

Hamilton 系统的保辛-守恒积分算法*

高强 钟万颢

(大连理工大学工程力学系,工业装备结构分析国家重点实验室,大连 116023)

摘要 给出了 Hamilton 系统基于辛矩阵乘法的显式时不变正则变换和时变正则变换. 引入含参变量的近似 Hamilton 系统,并以近似 Hamilton 系统为基础进行辛矩阵乘法的正则变换. 正则变换保证了数值积分的保辛性质,而通过调整引入的参变量可保证能量在积分格点上守恒. 实现了 Hamilton 系统即保辛又保能量的算法.

关键词 保辛, 能量守恒, 参变量, 正则变换

引言

辛是 Hamilton 系统的特性^[1]. 给出 Hamilton 函数,则正则微分方程就确定了. 正则方程求解的是状态向量,任何两个时间点状态向量之间的变换就是乘一个辛矩阵,这是数学理论给出的结果. 然而一般给出一个 Hamilton 函数,精确求解十分困难,因此只能寻求近似解. 近似求解一般用将时间坐标离散的方法. 通常使用的方法是有限差分法. 冯康指出差分格式应保辛^[2],并且给出了保辛的差分格式. 离散系统的解不可用连续坐标的 Hamilton 函数对称群来分析相流,因为它只有离散的状态向量流.

对于非线性系统的求解,以往一大批差分格式脱离了变分原理,而是根据微分算子而凭经验凑合的,五花八门而缺乏一般规则^[3,4]. 有限元法则在变分原理的控制下生成单元而保持了保守体系的基本规则,故自动保辛^[5-9]. 根据分析结构力学的理论,区段两端状态的传递关系就是辛矩阵. 最小势能原理与正则变换辛矩阵的乘法合成是一致的. 然而,通常有限元常对线性体系生成单元刚度阵;而非线性有限元就不能用常值刚度阵表示,其位移法有限元则可用单元变形能为两端位移的函数这一点来保辛. 虽然保辛,却不是原来系统的解,因为引入了近似,故只能是近似系统的保辛. 分析动力学用作用量是两端位移的函数来积分. 相当于结构力学的区段变形能. 虽然是动力学问题,但可按分析结构力学的思路求解计算.

数值积分要离散. 首先明确离散后怎么检验保辛. 其实很简单,只要看传递矩阵是否辛矩阵即可. 传递辛矩阵即格点到格点状态向量之间的传递保辛. 离散后就不是原系统了,只能是近似的离散系统,得到的解是离散点的状态. 至于不是格点的时间点,则只能是插值得到的状态,谈不到是否保辛的问题.

微分方程的数学理论有李群、李代数等,是针对连续时间解的性质分析的,不可硬套给离散时间的近似系统. 所以说,对于离散近似解不能按连续时间的相流(状态流)来分析. 分析离散格点的近似解必须考虑这些特性,保辛只能用逐个传递矩阵是辛矩阵来表征. 离散系统只能考虑离散的对称群.

保守系统的另一个重要性质是具有守恒量. 一个保守系统近似解的数值实验应进行很长时间的积分,其积分近似是否满意可检验原问题的守恒量(数学称第一积分),如 Hamilton 函数等是否保守. 如果不能达到基本为常数,则不能满意. 能量是最重要的. 事实上即使近似系统的解保辛,原系统的能量也可能不是常数,而且还可能漂移. 国外杂志论文提出:差分格式,保辛与守恒难以同时达成;证明了:保辛则能量不能守恒;能量守恒就不能保辛的两难命题^{[10],[2]},“鱼与熊掌不可得兼”. 其证明是片面的,这个相互冲突的结论只适用于固定的有限差分格式.

事实上存在两全的算法,参变量保辛-守恒算法. 保辛说的是近似解的传递保辛;守恒说的是近似解使原系统在格点处守恒. 改换思路是要点. 参变量方法已经在弹塑性接触等许多问题中得到成

2009-01-31 收到第1稿,2009-03-13 收到修改稿.

* 自然科学基金(10632030, 10721062, 2005CB321704),辽宁省博士启动基金(20081091),大连理工大学青年教师培养基金和大连理工大学理学基金资助(SFDUT07002)

功应用^[11]. 参变量保辛-守恒积分法运用的数学很普通. 本文通过辛矩阵乘法的正则变换确保保辛, 并通过引入参变量使能量守恒.

1 辛矩阵乘法表述的正则变换

正则变换可以通过生成函数和辛矩阵来表示. 在数值计算的应用方面, 辛矩阵表示的正则变换是有优点的, 它可显式提供正则变换. 动力学初值问题对时间是逐步积分的. 以下将辛矩阵乘法的正则变换划分为时不变的变换与时变的变换, 分别讲述之.

