontos, globális dinamikai tulajdonságokat. Sajnos, nem bizonyul szimplektikusnak hamiltoni rendszerekre alkalmazva a hagyományosan alkalmazott numerikus sémák többsége, pl. az explicit és implicit Euler-módszer, a negyedrendű Runge–Kutta- (RK4-) módszer és egy-egy speciális esettől eltekintve a végeeselemes dinamikai megoldásokhoz általában használt Newmark-módszer és HHT- α -módszer sem. Fontos kivétel azonban a Newmark- és HHT- α -módszerek imént említett speciális esete, a lineáris dinamikai problémáknál használt ún. centrális differencia séma, amely gerjesztetlen esetben ekvivalens a szimplektikus Störmer–Verlet-sémával (Simo et al., 1992; Klapproth et al., 2010).

Léteznek azonban további, a gépészmérnöki gyakorlatban kevésbé elterjedt numerikus sémák, melyek szimplektikusak tetszőleges nemlineáris hamiltoni rendszerre is. A legegyszerűbb ilyen a *szimplektikus Euler-séma*, melynek két változata létezik (ezek egymás adjungáltjai (A $\Phi_{\Delta t}^*$ numerikus séma a $\Phi_{\Delta t}$ adjungáltja, ha $\Phi_{\Delta t}^* = \Phi_{-\Delta t}^{-1}$. Az önadjungált sémákat szimmetrikusnak is nevezik.), hasonlóan az explicit és implicit Euler-módszerekhez) (de Vogelaere, 1956; Hairer et al., 2006):

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^{j+1} &= \mathbf{p}^j - \Delta t \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{q}}(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}^{j+1}), \\ \mathbf{q}^{j+1} &= \mathbf{q}^j + \Delta t \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{p}}(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}^{j+1}), \end{aligned} \quad (A) \quad (12)$$

és

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^{j+1} &= \mathbf{q}^j + \Delta t \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{p}}(\mathbf{q}^{j+1}, \mathbf{p}^j), \\ \mathbf{p}^{j+1} &= \mathbf{p}^j - \Delta t \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{q}}(\mathbf{q}^{j+1}, \mathbf{p}^j). \end{aligned} \quad (B) \quad (13)$$

Vegyük észre, hogy ezek a módszerek alig különböznek a klasszikus Euler-sémáktól. Pl. a (7) szerinti hamiltoni mechanika esetén az (5) egyenlettel fentebb definiált explicit Euler-módszer a

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^{j+1} &= \mathbf{q}^j + \Delta t \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}^j), \\ \mathbf{p}^{j+1} &= \mathbf{p}^j - \Delta t \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}^j),\end{aligned}\tag{14}$$

alakot ölti, melytől (12) és (13) csak abban különbözik formailag, hogy a szimplektikus sémák felhasználják valamelyik (\mathbf{q} , ill. \mathbf{p}) irányban a már kiszámított lépés eredményeit. [Ezt a stratégiát angolul „successive displacement”-nek is nevezik, mely hasonló a Gauss–Seidel-módszerhez, és néhány más rendszerre is jó eredményt hozhat (Saleh et al., 2020).] Ha mindkét irányban ezt tennénk, akkor az implicit Euler-módszert kapnánk, ami azonban meglepő módon már ismét nem szimplektikus.

A fenti sémák elsőrendű konvergenciát biztosítanak az időlépés csökkentésével. Ezekkel szemben másodrendű (ráadásul szimmetrikus) a már fentebb említett Störmer–Verlet-séma (Ezt a sémát különféle területeken egymástól függetlenül, más-más ekvivalens megfogalmazásban többször is felfedezték, így számos más néven ismert: pl. Encke-módszer, leapfrog (bakugrás-) módszer, GBS-módszer, másodrendű Nyström-módszer. Egy speciális esetét már maga Newton is felfedezte és használta (Newton, 1687).), melynek szintén két változata létezik (Hairer et al., 2003):

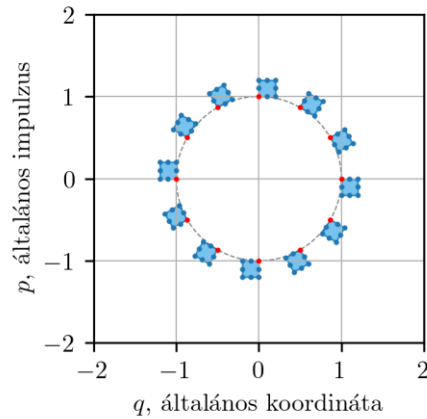
$$\begin{aligned}\mathbf{p}^{j+1/2} &= \mathbf{p}^j - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}^{j+1/2}), \\ \mathbf{q}^{j+1} &= \mathbf{q}^j + \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}^{j+1/2}) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{q}^{j+1}, \mathbf{p}^{j+1/2}) \right], \\ \mathbf{p}^{j+1} &= \mathbf{p}^{j+1/2} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^{j+1}, \mathbf{p}^{j+1/2}),\end{aligned}\tag{15}$$

és

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^{j+1/2} &= \mathbf{q}^j + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{q}^{j+1/2}, \mathbf{p}^j), \\ \mathbf{p}^{j+1} &= \mathbf{p}^j - \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^{j+1/2}, \mathbf{p}^j) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^{j+1/2}, \mathbf{p}^{j+1}) \right], \\ \mathbf{q}^{j+1} &= \mathbf{q}^{j+1/2} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{q}^{j+1/2}, \mathbf{p}^{j+1}).\end{aligned}\tag{16}$$

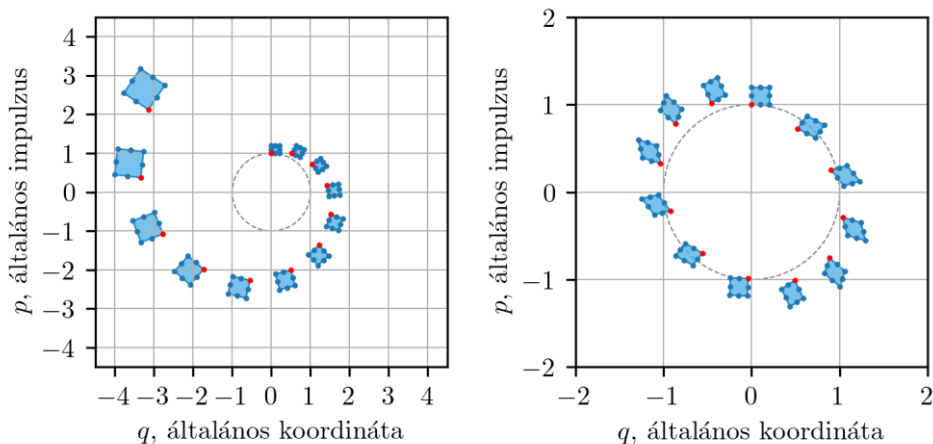
A (12)–(13) és (15)–(16) sémák ugyan általános Hamilton-függvény esetén implicit módszerek, azonban szétválasztható $\mathcal{H} = \mathcal{T}(\mathbf{p}) + \mathcal{U}(\mathbf{q})$ esetén, bizonyos további, nem túl szigorú feltételek teljesülése esetén explicitté tehetőek, így a legtöbb gyakorlati esetben explicit módszerként tekinthetünk rájuk. (Hairer et al., 2006)

Az egy szabadsági fokú (így kétdimenziós fázissterű) csillapítatlan harmonikus oszcillátor példáján jól szemléltethető geometriailag [(Denker, 2012) ötlete nyomán] a szimplektikus és nem szimplektikus numerikus módszerek közötti különbség.



