文章编号:1000-0887(2013)06-0547-05

传递辛矩阵群收敛于辛 Lie 群*

钟万勰, 高 强

(大连理工大学 工业装备结构分析国家重点实验室, 工程力学系,辽宁 大连 116024)

(我刊编委钟万勰来稿)

摘要: 通过作用量变分原理,给出了 Hamilton 正则方程离散积分的传递辛矩阵表示,利用 Hamilton 正则方程给出了其对应的 Lie 代数.说明了当时间区段长度趋近于 0 时,离散系统积分的传递辛矩阵群收敛于连续时间 Hamilton 系统微分方程分析积分得到的辛 Lie 群.

关 键 词: 离散积分; 传递辛矩阵; Hamilton; 辛 Lie 群

中图分类号: O152.8 **文献标志码:** A

DOI: 10.3879/j.issn.1000-0887.2013.06.001

引 言

辛对称是 H. Weyl 在 1939 年从动力学提出的[1-2].纯数学家用微分几何给出公理体系,称为**辛几何**.动力学数值积分的收敛性不是严重问题,哪怕最简单的 Euler 差分格式,只要步长足够小,也是收敛的.问题是怎样能收敛得快些、好些.冯康等提出,动力学差分格式应当保辛[3],Hairer 等总结了保辛方法的发展[4-6].保辛与分析结构力学和有限元的关系见文献[7-9].然而,辛几何高深的公理体系使读者应用发生困难.差分在保辛同时,又产生了问题,能量不能守恒.其实,只要采用参变量方法,可达到既保辛又守恒的[10].

数值求解将微分方程离散,文献[11]从结构力学角度给出了离散的**辛代数**表述,验证了辛矩阵对应于对称矩阵,与有限元法相衔接,简单易懂,并给出了**传递辛矩阵群**.根据单坐标结构力学与动力学的模拟关系,单坐标结构力学也有分析理论,也适用 Hamilton 体系.有结构力学区段变形能对应于动力学的作用量等,同样的时间有限元法离散可用于动力学积分,并且达到其数值积分**保辛**,也有时间离散后的**传递辛矩阵群**.

辛 Lie 群是根据**连续时间系统**微分方程分析积分得到的基本理论.传递辛矩阵群是**离散系统**积分的.当区段长度非常小时,传递辛矩阵群在其离散的格点处将收敛于辛 Lie 群,这就是本文要讲明白的.

---

* **收稿日期:** 2013-04-24; **修订日期:** 2013-05-09

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11272076; 10721062)

作者简介: 钟万勰(1934—),男,浙江人,教授,中科院院士(通讯作者. E-mail:zwoffice@dlut.edu.cn);
高强(1978—),男,副教授,博士(Tel:+86-411-84707608;E-mail:qgao@dlut.edu.cn).

1 作用量,区段混合能和传递辛矩阵

设时间离散为 $t_0, t_1, \cdots, t_k = k\eta, \cdots$,区段长度 η 很小. 离散后传递辛矩阵可从区段(t_a, t_b), $t_b - t_a = \eta, t_b = k\eta$ 的作用量得到,也就是经典力学的第一类生成函数(generating function)[1]

$$A(\boldsymbol{q}_a, \boldsymbol{q}_b) = \int_{t_a}^{t_b} L(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}})\,\mathrm{d}t,\ \delta A(\boldsymbol{q}_a, \boldsymbol{q}_b) = 0, \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{q}$ 是 n 维的位移向量. Lagrange 函数 $L(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) = T - U$, 动能减势能,积分则可采用有限元数值方法. 有限元使用插值方法,在非线性问题时,积分给出的是在真实解附近状态的近似. 引入两端位移的对偶向量

$$\boldsymbol{p}_a = -\partial A/\partial \boldsymbol{q}_a,\ \boldsymbol{p}_b = \partial A/\partial \boldsymbol{q}_b \tag{2}$$