1.1 时不变正则变换的辛矩阵乘法表述

若时不变线性 Hamilton 系统的 Hamilton 函数为 $H_a(v)$, 则其对偶方程为

$$\dot{q} = \partial H_a / \partial p = Aq + Dp, \quad \dot{p} = -\partial H_a / \partial q = -Bq - A^T p,$$

$$\text{或 } \dot{v} = H_a v, H_a = \begin{bmatrix} A & D \\ -B & -A^T \end{bmatrix} \quad (1)$$

从矩阵 H_a 可计算与时间无关的本征向量辛矩阵 Ψ_a . 求解方程可用本征向量展开法, 表达为

$$v = \Psi_a v_e \text{ 或 } v_e = \Psi_a^{-1} v = -J \Psi_a^T J v \quad (2)$$

因 Ψ_a 是与时间 t 无关的辛矩阵, 故(2)给出了时不变的正则变换, 且这个正则变换是线性的. 如果对 Hamilton 方程(1)作上述正则变换, 则本征向量辛矩阵展开可将方程正交化并解耦, 便于求解.

因正则变换与 Hamilton 函数无关. 设有在时间步内变化不大的 Hamilton 函数 $H(v, t)$. 选择近似线性系统 $H_a(v)$ 与原系统的 Hamilton 函数 $H(v, t)$ 相差不大. $H_a(v)$ 对应的变换(2)都是正则变换. 选择近似的线性系统就是为了得到其变换辛矩阵 Ψ_a , 即利用本征向量展开法进行正则变换. 将 $v = \Psi_a v_e$ 代入 $H(v, t)$, 导出的新 Hamilton 函数是 $H_e(v_e, t) = H(\Psi_a v_e, t)$, 这样就得到新状态 v_e 对应的 Hamilton 体系, 而 $H_e(v_e, t)$ 就是变换后 Hamilton 函数.

例如对于时变的线性 Hamilton 系统 $H(v, t) = -v^T JH(t)v/2$, 则变换后为

$$H_e(v_e, t) = H(\Psi_a v_e, t) = -v_e^T H_e v_e / 2,$$

$$H_e(t) = \Psi_a^T JH(t) \Psi_a \quad (3)$$

近似线性系统 Hamilton 矩阵 H_a 的选择有一定的任意性, 例如取 $H(t)$ 的平均值等. 这样 $JH_e(t)$ 大体上就接近对角化了, 对于数值求解有帮助.

以上讲的是时不变正则变换, 只用到本征向量辛矩阵 Ψ_a . 然而时不变系统的解也可用于时变正

则变换, 见下节.

1.2 时变正则变换的辛矩阵乘法表述

在时间坐标上的不同辛矩阵就表明是时变的变换, 即要寻找函数

$$q_e = q_e(q, p, t), p_e = p_e(q, p, t)$$

$$\text{或 } v_e = v_e(v, t), v_e^T = \{q_e^T, p_e^T\} \quad (4)$$

其中函数 q_e, p_e 或 v_e 是变换后的状态. 正则变换要求变换后的状态变量微分方程, 依然有 Hamilton 正则方程的形式.

1.2.1 基于线性时不变系统的时变正则变换

时变正则变换也要寻找一个能得到完全解的近似 Hamilton 系统. 可用时不变线性 Hamilton 系统来执行时变正则变换, 其 Hamilton 函数记为 $H_a(v)$, 原因是时不变线性系统可寻求完全解. 从应用的角度看, $H_a(v)$ 应与原问题的 Hamilton 函数 $H(v, t)$ 相差不多. 从 $v(t)$ 通过正则变换到 $v_e(t)$ 的 Hamilton 系统后, 其对应的 Hamilton 函数是 $H_e(q_e, p_e, t) = H_e(v_e, t)$, 对偶方程为

$$dv_e/dt = \dot{v}_e = J \cdot (\partial H_e / \partial v_e) \quad (5)$$

方程(2)给出了近似的线性时不变系统 $H_a(v)$ 的本征向量辛矩阵 Ψ_a 的时不变正则变换. 然而, 近似线性时不变系统 $H_a(v)$ 也有时变的正则变换. 除本征向量辛矩阵 Ψ_a 外, 还有单位初始矩阵的响应辛矩阵

$$S_a(t) = \exp(H_a t) = \exp[\Psi_a (D_p t) \Psi_a^{-1}] = \Psi_a [I + (D_p t) + (D_p t)^2/2 + \dots] \Psi_a^{-1} = \Psi_a \cdot D(t) \cdot \Psi_a^{-1}, D(t) = \exp(D_p t) \quad (6)$$

其中 D_p 为矩阵 H_a 的本征值矩阵, 为对角矩阵. 可验证 $S_a^T J S_a = J$, 运用 $S_a(t)$ 可进行时变的正则变换

$$v = S_a(t) \cdot v_e \text{ 或 } v_e = S_a^{-1} v = -J S_a^T J v \quad (7)$$

因 $S_a(t)$ 是时间的函数, 所以是时变正则变换.

1.2.2 一般时变正则变换的辛矩阵乘法表述的讨论

以上是运用线性时不变系统的时变正则变换. 然而正则变换并不限于此, 更一般些的正则变换可表述如下. 设 $H_a(v, t)$ 体系的完全解表达为 $v_a(v_{a0}, t)$, 其中 v_{a0} 是状态参数初值向量, 称为参数, 表明是可微商的. 完成微商有

$$\partial v_a / \partial v_{a0} = S_a(v_{a0}, t), \quad \partial v_{a0} / \partial v_a = S_a^{-1}(v_{a0}, t) \quad (8)$$

可验证 S_a 是辛矩阵. 得到辛矩阵 $S_a(v_{a0}, t)$ 就相当于得到前面的 $S_a(t)$.