3. ábra. Harmonikus oszcillátor egy fázistértartományának időfejlődése az egzakt megoldásban

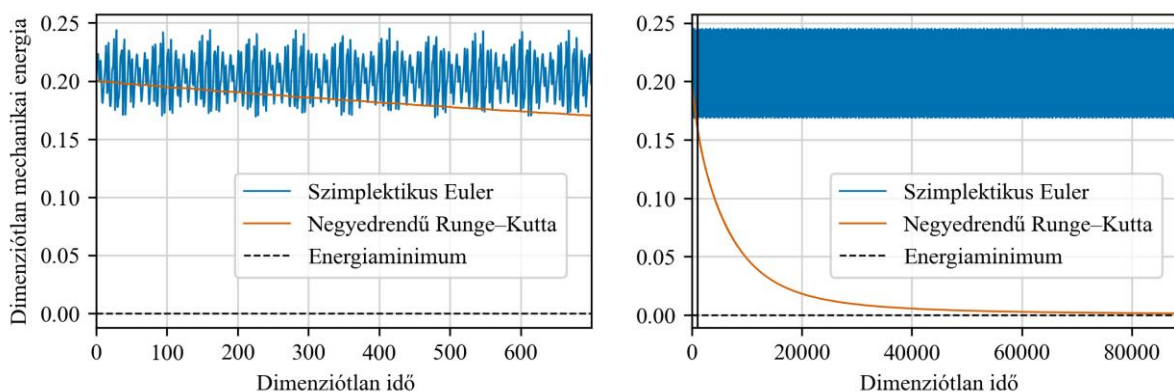
A 3–4. ábrákon látható, hogy az egymáshoz közeli kezdeti feltételekből indított numerikus szimulációk által bejárt trajektóriák az explicit Euler-módszer esetén nem őrzik meg a fázistértartomány kezdeti területét, míg a szimplektikus esetben (bizonyos mértékű torzulás ellenére) igen. Érdekes megfigyelni azt is, hogy a szimplektikus módszer az egzakt megoldásnak megfelelően zárt trajektóriát is ad, így a numerikus trajektória torzulása ellenére is kvalitatíve helyesebb eredményt nyújt a nem szimplektikus módszerrel szemben.



4. ábra. Az explicit Euler-séma nem őrzi meg a fázistértartomány térfogatát, és zárt trajektória helyett nyíltat jósol (bal), míg a szimplektikus Euler-séma megőrzi a fázistértartomány térfogatát, és zárt trajektóriát jósol (jobb)

A zárt trajektória megőrzésével összefügg, hogy a szimplektikus módszerek energiaőrzés szempontjából is sokkal jobb viselkedést mutatnak: az 1. ábrán mutatott szimulációt szimplektikus Euler-sémával elvégezve (5. ábra) láthatjuk, hogy bár az összenergia nem marad pontosan állandó, azonban az egzakt érték körül oszcillál, és nem lép fel numerikus disszipáció. Pedig ez az összehasonlítás ráadásul az RK4-

sémának kedvez a szimplektikussal szemben, hiszen az előbbi negyedrendű, míg az utóbbi csak elsőrendű. Így ez a példa azt is érzékelteti, hogy egy szerkezetörző séma azonos időlépés mellett, kisebb erőforrás-felhasználás mellett is képes jobban teljesíteni, hosszú távon.

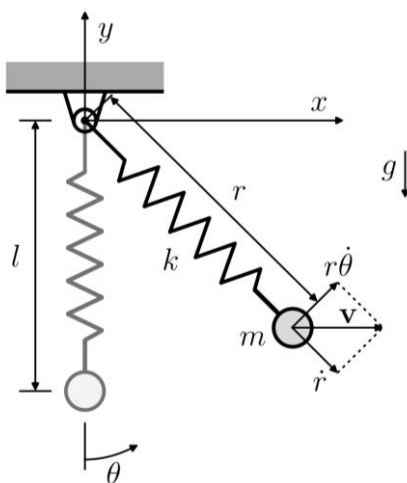


5. ábra. Rugós síkinga (ld. 4. szakasz) szimulációja negyedrendű Runge–Kutta-, ill. szimplektikus Euler-módszerrel, $\Delta t = 0,7$ időlépés mellett

A szimplektikus sémák elsöre meglepő hatékonyságát és sajátosságait jobban megérthetjük a következők fényében. Belátható ugyanis az inverzhiba-elemzés eszközeivel, hogy egy szimplektikus numerikus séma valójában egy, az eredetitől kissé különböző, torzult hamiltoni rendszer *egzakt* integrátora. Azaz míg az eredeti rendszert egy \mathcal{H} Hamilton-függvény írja le, addig a numerikus séma mögött egy másik, $\tilde{\mathcal{H}}$ torzult Hamilton-függvény húzódik meg, mely által meghatározott időfejlődést egzaktul követi a numerikus léptetés (Reich, 1999; Benettin és Giorgilli, 1994). (Természetesen a \mathcal{H} és $\tilde{\mathcal{H}}$ közötti különbség az időlépés csökkentésével egyre kisebbé válik, és a végtelenül kicsi időlépés határértékében a két függvény megegyezik.) Így az is érthető, hogy miért oszcillál a fenti példában az összenergia az egzakt érték körül: a torzult Hamilton-függvény egy, az egzakt megoldással azonos kezdőpontú, ahhoz közel maradó, de eltérő alakú trajektóriát jelöl ki a fázistérben.

4. Esettanulmány: rugós síkinga

A fenti matematikai eszköztár alkalmazásának illusztrálásához egy olyan konzervatív, nemlineáris mechanikai rendszert választottunk, melynek összetett viselkedése megfelelő terepet biztosít a különböző numerikus módszerek mélyebb összehasonlításához. Ez a rendszer a rugós síkinga, azaz egy, az egyik végén rögzített rugón függő tömegpont síkbeli mozgása. Ez a mechanikai modell használatos többek között pl. lengő távvezetékek rezgéseinek vizsgálatánál (Farzaneh, 2008; Kollár, 2022), rotordinamikai modellekben (Mahé et al., 2022), hajók mozgásának modellezésére (Nayfeh et al., 1973; Lee, 1992; Lee és Park, 1997), és az emberi járás modellezésére (Obusek et al., 1995) is. A rendszer viselkedése kaotikus, így a kvalitatívan helyes numerikus szimuláció kiemelt fontosságú. Szabad (gerjesztetlen) lengés esetén a rendszer autonóm, így leírható egy időfüggetlen Hamilton-függvénnyel.