组成两端状态向量

$$\boldsymbol{v}_a = \begin{Bmatrix} \boldsymbol{q}_a \\ \boldsymbol{p}_a \end{Bmatrix},\ \boldsymbol{v}_b = \begin{Bmatrix} \boldsymbol{q}_b \\ \boldsymbol{p}_b \end{Bmatrix}. \tag{3}$$

离散数值分析的作用量积分则只能根据两端位移 $(\boldsymbol{q}_a, \boldsymbol{q}_b)$ 采用有限元数值方法得到. 于是有

$$A(\boldsymbol{q}_a, \boldsymbol{q}_b) = \frac{1}{2}\begin{Bmatrix} \boldsymbol{q}_a \\ \boldsymbol{q}_b \end{Bmatrix}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{K} \begin{Bmatrix} \boldsymbol{q}_a \\ \boldsymbol{q}_b \end{Bmatrix},\ \boldsymbol{K} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{K}_{aa} & \boldsymbol{K}_{ab} \\ \boldsymbol{K}_{ba} & \boldsymbol{K}_{bb} \end{bmatrix},\ \boldsymbol{K} = \boldsymbol{K}^{\mathrm{T}}, \tag{4}$$

近似作用量是 $(\boldsymbol{q}_a, \boldsymbol{q}_b)$ 的二次型,而$(\boldsymbol{q}_{a*}, \boldsymbol{q}_{b*})$ 是区段两端真实位移. 有限元法用于非线性问题时,矩阵 $\boldsymbol{K}(\boldsymbol{q}_{a*}, \boldsymbol{q}_{b*}) = \boldsymbol{K}_*$ 当然指在真实解处的,但真实解不知道,$\boldsymbol{K}(\boldsymbol{q}_a, \boldsymbol{q}_b)$ 是有限元法近似. 有限元法近似的收敛性是已经证明了的,而且其刚度阵的对称性也是保证的,因此其传递矩阵保辛也是必然的.

动力学适用初值条件:给定 $\boldsymbol{q}_a, \boldsymbol{p}_a$,要寻求下一点的 $\boldsymbol{q}_b, \boldsymbol{p}_b$. 也就是说$(\boldsymbol{q}_a, \boldsymbol{q}_b)$ 之中,只有 $\boldsymbol{q}_a$ 给定,而 $\boldsymbol{p}_a$ 应用于确定 $\boldsymbol{q}_b$. 将有限元法得到的 $A(\boldsymbol{q}_a, \boldsymbol{q}_b)$ 代入式(2)进行偏微商有

$$\boldsymbol{p}_a = -\boldsymbol{K}_{aa}\boldsymbol{q}_a - \boldsymbol{K}_{ab}\boldsymbol{q}_b,\ \boldsymbol{p}_b = \boldsymbol{K}_{ba}\boldsymbol{q}_a + \boldsymbol{K}_{bb}\boldsymbol{q}_b, \tag{5}$$

于是有区段的状态传递

$$\begin{cases} \boldsymbol{v}_b = \boldsymbol{S}\boldsymbol{v}_a, \\ \boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{S}_{11} & \boldsymbol{S}_{12} \\ \boldsymbol{S}_{21} & \boldsymbol{S}_{22} \end{bmatrix}, \\ \boldsymbol{S}_{11} = -\boldsymbol{K}_{12}^{-1}\boldsymbol{K}_{11},\ \boldsymbol{S}_{22} = -\boldsymbol{K}_{22}\boldsymbol{K}_{12}^{-1}, \\ \boldsymbol{S}_{12} = -\boldsymbol{K}_{12}^{-1},\ \boldsymbol{S}_{21} = \boldsymbol{K}_{12}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{K}_{22}\boldsymbol{K}_{12}^{-1}\boldsymbol{K}_{11}. \end{cases} \tag{6}$$

可验证 $\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}\boldsymbol{S} = \boldsymbol{J}$ 满足,表明 $\boldsymbol{S}$ 是辛矩阵,这是离散推导的. 因为区段作用量是用有限元法积分得到的,故是离散近似的. 许多离散的传递辛矩阵在一起构成**传递辛矩阵群**,当然是有限元近似的. 问题在于当区段长度 $\eta \to 0$ 时,该群会收敛于连续系统的辛 Lie 群,需要证明.