寻找 $H_a(\mathbf{v}, t)$ 体系的完全解不是轻而易举的, 线性常系数系统是能办到的, 但其它系统有完全解的很少. 线性常系数系统用本征向量辛矩阵 Ψ_a 给出了时不变的正则变换, 运用 $S_a(t)$ 进行就是时变的正则变换了. 假设有完全解的近似体系的 Hamilton 函数 $H_a(\mathbf{v}, t)$ 已经找到, 注意非线性系统的辛矩阵与初始状态向量 \mathbf{v}_{a0} 有关, 故写成 $S_a(\mathbf{v}_{a0}, t)$. 现在进行时变辛矩阵乘法的正则变换, 取

$$\mathbf{v} = S_a(\mathbf{v}_{a0}, t) \cdot \mathbf{v}_e \quad \text{或} \quad \mathbf{v}_e = S_a^{-1} \mathbf{v} = -JS_a^T \mathbf{J} \mathbf{v} \quad (9)$$

其中 \mathbf{v}_e 是变换后待求解的状态向量函数. 推导 \mathbf{v}_e 满足的微分方程要微商 $\dot{\mathbf{v}}_e$, 这要先推导 $S_a(\mathbf{v}_{a0}, t)$ 的微商. 因 $\mathbf{v}_a(\mathbf{v}_{a0}, t)$ 是完全解, 方程(8)成立, 再因偏微商是次序无关的, 故

$$\begin{aligned} \dot{S}_a(\mathbf{v}_{a0}, t) &= \partial S_a(\mathbf{v}_{a0}, t) / \partial t = \partial^2 \mathbf{v}_a(\mathbf{v}_{a0}, t) / \partial \mathbf{v}_{a0} \partial t = \\ &= \partial [\partial \mathbf{v}_a(\mathbf{v}_{a0}, t) / \partial t] / \partial \mathbf{v}_{a0} = \partial \dot{\mathbf{v}}_a(\mathbf{v}_{a0}, t) / \partial \mathbf{v}_{a0} = \\ &= \partial [J(\partial H_a / \partial \mathbf{v}_a)] / \partial \mathbf{v}_{a0} \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{v}}_e &= -J \dot{S}_a^T \mathbf{J} \mathbf{v} - JS_a^T \dot{\mathbf{J}} \mathbf{v} = -J [\partial [J(\partial H_a / \partial \mathbf{v}_a)] / \partial \mathbf{v}_a]^T \mathbf{J} \mathbf{v} + \\ &+ JS_a^T \cdot (\partial H / \partial \mathbf{v}) = -J [\partial [\partial H_a / \partial \mathbf{v}_a] / \partial \mathbf{v}_{a0}]^T \mathbf{v} + \\ &+ JS_s^T \cdot (\partial H / \partial \mathbf{v}) = J \cdot (S_s^T \cdot (\partial H / \partial \mathbf{v})) - \\ &(\partial [\partial H_a / \partial \mathbf{v}_a] / \partial \mathbf{v}_{a0})^T \cdot \mathbf{v} \Big|_{\mathbf{v}=S_a(\mathbf{v}_{a0}, t) \cdot \mathbf{v}_e} \quad (10) \end{aligned}$$

公式看来比较复杂, 但一般非线性问题已经很难再化简了. 对于方程(10)解读如下: $\partial H_a / \partial \mathbf{v}_a$ 给出的向量是 $\mathbf{v}_a(\mathbf{v}_{a0}, t)$ 的函数, 然后再对 \mathbf{v}_{a0} 进行微商, 向量对向量的微商给出矩阵, 然后点乘 \mathbf{v} 仍给出向量. 而 $\partial H / \partial \mathbf{v}$ 给出向量, 用矩阵 S_a^T 前乘仍给出向量. 因此方程(10)是向量 \mathbf{v}_e 的微分方程. 其中出现的 \mathbf{v} 应当用方程(9)中的 $\mathbf{v} = S_a(\mathbf{v}_{a0}, t) \cdot \mathbf{v}_e$ 代入的, 方才成为对于 \mathbf{v}_e 的微分方程. 寻找能分析求解的近似非线性系统也是不容易的, 如果能找到, 则正则变换可发挥重要作用.

以上给出了以辛矩阵表述的正则变换. 下面我们将以无阻尼 Duffing 方程为例, 说明如何利用上述的正则变换, 并通过引入参变量, 实现保辛-保能量算法.

2 无阻尼 Duffing 弹簧的求解

笼统地讲述理论不容易理解, 用具体的例题来表述便于理解. 下面用熟知的无阻尼 Duffing 弹簧自由振动为例来介绍. 微分方程是

$$\ddot{q}(t) + [\omega_s^2 + \beta q^2] q(t) = 0 \quad (11)$$

初始条件为 $q(0)$ 和 $\dot{q}(0)$. Lagrange 函数为

$$L(q, \dot{q}) = (\dot{q}^2 - \omega_s^2 q^2 - \beta q^4 / 2) / 2 \quad (12)$$

该方程有 Jacobi 椭圆函数的分析解^[12], 而 Jacobi 椭圆函数可用精细积分法计算^[13], 数值上可达到计算机精度. 这里不采用椭圆函数的分析解, 而是进行数值求解.