6. ábra. Rugós sicinga mechanikai modellje

A 6. ábra mutatja a vizsgált rendszer modelljét és koordinátázását. A rugó nyújtatlan hossza l , merevsége k , melynek végére m nagyságú tömeg van rögzítve. Polárkoordináta-rendszerben a Lagrange-függvény így írható:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(r, \theta, \dot{r}, \dot{\theta}) &= \mathcal{T}(r, \dot{r}, \dot{\theta}) - \mathcal{U}(r, \theta) = \\ &= \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) - \frac{1}{2} k (r - l)^2 + mgr \cos(\theta), \end{aligned} \quad (17)$$

melynek segítségével a hamiltoni formalizmushoz szükséges általános impulzusok

$$p_r = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \quad (18)$$

$$p_\theta = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = mr^2 \dot{\theta} \quad (19)$$

módon adódnak. A Hamilton-függvény így

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(r, \theta, p_r, p_\theta) &= \mathcal{T}(p_r, p_\theta, r) + \mathcal{U}(r, \theta) = \\ &= \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} \right) + \frac{1}{2} k (r - l)^2 - mgr \cos(\theta) \end{aligned} \quad (20)$$

lesz. Hasonló lépéseket elvégezve Descartes-koordinátarendszerben a kanonikus impulzusok

$$p_x = m\dot{x}, \quad (21)$$

$$p_y = m\dot{y} \quad (22)$$

lesznek, a Hamilton-függvény pedig

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(x, y, p_x, p_y) &= \mathcal{T}(p_x, p_y) + \mathcal{U}(x, y) \\ &= \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}k(\sqrt{x^2 + y^2} - l)^2 - mgy\end{aligned}\quad (23)$$

alakban írható.

A továbbiakban elsősorban a polárkoordinátás formalizmust követjük majd, mivel ott a mozgási és potenciális energiák általános koordináta- ill. impulzusfüggése nem válik szét teljesen, így tanulságosabb példának bizonyul.

A Hamilton-egyenletekből adódó mozgásegyenletek így:

$$\begin{aligned}\dot{r} &= \frac{p_r}{m}, \\ \dot{\theta} &= \frac{p_\theta}{mr^2}, \\ \dot{p}_r &= \frac{p_\theta^2}{mr^3} - k(r - l) + mg\cos(\theta), \\ \dot{p}_\theta &= -mgr\sin(\theta).\end{aligned}\quad (24)$$

A numerikus példákban az ilyenkor megszokott módon ezek dimenziótlan alakját vizsgáljuk. Vezessük be a következő tömeg-, hosszúság- és időegységeket:

$$m_u := m, \quad l_u := l, \quad t_u := \sqrt{\frac{m}{k}}\quad (25)$$

melyekkel a dimenziótlan mozgásegyenletek alakja a fenti (24) alapján:

$$\begin{aligned}\hat{r} &= \hat{p}_r, \\ \dot{\theta} &= \frac{\hat{p}_\theta}{\hat{r}^2}, \\ \dot{\hat{p}}_r &= \frac{\hat{p}_\theta^2}{\hat{r}^3} - (\hat{r} - 1) + \hat{g}\cos(\theta), \\ \dot{\hat{p}}_\theta &= -\hat{g}\hat{r}\sin(\theta),\end{aligned}\quad (26)$$

ahol a \hat{g} dimenziótlan nehézségi gyorsulás, azaz

$$\hat{g} = g \frac{t_u^2}{l_u} = \frac{gm}{kl}\quad (27)$$

maradt a modell egyetlen független paramétere. Hasonlóan járhatunk el a Descartes-koordinátarendszerben való felírás esetén is, ahol a koordinátázás miatt \mathcal{U} csak az általános koordinátáktól, \mathcal{T} pedig csak az általános impulzusoktól függ.

4.1. Numerikus sémák alkalmazása

A (12), ill. (13) sémákat alkalmazva a (26) mozgásegyenletre az alábbi, (28) léptetés adódik a szimplektikus Euler-séma A, ill. a (29) a B változatára. A Hamilton-függvény megfelel a korábban említett feltételeknek, így mindkét séma explicitté tehető.

Szimplektikus Euler A:

$$\begin{aligned}
 \hat{p}_\theta^{j+1} &= \hat{p}_\theta^j - \Delta t \hat{g} \hat{r}^j \sin(\theta^j), \\
 \hat{p}_r^{j+1} &= \hat{p}_r^j - \Delta t \left[-\frac{(\hat{p}_\theta^{j+1})^2}{m(\hat{r}^j)^2} + (\hat{r}^j - 1)^2 - \hat{g} \cos(\theta^j) \right], \\
 \hat{r}^{j+1} &= \hat{r}^j + \Delta t \hat{p}_r^{j+1}, \\
 \theta^{j+1} &= \theta^j + \Delta t \frac{\hat{p}_\theta^{j+1}}{(\hat{r}^j)^2}.
 \end{aligned} \tag{28}$$

Szimplektikus Euler B:

$$\begin{aligned}
 \hat{r}^{j+1} &= \hat{r}^j + \Delta t \hat{p}_r^j, \\
 \theta^{j+1} &= \theta^j + \Delta t \frac{\hat{p}_\theta^j}{(\hat{r}^{j+1})^2}, \\
 \hat{p}_\theta^{j+1} &= \hat{p}_\theta^j - \Delta t \hat{g} \hat{r}^{j+1} \sin(\theta^{j+1}), \\
 \hat{p}_r^{j+1} &= \hat{p}_r^j - \Delta t \left[-\frac{(\hat{p}_\theta^j)^2}{m(\hat{r}^{j+1})^2} + (\hat{r}^{j+1} - 1)^2 - \hat{g} \cos(\theta^{j+1}) \right].
 \end{aligned} \tag{29}$$

Ezekkel szemben a (14) explicit Euler-séma a (30) egyenletek szerint alakul. Látható, hogy az egyetlen különbség a nemszimplektikus és a szimplektikus Euler-módszerek között az, hogy a szimplektikus változatok az adott időlépésen belül a valamelyik kanonikus koordinátára már kiszámított eredményt felhasználják az utána következő mennyiségek számításához. Így nincs szükség semmilyen többletszámítási erőforrásra a hagyományos Euler-módszerhez képest, mely csak az előző időlépésben vett értékekből dolgozik: a különbséget a részlépések jobb elrendezése adja.

$$\begin{aligned}
 \hat{r}^{j+1} &= \hat{r}^j + \Delta t \hat{p}_r^j \\
 \theta^{j+1} &= \theta^j + \Delta t \frac{\hat{p}_\theta^j}{(\hat{r}^j)^2} \\
 \hat{p}_\theta^{j+1} &= \hat{p}_\theta^j - \Delta t \hat{g} \hat{r}^j \sin(\theta^j) \\
 \hat{p}_r^{j+1} &= \hat{p}_r^j - \Delta t \left[-\frac{(\hat{p}_\theta^j)^2}{m(\hat{r}^j)^2} + (\hat{r}^j - 1)^2 - \hat{g} \cos(\theta^j) \right].
 \end{aligned} \tag{30}$$

Hasonlóan, a (15) séma (24) mozgásegyenletekre való alkalmazásával kaphatjuk meg a rendszernek a Störmer–Verlet A módszerrel való léptetését. Ezt a továbbiakban következő összehasonlítások során szintén használni fogjuk, mindazonáltal a léptetés részletes közlésétől a rövidség kedvéért eltekintünk. Lényeges megállapítás azonban, hogy a szimplektikus módszerhez hasonlóan a Störmer–Verlet-séma mindkét változata is explicit, ill. explicitté tehető Descartes- ill. polárkoordináta-rendszerben.