传递辛矩阵可用本征向量矩阵展开为[10]

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{D}_{\mathrm{e}}\boldsymbol{\Psi}^{-1},\ \boldsymbol{D}_{\mathrm{e}} = \mathrm{diag}[\mathrm{diag}(\lambda_i), \mathrm{diag}(\lambda_i^{-1})]. \tag{7}$$

对应地有 Hamilton 矩阵的本征向量矩阵展开

$$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{D}_{\mathrm{p}}\boldsymbol{\Psi}^{-1},\ \boldsymbol{D}_{\mathrm{p}}=\mathrm{diag}[\,\mathrm{diag}(\mu_i),\ -\mathrm{diag}(\mu_i)\,]. \tag{8}$$

容易验证,$(\boldsymbol{JH})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{JH}$ 满足. $\boldsymbol{H}$ 与 $\boldsymbol{S}$ 本征向量矩阵同是 $\boldsymbol{\Psi}$,而 $\lambda_i=\exp(\mu_i\eta)$. 容易验证有关系

$$\exp(\boldsymbol{H}\cdot\eta)=\boldsymbol{S}, \tag{9}$$

表明**传递辛矩阵群**的元素 $\boldsymbol{S}$ 所对应的 Lie 代数体是 $\boldsymbol{H}\cdot\eta$[10].

2 Hamilton 体系和正则方程

Hamilton 体系的变分原理是

$$\delta\int_{t_a}^{t_b}[\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\dot{\boldsymbol{q}}-H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})]\,\mathrm{d}t=0, \tag{10}$$

其中,引入了对偶向量

$$\boldsymbol{p}=\partial L(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}})/\partial\dot{\boldsymbol{q}}, \tag{11}$$

并对 $\dot{\boldsymbol{q}}$ 采用了 Legendre 变换,而 Hamilton 函数为

$$H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})=\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\dot{\boldsymbol{q}}-L(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}}), \tag{12}$$

式中 $\dot{\boldsymbol{q}}$ 应从式(11) 解出而表达为对偶向量 $\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}$ 的函数.

根据变分原理(10)推导的对偶方程是 Hamilton 正则方程

$$\dot{\boldsymbol{q}}=\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{p}},\ \dot{\boldsymbol{p}}=-\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{q}}, \tag{13}$$

或可用 Poisson 括号写成

$$\dot{\boldsymbol{q}}=[\boldsymbol{q},H],\ \dot{\boldsymbol{p}}=[\boldsymbol{p},H]\ \text{或}\ \dot{\boldsymbol{v}}=[\boldsymbol{v},H], \tag{14}$$

其中,$\boldsymbol{v}=\{\boldsymbol{q}^{\mathrm{T}}\quad\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\}^{\mathrm{T}}$ 是状态向量,文献[1]证明了 Poisson 括号是 Lie 代数体,认为 H 函数是多次连续可微的. 将正则方程的解,看成为对于初始状态的变换,则在不同时间的许多变换,构成辛 Lie 群. 按文献[3]119,其对应的 **Lie 代数体**可用 Hamilton 矩阵表征.

直接从变分原理(10)进行 $\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}$ 的积分,做有限元法的保辛离散(可见文献[11]). 在积分区段的开始时间 t_a,有给定的初始状态 $\boldsymbol{q}_a,\boldsymbol{p}_a$. 将 H 函数在 $\boldsymbol{q}_a,\boldsymbol{p}_a$ 附近进行 Taylor 级数展开有

$$\begin{aligned}H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})=&H_a+(\partial H/\partial\boldsymbol{q}\,|_a)^{\mathrm{T}}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{q}+(\partial H/\partial\boldsymbol{p}\,|_a)^{\mathrm{T}}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{p}+\\&(\mathrm{d}\boldsymbol{v})^{\mathrm{T}}(\partial^2H/\partial\boldsymbol{v}\partial\boldsymbol{v})\,|_a\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{v}+O[(\mathrm{d}t)^3],\end{aligned} \tag{15}$$