非线性方程一般难以分析求解, 只能采用近似数值积分. 近似系统应当也是 Hamilton 系统, 其保辛是近似系统的保辛. 近似系统保辛不能保证近似解对于原系统保辛, 甚至原系统的能量也未必保守, 故应使用参变量等多种方法. 注意, 近似方法中还有摄动法可用.

在选择摄动出发点的基本近似解时也应遵循保辛的性质. 原系统(11)是非线性微分方程的初值问题, 设积分已经到达时刻 t_0 , 得到了 q_0, p_0 ; 而下一步是 t_f , 要求计算此时的 q_f, p_f . 作为时间区段 ($t_0 \sim t_f$) 的基本近似解, 可选择常系数线性振动的解. 即认为取时间区段 ($t_0 \sim t_f$) 的近似系统为

$$\begin{aligned} S_a(q_0, q_f) &= \int_{t_0}^{t_f} L_a(q, \dot{q}) dt, \\ L_a(q, \dot{q}) &= \dot{q}^2 / 2 - \omega^2 q^2 / 2 \quad (13) \end{aligned}$$

其中弹簧力 $\omega^2 q$ 的选择是切线或某割线近似. 虽然有保辛的要求, 近似方法仍然是有选择余地的, 即常系数 ω^2 的选择. 对应的微分方程为

$$\ddot{q}_a(t) + \omega^2 q_a(t) = 0 \quad (14)$$

常系数 ω^2 的选择可根据某个条件来选定, 成为留有余地的所谓参变量. 初值问题求解比较简单, 当然是按给定参变量 ω^2 而求解的, 得到时段结束时 t_f 的状态向量 q_f, p_f . 参变量 ω^2 尚未完全确定, 由于希望保持能量守恒, 恰好可通过调整参变量 ω^2 使原系统能量在时段结束时刻 t_f 守恒. 由于近似方程(14)为 Hamilton 系统并可解析求解, 能确保保辛, 并且在保辛基础上通过调整参变量 ω^2 保证能量在积分格点上守恒.

还可以通过摄动方法得到更为精细的方法. 近似系统(14)的 Hamilton 函数为

$$H_a(\mathbf{v}) = p^2 / 2 + \omega^2 q^2 / 2$$

是线性时不变系统, 利用它可执行时变正则变换. 引入 Hamilton 函数 $H_a(\mathbf{v})$ 标志的近似线性系统, 就是要基于它进行基于线性时不变系统的时变正则变换. 因此要将二次 Hamilton 函数表达为

$$H_a(\mathbf{v}) = -\mathbf{v}^T (\mathbf{J} \mathbf{H}_a) \mathbf{v} / 2 \quad (15)$$

根据矩阵 H_a , 容易计算本征向量辛矩阵 Ψ_a , 而单位初始矩阵的响应辛矩阵为

$$S_a(t) = \exp(H_a t) \quad (16)$$

可验证 $S_a^T J S_a = J$. 运用 $S_a(t)$ 可进行时变的正则变换

$$v = S_a(t) \cdot v_e \text{ 或 } v_e = S_a^{-1} v = -J S_a^T J v \quad (17)$$

变换后待求状态向量函数是 $v_e(t)$, 微分方程是

$$\begin{aligned} \dot{v}_e &= H_e v_e, \\ H_e &= J S_a^T J (H_a - H) S_a = S_a^{-1} (H - H_a) S_a \end{aligned} \quad (18)$$

其中

$$H_a - H = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \omega_s^2 + \beta q^2 - \omega^2 & 0 \end{bmatrix} \quad (19)$$

容易验证 H_e 是 Hamilton 矩阵. 参变量 ω^2 仍是待定, 根据格点处能量守恒, t_f 时刻原系统的能量守恒成为补充条件, 可提供一方程, 用以确定参变量 ω^2 . 非线性方程, 求解要迭代. 作为参变量的初值, 在普通情况下可用切线的 ω^2 ; 或用通常的保辛差分法, 例如保辛 Euler 差分法等再结合割线近似等. 虽然开始的参变量初值不够准, 在叠代中是可逐步修正的.