4.2. Eredmények

A következőkben a fenti rendszerre néhány hagyományos, ill. szimplektikus sémával kapott szimulációs eredményt mutatunk be, melyeken jól megfigyelhetők az egyes módszerek sajátosságai.

Korábban, az 1. és 5. ábrán már bemutattuk, hogy a szimplektikus Euler-módszer hogyan teljesít energiaőrzés szempontjából az RK4-módszerrel szemben, azonos (viszonylag nagy, $\Delta t = 0,7$) időlépés mellett. Ebben az esetben az elsőrendű szimplektikus Euler-módszer könnyedén felvette a versenyt a jelentősen nagyobb (legalább négyszeres) számítási igényű negyedrendű Runge–Kutta-módszerrel szemben, és a kvantitatív pontatlanság ellenére kvalitatíve jobb teljesítményt nyújtott.

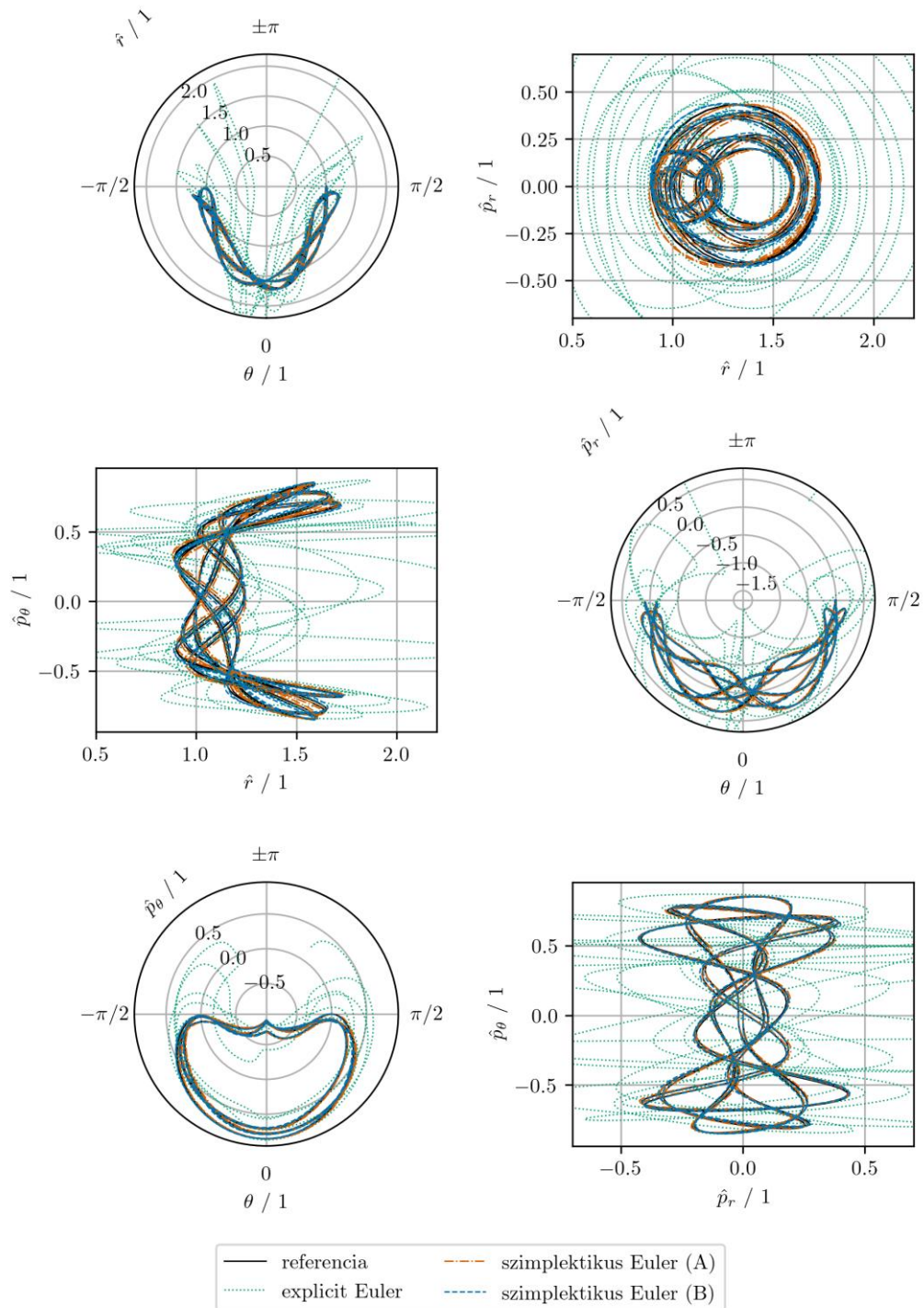
4.2.1. Explicit Euler vs. szimplektikus Euler

A kiegyensúlyozottabb összehasonlítás érdekében először csupa elsőrendű módszert fogunk vizsgálni, az explicit, ill. szimplektikus Euler-módszereket.