下标 a 表示在 t_a 处. 其中对 H 的二价偏微商是**对称矩阵**,即

$$\begin{cases}\left.\dfrac{\partial^2H}{\partial\boldsymbol{v}\partial\boldsymbol{v}}\right|_a=\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}_{qq}&\boldsymbol{H}_{qp}\\\boldsymbol{H}_{pq}&\boldsymbol{H}_{pp}\end{bmatrix}_a,\\(\boldsymbol{B}=)\boldsymbol{H}_{qq}=\boldsymbol{H}_{qq}^{\mathrm{T}},\ (\boldsymbol{D}=)\boldsymbol{H}_{pp}=\boldsymbol{H}_{pp}^{\mathrm{T}},\\(\boldsymbol{A}=)\boldsymbol{H}_{pq}=\boldsymbol{H}_{qp}^{\mathrm{T}}.\end{cases} \tag{16}$$

既然要积分状态向量,从 t_a 到 t_b,认为区段长度 $t_b-t_a=\eta$ 很小,则在式(15)中将 $O[(\mathrm{d}t)^3]$ 忽略,代入正则方程得到

$$\dot{\boldsymbol{q}}=\partial H/\partial\boldsymbol{p}\,|_a+\boldsymbol{A}\delta\boldsymbol{q}+\boldsymbol{D}\delta\boldsymbol{p},\ \dot{\boldsymbol{p}}=-\partial H/\partial\boldsymbol{q}\,|_a-\boldsymbol{B}\delta\boldsymbol{q}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\delta\boldsymbol{p}. \tag{17}$$

该方程组右侧第 1 项是常值,在状态空间是直线,近似太差;所以要有线性项,展开式对于直线的偏离,为

$$\delta\dot{\boldsymbol{q}}=\dot{\boldsymbol{q}}-\partial H/\partial\boldsymbol{p}\,|_a,\ \delta\dot{\boldsymbol{p}}=\dot{\boldsymbol{p}}-\partial H/\partial\boldsymbol{q}\,|_a. \tag{18}$$

当然希望有更多的项,但其差别在已经是高阶小量了,况且非线性难以分析。下面引入 $2n \times 2n$ 的 Hamilton 矩阵:

$$\boldsymbol{H} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{D} \\ -\boldsymbol{B} & -\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}, \ \boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}, \ \boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}, \tag{19}$$

显然它满足

$$(\boldsymbol{JH})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{JH}, \tag{20}$$

于是成为对微分方程

$$\delta\dot{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{H}\delta\boldsymbol{v} \tag{21}$$

进行积分。所以说 Hamilton 正则方程对应的 Lie 代数体就是 Hamilton 矩阵,其实文献[3][119]已经说过。这里的推导表明了从 Hamilton 正则方程到矩阵 $\boldsymbol{H}$ 的来路。

前面方程(6)给出的是差分形式,也推导了辛矩阵。问题在于两种方法得到的 Hamilton 矩阵 $\boldsymbol{H}$ 是否相差的是步长的高阶小量。先看式(19)的 Hamilton 矩阵,在式(16)和(17)明确指出,这是在 t_a 时间的 Taylor 展开的二次项,根据 $\boldsymbol{q}_a$,$\boldsymbol{p}_a$ 的确定性,式(19)的 $\boldsymbol{H}$ 是确定的矩阵。而传递辛矩阵则相当于离散差分近似。有限元法的差分近似的收敛性,即使不保辛,也是没有问题的。而本文的讲述却是在辛的范围内的。

传递辛矩阵既然是对应为 Hamilton 矩阵乘积分长度 $\boldsymbol{H}\cdot\eta$,则当 $\eta \to 0$ 时就会收敛到式(21)的 $\delta\dot{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{H}\delta\boldsymbol{v}$。正则方程的变换给出辛 Lie 群,所以当 $\eta \to 0$ 时传递辛矩阵群也必定收敛到辛 Lie 群。这就是本文要讲明白的。