变换后的微分方程(18)的求解也要初始条件. 根据方程(17), 并且由于 $S_a(t_0) = I$, 故

$$v_{e0} = v_0 \quad (20)$$

方程(18)也是 Hamilton 系统, 对此可用例如保辛差分或时间有限元等保辛近似方法求解. 因 H_a 是原系统 H 的主要部分, 而近似系统 H_e 是非常精细地求解的, 并且正则变换本身是精确的, 所以的主要部分已经“消化”了. 从而对于 H_e 的近似求解所带来的误差已经是高阶小量了, 可以得到满意的数值解. 通过能量守恒求解参变量 ω^2 必然导向迭代. 迭代有各种各样的方法, 可设想如下:

1. 根据 q_0, p_0 , 采用参变量 ω^2 的初值问题. 最粗糙是用切线近似的 ω^2 , 然而讲究些也可用简单的差分法近似计算一个 q_f , 再采用割线近似的 ω^2 等;
2. 根据 q_0, p_0, ω^2 精细求解初值问题, 得到辛矩阵以及 q_0, p_0 ;
3. 根据辛矩阵进行其乘法的正则变换得到矩阵 H_e , 见方程(18);
4. 摄动后的初值边界条件见方程(20);
5. 近似保辛求解变换后 H_e 的系统, 并计算 t_f 处的 q_f, p_f 与能量 H_f ;
6. 比较初始 Hamilton 函数 $H_0 = H(q_0, p_0)$ 与

$H_f = H(q_f, p_f)$ 之差 $\Delta H(\omega^2) = H_f - H_0$, 如果误差 ΔH 满足指定精度则接受, 否则修改新的参变量 ω_{new}^2 ;

7. 修改 ω_{new}^2 的方法可以是, 根据临近两次 ω^2 的和对应的 Hamilton 函数, 通过割线按直线插值确定新的参变量 ω_{new}^2 . 然后返回步骤 2.

应当证明, 不论参变量 ω^2 选择什么数值, 以上的积分总是保辛的. 证明为: 因为变换用辛矩阵乘法 $v = S_a(t) \cdot v_e$, 故

$$v_0 = S_{a0} \cdot v_{e0}, v_f = S_{af} \cdot v_{ef}$$

其中 S_{a0}, S_{af} 是辛矩阵. 又因正则变换后, 采用例如区段变形能的有限元法推导的传递

$$v_{ef} = S_{e\Delta} \cdot v_{e0}$$

其中 $S_{e\Delta}$ 也是辛矩阵. 从而得到

$$v_f = S_{af} S_{e\Delta} v_{e0} = (S_{af} S_{e\Delta} S_{a0}^{-1}) v_0 = S_{\Delta} \cdot v_0,$$

$$S_{\Delta} = S_{af} S_{e\Delta} S_{a0}^{-1}$$

则传递矩阵 S_{Δ} 是 3 个辛矩阵的乘积; 根据辛矩阵群的性质, S_{Δ} 也是辛矩阵. 故不论 ω^2 如何选择, 状态传递总是保辛的. 这样, 在保辛条件外, 还有参变量的选择余地, 还可满足更多的条件, 当前应选择格点处能量守恒条件得以满足. 通俗地讲, 参变量方法是有弹性的, “太极拳”有含蓄.

状态传递保辛后, 能量是否守恒也重要. 任意选择的参变量 ω^2 不能保证格点处的状态使原系统的能量守恒. 好在参数 ω^2 的选择可按能量守恒而求解. 因此参变量 ω^2 辛矩阵乘法的正则变换后再保辛近似, 既保辛又使能量守恒, 打破了所谓保辛则能量不能守恒, 能量守恒就不能保辛的两难命题. 这个相互冲突的结论只适用于刚性的有限差分积分格式. 因差分格式没有参变量, 故要求保辛后就没有选择余地了. 运用含有参变量的辛矩阵乘法正则变换可达到能量守恒, 故可称为“保辛-守恒算法”.

前面讲述是在可精细求解的近似系统基础上再运用辛矩阵乘法摄动而求解的. 直接运用精细积分近似系统的解而不进行摄动也可实现保辛-守恒的. 摄动求解当然可使精度大幅度提高, 但也有较高的计算工作量. 但不摄动而减少离散格点的步长也能提高精度的.

参变量正则变换的保辛-守恒算法显现出了其优越性. 保辛说的是“近似解的传递保辛”, 守恒说的是“近似解使原系统在格点处守恒”. 单自由度问题只能有一个参变量; 而 n 自由度问题就可以有 n 维

的参变向量. 这样可以保辛后还可使多个守恒条件得到满足, 有足够的弹性. 虽然现在用 Duffing 弹簧的例题讲解, 但参变量方法是一般适用的. 然而有多个守恒量时, 非线性联立方程的求解会麻烦些.

3 数值算例

算例 1: 考虑上述的 Duffing 方程, 取参数为 $\omega_s = 0.2$ 和 $\beta = 1.0$, 非线性度比较深; 初始条件为 $q(0) = 1, p(0) = 1$. 在 0 到 20(s) 区间上积分, 时间积分步长为 $\eta = 0.1$.