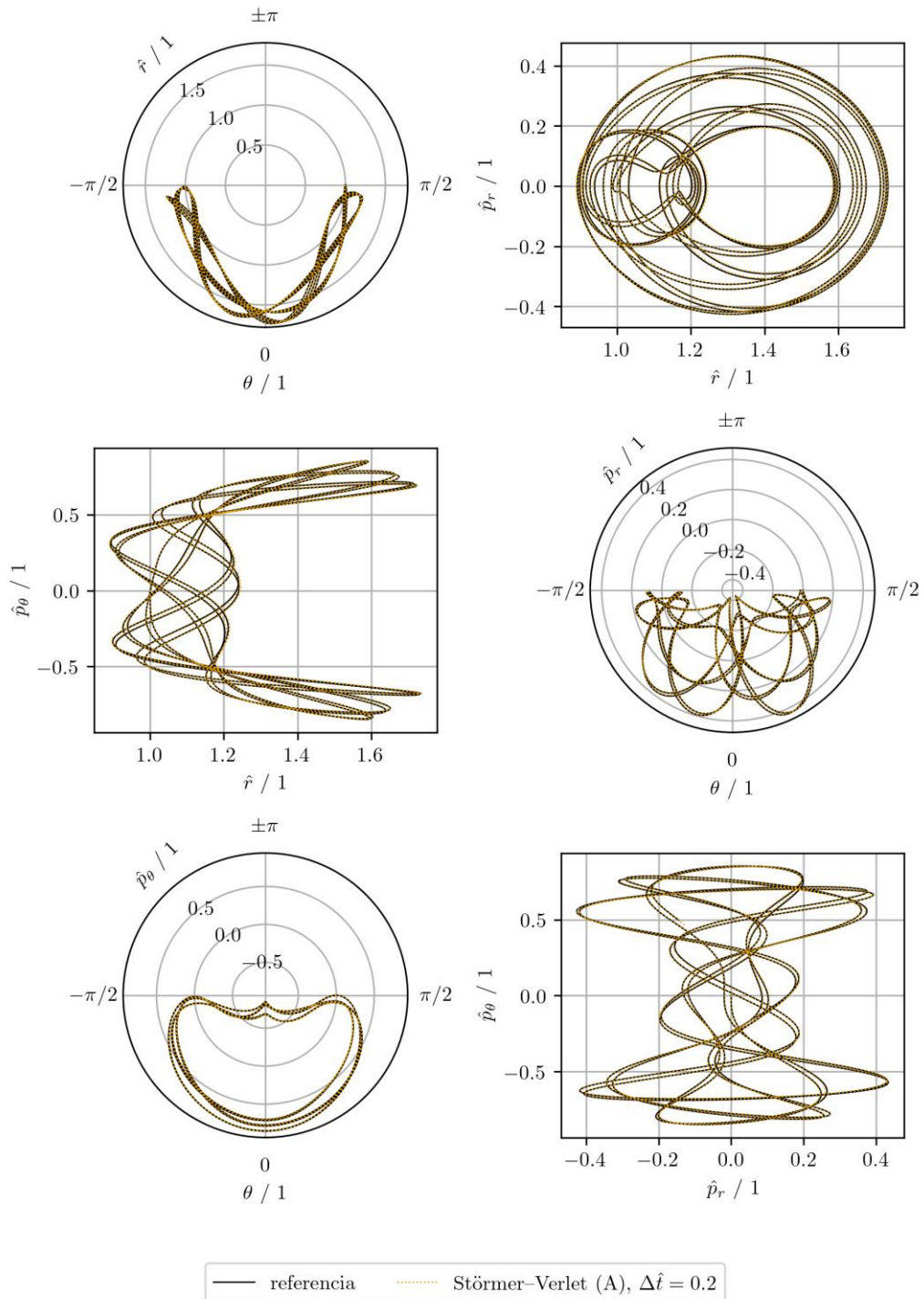
A következő futtatások során a szimplektikus esetekben $\Delta t = 0,2$ méretű időlépést használtunk. Noha ezzel a rugó rezgésének egy periódusát több mint harminc részre osztjuk, ekkora időlépésnél az explicit Euler-módszer gyorsan instabillá válik, így erre a sémára tizedakkora, $\Delta t = 0,02$ nagyságú időlépést alkalmaztunk. A kaotikus mozgás érzékeltetése érdekében $\hat{g} = 0,2$ értéket állítottunk be. A szimuláció időtartama minden esetben $\hat{t}_{\max} = 120$ volt. A kezdeti feltételek szerint a rugó nyújtatlan, a kezdeti sebesség zérus, a kiinduló helyzet egy $+\pi/2$ -es kitérítés, azaz vízszintes állapotból, (20) szerint zérus összenergiával indul az inga.

A 7. ábra mutatja a (28), (29) és (30) sémák használatával kapott numerikus eredmények trajektóriájának vetületeit a négydimenziós fázistér megfelelő kétdimenziós altereire. (További összehasonlítási alapként egy RK4-sémával, $\Delta t = 0,002$ időlépés mellett kapott eredményt is ábrázoltunk, mely erre az időtartamra közel egzakt megoldásnak tekinthető.) Jól látható, hogy a szimplektikus sémák végig közel járnak az egzakt megoldáshoz, a trajektóriák pedig jellegre is helyesek. Ezzel szemben a hagyományos explicit Euler-séma mind kvantitatív, mind kvalitatív szempontból hibás eredményt ad – tizedakkora időlépés mellett is. A trajektóriák elhagyják az egzakt megoldás környezetét, egyre növekvő energiával mozog a szimulált rendszer annak ellenére, hogy mechanikailag teljesen zárt. Így jól érzékelteti ez a példa, hogy miért ritka az explicit Euler-séma használata a gyakorlatban: olyan kicsi időlépés szükséges a megbízható használatához összetettebb problémák esetében, amely túl nagy erőforrásokat igényelne. Ugyanakkor az explicit Euler kis módosításaként is felfogható szimplektikus Euler-séma nagyobb időlépések mellett is figyelemre méltóan megbízható eredményt ad ebben az esetben, így számítási teljesítmény szempontjából jóval takarékosabb.

Érdeemes a 7. ábrán azt is megfigyelni, hogy a szimplektikus sémákkal kapott eredmények egzaktól való eltérése szisztematikus. Látható ugyanis (ez talán a $\hat{r} - \hat{p}_\theta$ grafikonon érhető tetten leginkább), hogy a kétféle szimplektikus Euler által nyújtott megoldás végig közrefogja az egzakt megoldást: hibájuk a fázistérben nézve ellentétes irányú, torzulásuk bizonyos értelemben tükörképe egymásnak. Ez a módszer általános jellemzője, mely összefügg azzal, hogy a szimplektikus Euler-módszer A és B változata egymás adjungáltjai. Ennek nyomán felmerülhet az ötlet, hogy a két változat kombinálásával egy pontosabb sémát kaphatunk. Valóban, a kétféle séma feles időlépéssel egymás után való alkalmazása éppen a Störmer–Verler-sémát adja – hogy melyik változatát, azt az dönti el, hogy AB vagy BA sorrendben alkalmaztuk a szimplektikus Euler által meghatározott részlépéseket. Ahogyan azt a következő szakaszban látni is fogjuk, ez egy jobb pontosságú, másodrendű séma, melynek ára azonban a megnövekedett számítási erőforrásigény.



7. ábra. Szimplektikus ill. explicit Euler numerikus séma alkalmazásával kapott trajektóriák vetületei



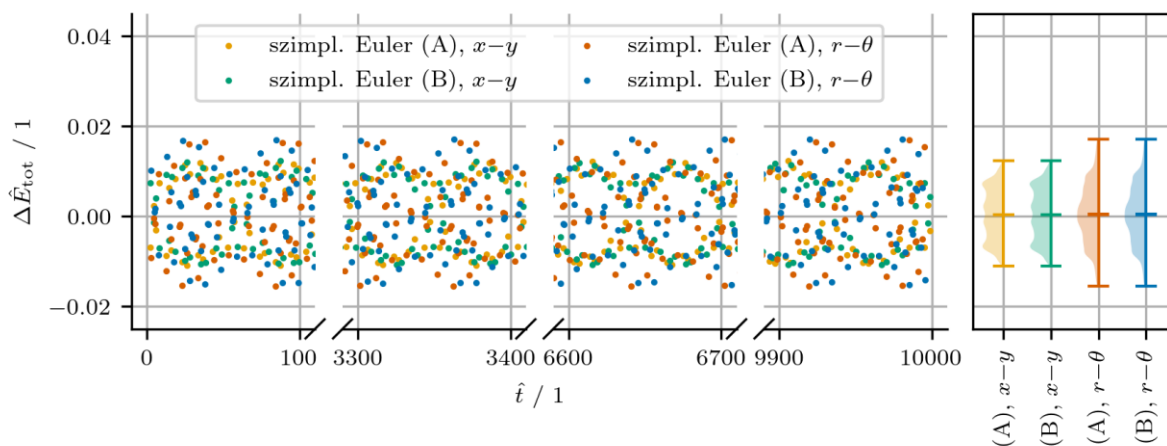
8. ábra. Störmer-Verlet numerikus séma alkalmazásával kapott trajektória vetületei

4.2.2. Störmer–Verler-séma

A 8. ábrán látható a Störmer–Verler-módszerrel, $\Delta\hat{t} = 0,2$ méretű időlépés mellett kapott eredmények összehasonlítása a referenciamegoldással. Látható, hogy a várakozásoknak megfelelően ez a módszer jelentősen jobban teljesít a szimplektikus Euler sémáknál, nem lép fel torzulás a trajektóriában egyik irányban sem. Ez összefügg azzal, hogy a Störmer–Verler-módszer (mindkét változata) önadjungált, azaz szimmetrikus. Ennek további következménye, hogy a séma másodrendű, ugyanis belátható, hogy szimmetrikus sémák konvergenciarendje mindig páros (Hairer et al., 2006). Ezen tulajdonságok és a szimplektikusság következménye, hogy már másodrendű módszer létre is közel egzakt eredményt ad ez a séma: a 8. ábrán a referenciamegoldástól való eltérés elenyésző. Így ismét kifizetődőnek bizonyult a szimplektikus szerkezet megőrzése, hiszen egy másodrendű séma használatához kevesebb számításra van szükség, mint a referenciához használt negyedrendű séma alkalmazásához.