前面讲的有限元离散是基于作用量的。但基于变分原理(10)的离散方法也可进行有限元法离散。具体方法见文献[12]。

3 结 论

本文通过作用量变分原理,给出了 Hamilton 正则方程离散积分的传递辛矩阵表示。另一方面连续 Hamilton 正则方程的解构称辛 Lie 群。本文说明当时间区段长度趋近于 0 时,离散系统积分的传递辛矩阵群收敛于连续时间 Hamilton 系统微分方程分析积分得到的辛 Lie 群。

参考文献(References):

[1] Goldstein H. *Classical Mechanics*[M]. 3rd ed. London: Addison-Wesley, 2002.

[2] Arnold V I. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*[M]. New York: Springer-Verlag, 1989.

[3] 冯康, 秦孟兆. 哈密尔顿系统的辛几何算法[M]. 杭州:浙江科学技术出版社,2003. (FENG Kang, QIN Meng-zhao. *Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems*[M]. Hangzhou:Zhejiang Science & Technology Press, 2003. (in Chinese))

[4] Hairer E, Lubich C, Wanner G. *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithm for Ordinary Differential Equations*[M]. New York: Springer, 2006.

[5] Hairer E, Nørsett S P, Wanner G. *Solving Ordinary Differential Equations I-Nonstiff Problem*[M]. 2nd ed. Berlin: Springer, 1993.

[6] Hairer E, Lubich C, Wanner G. *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Al-*

gorithm for Ordinary Differential Equations*[M]. 2nd ed. New York: Springer, 2006.

[7] 钟万勰. 分析结构力学与有限元[J]. 动力学与控制学报, 2004, **2**(4):1-8. (ZHONG Wan-xie. Analytical structural mechanics and finite element[J]. *Journal of Dynamics and Control*, 2004, **2**(4):1-8. (in Chinese))

[8] 钟万勰, 姚征. 时间有限元与保辛[J]. 机械强度, 2005, **27**(2):178-183. (ZHONG Wan-xie, YAO Zheng. Time domain FEM and symplectic conservation[J]. *Journal of Mechanical Strength*, 2005, **27**(2):178-183. (in Chinese))

[9] 钟万勰, 高强. 约束动力系统的分析结构力学积分[J]. 动力学与控制, 2006, **4**(3):193-200. (ZHONG Wan-xie, GAO Qiang. Integration of constrained dynamical system via analytical structural mechanics[J]. *Journal of Dynamics and Control*, 2006, **4**(3):193-200. (in Chinese))

[10] 钟万勰, 高强. 辛破茧[M]. 大连:大连理工大学出版社, 2011. (ZHONG Wan-xie, GAO Qiang. *Break the Limitation of Symplecticity*[M]. Dalian: Dalian University of Technology Press, 2011. (in Chinese))

[11] 钟万勰. 力、功、能量与辛数学[M]. 大连:大连理工大学出版社, 2007. (ZHONG Wan-xie. *Force, Work, Energy and Sympletic Mathematics*[M]. Dalian: Dalian University of Technology Press, 2007. (in Chinese))

[12] Gao Q, Tan S J, Zhang H W, Zhong W X. Symplectic algorithms based on the principle of least action and generating functions[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2012, **89**(4): 438-508.

Symplectic Group of the Transfer Matrix Converges to the Symplectic Lie Group

ZHONG Wan-xie, GAO Qiang

(*State Key Laboratory of Structural Analysis of Industrial Equipment, Department of Engineering Mechanics, Dalian University of Technology, Dalian, Liaoning* 116023, *P. R. China*)

Abstract: By using action variational principle, the transfer symplectic matrix for the discrete integral of the Hamiltonian canonical equation was given. Then the Lie algebra corresponding to the Hamiltonian canonical equation was given. When the time step tends to zero, that the symplectic group of the transfer matrix for discrete integrator converges to the symplectic Lie group of the continuous-time differential equation of the Hamiltonian system was proved.

Key words: discrete integration; symplectic group of the transfer matrix; Hamilton; symplectic Lie group