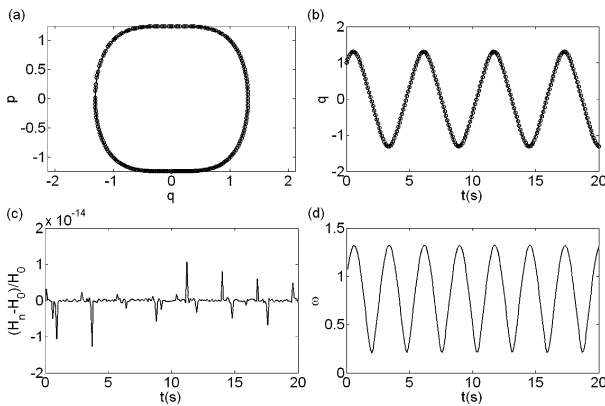


图 1 Duffing 方程保辛 - 守恒算法积分结果

Fig. 1 The symplectic preserving - energy invariant results for Duffing equation

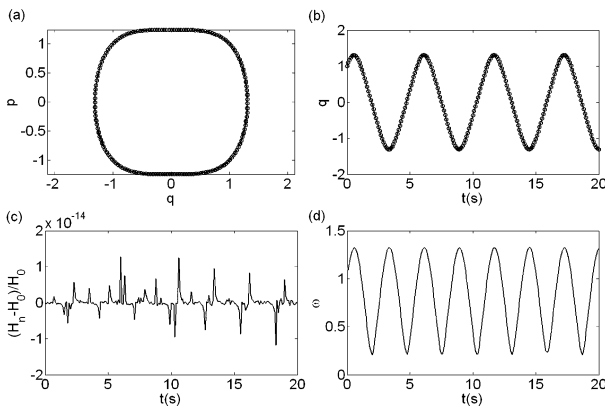


图 2 Duffing 方程保辛摄动 - 守恒算法积分结果

Fig. 2 The symplectic preserving perturbation - energy invariant results for Duffing equation

采用线性系统 (14) 来近似 Duffing 方程, 并通过调整参变量 ω^2 使原系统能量在积分格点守恒, 即未曾使用保辛摄动时, 给出的计算结果如图 1 (a)-(d), 分别表示 Duffing 方程的相轨迹、位移、Hamilton 函数的相对误差以及参变量 ω 的变化情况. 在 (a) 和 (b) 中, 实线为通过椭圆函数计算的解析解, 而圆圈为本文方法结果. 图 1 (a) 表明相平面

上近似解与精确解的椭圆函数轨道符合很好. 图 1 (c) 表明, 上述方法得到的 Hamilton 函数的相对误差已经达到 10^{-14} , 这已经接近计算机精度. 当然如果计算机系统的精度更高, 则 Hamilton 函数也能达到更高的精度.

若采用线性系统 (14) 的单位响应矩阵 $S_a(t)$ 作时变正则变换, 然后通过保辛方法求解方程 (18), 并同样调整参变量 ω^2 使原系统能量在积分格点守恒, 则结果如图 2 (a)-(d), 它们与图 1 表示的含义相同. 图 1 和图 2 的差别很小, 若采用数值比较可知图 2 的结果更精确一些.

以上两种近似解的误差表现在相位上, 当时间会长时会表现出来. 若积分到 200(s), 则以上两种方法的位移与解析解有明显差别, 其中第二种方法更精确些, 但需要的计算量也显著增加.

算例 2: 考虑 Kepler 问题, Lagrange 与 Hamilton 函数分别是

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2}(\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) + \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}},$$

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}} \quad (21)$$

其 Hamilton 正则方程为

$$\dot{q}_1 = p_1, \quad \dot{q}_2 = p_2$$

$$\dot{p}_1 = -\frac{q_1}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}, \quad \dot{p}_2 = -\frac{q_2}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}} \quad (22)$$

初始条件取为 $q_1 = 0.4, q_2 = 0, p_1 = 0, p_2 = 2$. 此问题除了 Hamilton 函数是守恒量外, 角动量也是守恒量, 即

$$\Theta = q_1 p_2 - q_2 p_1 \quad (23)$$

守恒. 对于本问题, 当然可如前面运用精细积分与切线近似求解, 但参变量方法还可用于时间有限元积分. 以下的阐述与计算是参变量时间有限元方法的.

采用区段变形能单点积分近似, 积分点的选择也可带上参变量的. 令 η 代表时间步长. 运用时间有限元的近似作用量

$$S = \int_0^\eta L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) dt \approx \eta \cdot L(\bar{\mathbf{q}}, \Delta \mathbf{q} / \eta) \quad (24)$$

这几乎是微积分的中值定理. 例如取

$$\bar{\mathbf{q}} = (\mathbf{q}_0 + \mathbf{q}_f) / 2 \quad (25)$$

这是直线插值. 于是

$$S = \eta L(\bar{\mathbf{q}}, (\mathbf{q}_f - \mathbf{q}_0) / \eta) \quad (26)$$

只是 $\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_f$ 的函数而没有参变量. 应引入参变量,

带上参变量的时间有限元就能达到守恒的. 仔细分析可知, 被积分函数是 $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$, 微积分中值定理讲是时间区段内某一点. 取直线插值的 $\bar{\mathbf{q}}$, 无非是取中点近似而已. 选择了 \mathbf{q}_f 就完全确定了. 然而实际轨道不能保证是直线, 在 $\bar{\mathbf{q}} = (\mathbf{q}_0 + \mathbf{q}_f)/2$ 附近的位移也可以选择. 可以在中点 $(\mathbf{q}_0 + \mathbf{q}_f)/2$ 附近选择积分点, 以引入参变量. 取

$$\bar{\mathbf{q}} = (\mathbf{q}_0 + \mathbf{q}_f)/2 + \text{diag}(\nabla L) \cdot \boldsymbol{\gamma} \quad (27)$$