4.3. Koordináta-rendszer hatása a végeredményre

Ahogy azt már korábban megmutattuk, a fázistérbeli trajektóriák mellett egy másik lehetőség a különböző sémák összehasonlítására az összehasonlításra az összehasonlítás az idő függvényében. Azt is megállapítottuk, hogy a vizsgált rendszerünk tulajdonságai (holonom, szkleronom) miatt a rendszer összehasonlítására az összehasonlítás az idő függvényében. Azt is megállapítottuk, hogy a vizsgált rendszerünk tulajdonságai (holonom, szkleronom) miatt a rendszer összehasonlítására az összehasonlítás az idő függvényében. Azt is megállapítottuk, hogy a vizsgált rendszerünk tulajdonságai (holonom, szkleronom) miatt a rendszer összehasonlítására az összehasonlítás az idő függvényében.



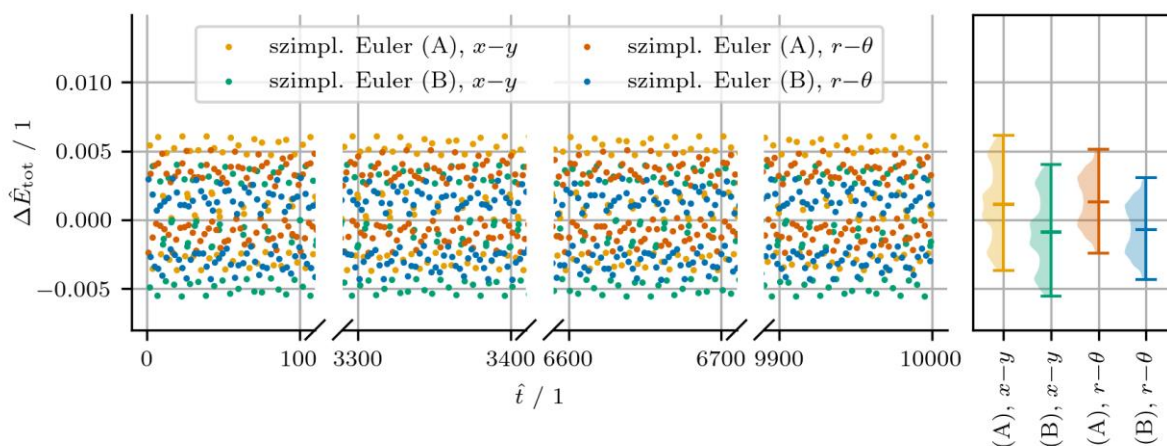
9. ábra. Az összehasonlítás hibája a szimplektikus Euler-módszer egyes változataiban, különböző koordinátázású léptetés mellett

Mivel tudjuk, hogy a szimplektikus sémákhoz is tartozik egy mögöttes, torzult Hamilton-függvény, joggal várhatnánk, hogy a szimplektikus rendszerek energiaőrzése is független a koordináta-rendszer választásától. Meglepő módon azonban nem ez a helyzet: különböző koordinátázások mellett végzett számítások esetén más lesz ugyanazon sémák hibája az energiára nézve.

A 9. ábrán látható négy, $\hat{t}_{\max} = 10000$ időtartamra, $\hat{g} = 0,2$ paraméterrel és $\Delta\hat{t} = 0,2$ időlépés mellett végzett számítás eredményéből számított összehasonlítás hibájának időbeli lefutása, ill. ezen értékekből készített statisztika. Mind a négy esetben a szimplektikus Euler-sémát alkalmaztuk, két esetben a (20) szerinti poláris, két esetben pedig a (23) szerinti Descartes-koordinátázás mellett. Jól megfigyelhető,

hogy ebben az esetben a Descartes-koordinátákban való léptetés jobban teljesít: az összenergia maximális eltérése az A és B változatokban is alatta marad a megfelelő polárkoordinátás változatokénál.

A polárkoordinátákban való számítás hátrányosabb viselkedése azonban nem általános: eltérő paraméterekkel és kezdeti feltételekkel indulva előállhat olyan eset ugyanebben a modellben, amikor a Descartes-koordinátázás teljesít rosszabbul. Ezt a 10. ábra szemlélteti, melyeken ábrázolt szimulációs eredmények $\hat{g} = 0,02$ paraméterrel és $\hat{p}_\theta(0) = -0,5$ kezdeti feltétellel adódtak. Jól látható, hogy ebben az esetben a polárkoordinátás számítások hibája összességében kisebb. Ezek alapján nem adható általános ajánlás a koordináta-rendszer választásához; ezzel együtt lényeges észben tartani, hogy ez a jelenség befolyásolhatja a megoldás pontosságát a digitális számábrázolási hibán túl is.



10. ábra. Az összenergia hibája a szimplektikus Euler-módszer egyes változataiban, különböző koordinátázású léptetés mellett, más kezdeti feltételekkel és paraméterrel

5. Összefoglalás, kitekintés

A fentiekben a szükséges fogalmak bevezetése után áttekintettünk két szimplektikus numerikus módszert, a szimplektikus Euler és Störmer–Verler-sémát. Mivel a szimplektikus módszerek hamiltoni mechanikára építenek, ezért ezek a sémák általánosan holonom, potenciális erőterben mozgó autonóm rendszerekre alkalmazhatóak. Láttuk, hogy megfelelően szétválasztható Hamilton-függvény esetében ezek a sémák explicitté tehetőek, mely feltétel a legtöbb, gyakorlatban előforduló mechanikai rendszer esetében teljesül. Megmutattuk, hogy a szimplektikus Euler-módszer – mely elsőrendű – torzítást vihet a trajektóriák fázistérbeli alakjába, azonban biztosítja a közelítő energiaőrzést és így a hosszú távon is kvalitatíve helyes eredményt; szemben az explicit Euler- vagy a negyedrendű Runge–Kutta-módszer által nyújtott kvalitatíve is helytelen eredménnyel. A másodrendű, szimmetrikus Störmer–Verler-módszer már a fázistérbeli torzítást is kiküszöböli. Végül a rugós síkinga modelljére kapott számítások eredményeinek segítségével azt is bemutattuk, hogy a számításokhoz használt koordináta-rendszer megválasztása is képes befolyásolni az energiaőrzés pontosságát.