其中 n 维向量 $\boldsymbol{\gamma}$ 就是参变量; 而 ∇L 是梯度向量

$$\nabla L \approx \partial L / \partial \mathbf{q} |_{\mathbf{q}, (\mathbf{q}_f - \mathbf{q}_0) / \Delta t} \approx \partial L / \partial \mathbf{q} |_{\mathbf{q}_0, (\mathbf{q}_f - \mathbf{q}_0) / \Delta t} \quad (28)$$

就是运用出发点附近的近似也可以, $(\mathbf{q}_f - \mathbf{q}_0) / \Delta t$ 也不用反复叠代, 只要用第一次计算的即可, 就是说只需计算一次以减少计算工作量. 而 $\text{diag}(\nabla L)$ 是以 ∇L 为对角元的对角矩阵. 因此可支持不超过 n 个守恒量. 如果有 n 个守恒量的话, 系统就是可积分的了. 一般实际的系统有 $m < n$ 个守恒量, 则只要选择 m 个参变量就可以了. 当只有一个守恒量时, 只需要一个参变量, 可选择

$$\bar{\mathbf{q}}_\gamma = (\mathbf{q}_0 + \mathbf{q}_f) / 2 + \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla L \quad (29)$$

其中 $\boldsymbol{\gamma}$ 是参变量. 调整参变量 $\boldsymbol{\gamma}$ 可达到能量守恒, 通常向量 $\boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla L$ 是很小的. 这样

$$S = \eta L(\bar{\mathbf{q}}_\gamma, \nabla \mathbf{q} / \eta) = f(\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_f, \boldsymbol{\gamma}) \quad (30)$$

是参变量 $\boldsymbol{\gamma}$ 的函数; 从而时间有限元方法得到的传递辛矩阵 $S(\boldsymbol{\gamma})$, 成为参数 $\boldsymbol{\gamma}$ 的矩阵函数; 确定参数 $\boldsymbol{\gamma}$ 根据 Hamilton 函数守恒的条件即可.

这说明参变量差分法也是可行的.

对于本算例的 Kepler 问题, 我们选择一个参变量 $\boldsymbol{\gamma}$ 以保证 Hamilton 函数守恒. 在 $0 - 1000(s)$ 上积分, 时间步长为 $\eta = 0.1$. 图 3(a) - (d) 分别给出了 Hamilton 函数的相对误差, 角动量的相对误差、参变量 $\boldsymbol{\gamma}$ 随时间变化以及 Kepler 问题的轨迹. 数值近似给出了计算机精度的 Hamilton 函数, 而角动量大体上自动守恒. 积分得到的轨道出现椭圆轨道进动, 这是近似积分无法避免的.

若在 $0 - 4\pi(s)$ 上积分, 时间步长为 $\eta = \pi/30$. 分别采用保辛的中点近似方法 (即采用方程 (26) 给出的近似而不引入参变量) 和本文保辛 - 守恒方法积分, 计算结果分别如图 4, 其中黑点表示解析解, 而实线和虚线分别给出保辛 - 守恒方法和中点近似的积分结果. 在上面给出的初始条件下, Kepler 椭圆轨道的周期为 2π , 图 4 表明这两种方法都会出现椭圆轨道进动, 但保辛 - 守恒方法的椭圆轨

道进动要慢一些, 更精确一些.

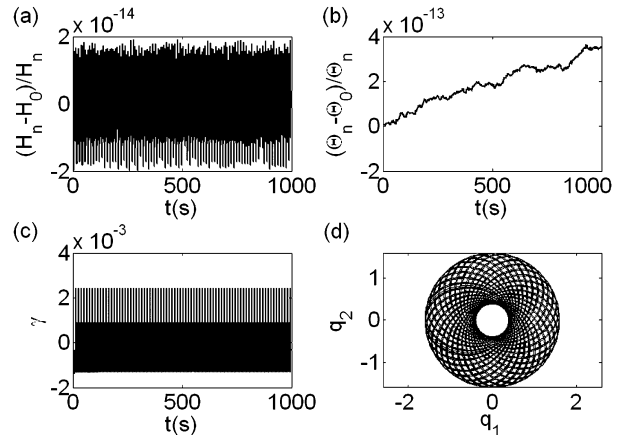


图3 Kepler 问题保辛 - 守恒算法积分结果

Fig.3 The symplectic preserving-energy invariant results for Kepler problem

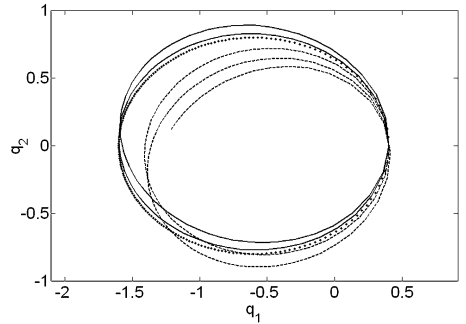


图4 保辛中点近似方法和保辛 - 守恒方法比较

Fig.4 The compson for midpoint symplectic preserving method and symplectic preserving - energy invariant method Kepler problem

4 结论

通过引入含参变量的近似 Hamilton 系统, 并以此为基础进行辛矩阵乘法的正则变换, 在保证数值积分的保辛性质后, 通过调整参变量可达到能量在积分格点上守恒, 实现了 Hamilton 系统即保辛又保能量的算法. 通过例题表明, 运用精细积分或时间有限元皆可达到守恒量的守恒. 直接运用近似系统的解而不进行摄动, 以及在近似系统基础上再运用辛矩阵乘法摄动均可实现保辛 - 守恒. 摄动求解可使精度提高, 但也有较高的计算工作量.