A bemutatott szimplektikus sémákon túl természetesen számos további, akár magasabb rendű szimplektikus séma is létezik (Hairer et al., 2006; Geng, 1993; Jay, 1996; Takahashi és Imada, 1984; Forest és Ruth, 1990). Ezekkel igen megbízható, hosszú távon is helyes számítások végezhetőek, feltéve, hogy a szóban forgó rendszer leírható hamiltoniként. Bár ez sok esetben teljesül, mégis számos olyan rendszer fordul elő a gépészmérnöki gyakorlatban, mely nem fér bele a véges dimenziós (véges szabadsági fokú)

Hamilton-egyenletek által adott keretekbe: ilyenek például a csillapítást tartalmazó vagy egyéb disszipatív rendszerek, a más okból nem potenciális erőternek kitett rendszerek (súrlódás, kontaktproblémák stb.), az anholonom kényszerű rendszerek, és a parciális differenciálegyenletekkel leírható kontinuumok. A szerkezetörző numerikus módszerek fejlesztésében ezek ma is aktív kutatási területek: a felvett rendszertípusok valamelyikére való kiterjesztést valósítják meg pl. a variációs integrátorok (Morrison, 2017; Kane et al., 2019; Vermeeren et al., 2019), a Poisson-integrátorok (Channell és Scovel, 1991; McLachlan, 1993), a metriplektikus integrátorok (Kraus és Hírviyoki 2017), a szemidiszkrétizáción alapuló kvázi-szimplektikus sémák (Fülöp et al., 2020; Pozsár et al., 2020; Takács et al., 2024), és a kontakt (Ez a terminológia nem összekeverendő a kontakt-problémák megoldására használható numerikus sémákkal: a kontakt-integrátorok a páros dimenziószámú szimplektikus struktúrához hasonló, disszipatív rendszerekre jellemző páratlan dimenziószámú *kontakt struktúrát* (Arnold, 1985; Lee, 2012) használják ki.) integrátorok (Vermeeren et al., 2019; Wendlandt és Mardsen, 1997; Zadra et al., 2021). Szintén számos lehetőséget rejtenek az összenergián túl valamilyen más jellemző mennyiséget [pl. a perdületet, vagy a Runge–Lenz-vektort (Shadwick et al., 1998)] is megtartó, általánosabb értelemben szerkezetörző módszerek is. Az ilyen szerkezetörző módszerek egyes esetekben a torzult vektormező kompenzációján alapulnak, mely megfelelő rendszerekben csupán a fizikai paraméterek elhangolásán keresztül is megvalósítható (Takács és Fülöp, 2024).

Már néhány kereskedelmi forgalomban kapható műszaki szoftver is tartalmaz szimplektikus módszereket: a fentebb említett Newmark-sémát használja az ANSYS és az Abaqus végelelemes szoftver is (ANSYS, 2023; Abaqus, 2023), és általános szimplektikus numerikus DE-megoldót kínál a Wolfram Mathematica (Wolfram Research, 2023).

A szerkezetörző numerikus módszerek szélesebb elterjedése részben szemléletváltáshoz is kötődik. A hagyományos megközelítés ugyanis az adott problémából az eredeti mennyiségek zömét kiküszöbölve generál a meghagyott mennyiségekre egyenleteket, utána pedig ezeket átadja egy, valamely általános recept szerint működő numerikus megoldónak. Ebben a megközelítésben a numerikus megoldás tehát lecsatolódik az eredeti probléma tartalmi szerkezetéről.

Ezzel szemben, ha a numerikus módszerekre nem mint *egyenletmegoldókra*, hanem mint *modell-megoldókra* gondolunk, és többet fogalmazunk bele a rendszerből az egyenletekbe (a fent látott példánkban: átörökítve a dinamika hamiltoni voltát), akkor az ezeket is felhasználó numerikus megoldás hübben írhatja le a rendszer viselkedését. Az így felépített numerikus megoldások értékes előrelépést jelenthetnek a műszaki gyakorlatban: a hagyományos módszerekhez hasonlítva gyorsaságuk, kompaktságuk és költséghatékonyságuk miatt jelentős előnyhöz juttathatják azt a mérnököt, aki alkalmazásuk mellett dönt.

Irodalom

- [1] de Vogelaere, R. (1956). *Methods of integration which preserve the contact transformation property of the Hamilton equations*. Department of Mathematics, University of Notre Dame, Notre Dame, Indiana, USA.
- [2] Hairer, E., Lubich, C. Wanner, G. (2006). *Geometric numerical integration: Structure-preserving algorithms for ordinary differential equations*. 2 ed., Vol. 31, Berlin: Springer-Verlag, xviii, p. 644.
- [3] Reich, S. (1999). Backward error analysis for numerical integrators. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 36(5), 1549–1570, <https://doi.org/10.1137/S0036142997329797>

- [4] Hairer, E., Lubich, C. (2000). Asymptotic expansions and backward analysis for numerical integrators. In *Dynamics of Algorithms*, Springer, New York, pp. 91–106
https://doi.org/10.1007/978-1-4612-1274-4_5
- [5] Moan, P. C. (2006). On modified equations for discretizations of ODEs. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 39(19), p. 5545, <https://doi.org/10.1088/0305-4470/39/19/S13>
- [6] Arnold, V. I. (1985). *A mechanika matematikai módszerei*. Budapest, Műszaki Könyvkiadó.
- [7] Gantmacher, F. (1975). *Lectures in Analytical Mechanics*. Beekman Books, Incorporated.
- [8] Jacobi, C. G. J. (1884) *C. G. J. Jacobi's Vorlesungen über Dynamik gehalten an der Universität zu Königsberg im Wintersemester 1842-1843 und nach einem von C.W. Borchart ausgearbeiteten Hefte*. Berlin, G. Reimer, 1842–1843, <https://doi.org/10.5962/bhl.title.18726>
- [9] Kolmogorov, A. A. N. (1954). On conservation of conditionally periodic motions for a small change in Hamilton's function. *Proceedings of the USSR Academy of Sciences*, 98, pp. 527–530.
- [10] Moser, J. (1962). *On invariant Curves of area-preserving mappings of an annulus*. Göttingen, Vandenhoeck & Ruprecht.
- [11] Arnold, V. I. (1963). Proof of a theorem of A. N. Kolmogorov on the invariance of quasi-periodic motions under small perturbations of the Hamiltonian. *Russian Mathematical Surveys*, 18(5), pp. 9–36, <https://doi.org/10.1070/RM1963v018n05ABEH004130>
- [12] Lee, J. M. (2012). *Introduction to Smooth Manifolds*. Springer, New York.
<https://doi.org/10.1007/978-1-4419-9982-5>
- [13] Morrison, P. J. (2017). Structure and structure-preserving algorithms for plasma physics. *Physics of Plasmas*, 24(5), p. 055502, <https://doi.org/10.1063/1.4982054>
- [14] Simo, J. C., Tarnow, N., Wong, K. (1992). Exact energy-momentum conserving algorithms and symplectic schemes for nonlinear dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 100(1), pp. 63–116, [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(92\)90115-Z](https://doi.org/10.1016/0045-7825(92)90115-Z)
- [15] Klapproth, C., Schiela, A., Deuffhard, P. (2010). Consistency results on Newmark methods for dynamical contact problems. *Numerische Mathematik*, 116(1), pp. 65–94.
<https://doi.org/10.1007/s00211-010-0300-0>
- [16] Saleh, M., Nagy, Á., Kovács, E. (2020). Construction and investigation of new numerical algorithms for the heat equation, Part III. *Multidiszciplináris Tudományok*, 10(4), pp. 349–360.
<https://doi.org/10.35925/j.multi.2020.4.38>
- [17] Newton, I. (1687). *Philosophiae naturalis principia mathematica*. Vol. 1. Jussu Societas Regiæ ac typis Josephi Streater, prostant venales apud Sam. Smith.
<https://doi.org/10.5479/sil.52126.39088015628399>
- [18] Hairer, E., Lubich, C., Wanner, G. (2003). Geometric numerical integration illustrated by the Störmer–Verlet method. *Acta numerica*, 12, pp. 399–450.
<https://doi.org/10.1017/S0962492902000144>
- [19] Denker, J. (2012). *Basic properties of a symplectic integrator*. <https://www.av8n.com/physics/symplectic-integrator.htm>

- [20] Benettin, G., Giorgilli, A. (1994). On the Hamiltonian interpolation of near-to-the identity symplectic mappings with application to symplectic integration algorithms. *Journal of Statistical Physics*, 74, pp. 1117–1143, <https://doi.org/10.1007/BF02188219>
- [21] Farzaneh, M. (ed.) (2008). *Atmospheric Icing of Power Networks*. Springer Netherlands. <https://doi.org/10.1007/978-1-4020-8531-4>
- [22] Kollár, L. E. (2022). Ice-shedding-induced vibration of conductors with active vibration control. *Cold Regions Science and Technology*, 196, p. 103504. <https://doi.org/10.1016/j.coldregions.2022.103504>
- [23] Mahé, V., Renault, A., Grolet, A., Thomas, O., Mahe, H. (2022). Dynamic stability of centrifugal pendulum vibration absorbers allowing a rotational mobility. *Journal of Sound and Vibration*, 517, p. 116525, <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2021.116525>
- [24] Nayfeh, A. H., Mook, D. T., Marshall, L. R. (1973). Nonlinear coupling of pitch and roll modes in ship motions. *Journal of Hydronautics*, 7(4), pp. 145–152, <https://doi.org/10.2514/3.62949>
- [25] W. K. Lee, W. K. (1992). Domains of attraction of system of nonlinearly coupled ship motions by simple cell mapping. *Journal of Offshore Mechanics and Arctic Engineering*, 114(1), pp. 22–27. <https://doi.org/10.1115/1.2919948>
- [26] Lee, W. K., Park, H. D. (1997). Chaotic dynamics of a harmonically excited spring-pendulum system with internal resonance. *Nonlinear Dynamics*, 14, pp. 211–229. <https://doi.org/10.1023/A:1008256920441>
- [27] Obusek, J. P., Holt, K. G., Rosenstein, R. M. (1995). The hybrid mass-spring pendulum model of human leg swinging: stiffness in the control of cycle period. *Biological Cybernetics*, 73(2), pp. 139–147, <https://doi.org/10.1007/BF00204052>
- [28] Geng, S. (1993). Symplectic partitioned Runge–Kutta methods. *Journal of Computational Mathematics*, 11(4), pp. 365–372.
- [29] Jay, L. (1996). Symplectic partitioned Runge–Kutta methods for constrained Hamiltonian systems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 33(1), pp. 368–387. <https://doi.org/10.1137/0733019>
- [30] Takahashi, M., Imada, M. (1984). Monte Carlo calculation of quantum systems. II. Higher order correction. *Journal of the Physical Society of Japan*, 53(11), pp. 3765–3769. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.53.963>
- [31] Forest, E., Ruth, R. D. (1990). Fourth-order symplectic integration. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 43(1), pp. 105–117, [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(90\)90019-L](https://doi.org/10.1016/0167-2789(90)90019-L)
- [32] Kane, C., Marsden, J. E., Ortiz, M., West, M. (2000). Variational integrators and the Newmark algorithm for conservative and dissipative mechanical systems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 49(10), pp. 1295–1325. [https://doi.org/10.1002/1097-0207\(20001210\)49:10<1295::AID-NME993>3.0.CO;2-W](https://doi.org/10.1002/1097-0207(20001210)49:10<1295::AID-NME993>3.0.CO;2-W)
- [33] Vermeeren, M., Bravetti, A., Seri, M. (2019). Contact variational integrators. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 52(44), p. 445206, <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ab4767>

- [34] Channell, P., Scovel, J. (1991). Integrators for Lie-Poisson dynamical systems. *Physica D: Non-linear Phenomena*, 50(1), pp. 80–88, [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(91\)90081-J](https://doi.org/10.1016/0167-2789(91)90081-J)
- [35] McLachlan, R. I. (1993). Explicit Lie-Poisson integration and the Euler equations. *Physical review letters*, 71(19), p. 3043, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.3043>
- [36] Kraus, M., Hirvijoki, E. (2017). Metriplectic integrators for the Landau collision operator. *Physics of Plasmas*, 24(10), p. 102311, <https://doi.org/10.1063/1.4998610>
- [37] Fülöp, T., Kovács, R., Szücs, M., Fawaiier, M. (2020). Thermodynamical extension of a symplectic numerical scheme with half space and time shifts demonstrated on rheological waves in solids. *Entropy*, 22(2), p. 155, <https://doi.org/10.3390/e22020155>
- [38] Pozsár, Á., Szücs, M., Kovács, R., Fülöp, T. (2020). Four spacetime dimensional simulation of rheological waves in solids and the merits of thermodynamics. *Entropy*, 22(12), p. 1376. <https://doi.org/10.3390/e22121376>
- [39] Takács, D. M., Pozsár, Á., Fülöp, T. (2024). Thermodynamically extended symplectic numerical simulation of viscoelastic, thermal expansion and heat conduction phenomena in solids. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 36, pp. 525–538. <https://doi.org/10.1007/s00161-024-01280-w>
- [40] Wendlandt, J. M., Marsden, J. E. (1997). Mechanical integrators derived from a discrete variational principle. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 106(3–4), pp. 223–246. [https://doi.org/10.1016/S0167-2789\(97\)00051-1](https://doi.org/10.1016/S0167-2789(97)00051-1)
- [41] Zadra, F., Bravetti, A., Seri, M. (2021). Geometric numerical integration of Liénard systems via a contact Hamiltonian approach. *Mathematics*, 9(16), p. 1960. <https://doi.org/10.3390/math9161960>
- [42] Shadwick, B. A., Bowman, J. C., Morrison, P. (1998). Exactly conservative integrators. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 59(3), pp. 1112–1133. <https://doi.org/10.1137/S0036139995289313>
- [43] Takács, D. M., Fülöp, T. Improving the accuracy of the Newmark method through backward error analysis. Megjelenés alatt, arXiv: arXiv.2403.02029.
- [44] ANSYS, Inc. (2023). *Ansys Mechanical User Guide: 15.2.2.1. Time Integration Scheme for Linear Systems*.
- [45] Dassault Systemes Simulia Corp. (2023). *Abaqus Standard User Manual: Implicit dynamic analysis using direct integration*.
- [46] Wolfram Language & System Documentation Center (2023). “SymplecticPartitionedRunge Kutta” Method for NDSolve. Wolfram Research, Inc.