参 考 文 献

- 1 H Goldstein. Classical mechanics, 2nd ed.. London: Addison-Wesley, 1980
- 2 冯康, 秦孟兆. Hamilton 体系的辛计算格式. 浙江: 浙江科技出版社, 2004 (Feng Kang, Qin Mengzhao. Symplectic geometric algorithm for Hamiltonian systems. Hang-

- zhou; Zhejiang Science and Technology Press, 2003 (in Chinese))
- 3 E Hairer, Ch Lubich, G Wanner. Geometric numerical integration-structure preserving algorithms for ordinary differential equations-2nd Ed. Berlin: Springer, 2006
 - 4 E Hairer, G Wanner. Solving ordinary differential equations II: Stiff and Differential-Algebraic problems-2nd Ed. Berlin: Springer, 1996
 - 5 钟万勰. 分析结构力学与有限元. 动力学与控制学报, 2004, 2(4): 1~8 (Zhong Wanxie. Analytical structural mechanics and finite element. *Journal of Dynamics and Control*, 2004, 2(4): 1~8 (in Chinese))
 - 6 钟万勰, 姚征. 时间有限元与保辛. 机械强度, 2005, 27(2): 178~183 (Zhong Wanxie, Yao Zheng. Time domain FEM and symplectic conservation. *Journal of Mechanical Strength*, 2005, 27(2): 178~183 (in Chinese))
 - 7 钟万勰, 高强. WKBJ 近似保辛吗? 计算力学学报, 2005, 22(1): 1~7 (Zhong Wanxie, Gao Qiang. Is the WKBJ approximation symplectic conservative? *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2005, 22(1): 1~7 (in Chinese))
 - 8 钟万勰, 高强. 约束动力系统的分析结构力学积分. 动力学与控制学报, 2006, 4(3): 193~200 (Zhong Wanxie, Gao Qiang. Integration of constrained dynamical system via analytical structural mechanics. *Journal of Dynamics and Control*, 2006, 4(3): 193~200 (in Chinese))
 - 9 钟万勰, 孙雁. 三类保辛摄动及其数值比较. 动力学与控制学报, 2005, 3(2): 1~9 (Zhong Wanxie, Sun Yan. Numerical comparison for three different symplectic perturbation methods. *Journal of Dynamics and Control*, 2005, 3(2): 1~9 (in Chinese))
 - 10 G Zhong, J E Marsden. Lie-Poisson Hamilton-Jacobi theory and Lie-Poisson integrators. *Physics Letter A*, 1988, 113(3): 134~139
 - 11 钟万勰, 张洪武, 吴承伟. 参变量变分原理及其在工程中的应用. 北京: 科学出版社, 1997 (Zhong Wanxie, Zhang Hongwu, Wu Chenwei. Parametric variational principle and its applications in engineering, Beijing: Science Press, 1997 (in Chinese))
 - 12 高本庆. 椭圆函数及其应用. 北京: 国防工业出版社, 1991 (Gao Benqing. Elliptic function and its application. Beijing: National Defence Industry, 1991 (in Chinese))
 - 13 钟万勰, 姚征. 椭圆函数的精细积分. 应用力学进展, 北京: 科学出版社, 2004 (Zhong Wanxie, Yao Zheng. The precise integration method for elliptic functions. *Progress in Applied Mechanics*, Beijing: Science Press, 2004 (in Chinese))

THE SYMPLECTIC AND ENERGY PRESERVING METHOD FOR THE INTEGRATION OF HAMILTON SYSTEM *

Gao Qiang Zhong Wanxie

(Department of Engineering Mechanics, State Key Laboratory of Structural Analysis of Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China)

Abstract The time independent and time dependent canonical transformations based on the multiplication of symplectic matrix were given for Hamilton system. The approximate Hamilton system with parametric variable was introduced, and the canonical transformation was performed based on this approximate Hamilton system. The symplectic preserving property of the numerical methods was guaranteed by the canonical transformation, and the energy in the integration time can be adjusted to be constant by changing the parametric variable. So the symplectic and energy preserving method for Hamilton system was obtained.

Key words symplectic preserving, energy preserving, parametric variable, canonical transformation

Received 31 January 2009, revised 13 March 2009.

* The project supported by the Science Foundation of China (10632030, 10721062, 2005CB321704), the doctoral research fund of Liaoning (20081091), Young Researcher Funds of Dalian University of Technology and Science Research Foundation of Dalian University of Technology (SFDUT07002)