

保辛-保能的数值积分*

孙雁¹, 高强², 钟万勰^{1,2}

(1. 上海交通大学 船舶海洋与建筑工程学院 工程力学系, 上海 200240;
2. 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(大连理工大学), 辽宁 大连 116024)

(本刊编委钟万勰来稿)

摘要: 针对 Hamilton 动力系统时变非线性问题,应用混合能变分原理,提出 Hamilton 系统的离散积分保辛算法.在此基础上,对 Hamilton 系统引入参变量,设计非线性问题迭代算法格式,通过对参变量的调整,在积分格点上实现了 Hamilton 系统数值积分保辛同时保能的目标.

关键词: 保辛; 能量守恒; Hamilton 系统; 区段混合能; 参变量

中图分类号: O322 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2014.08.001

引言

Hairer, Lubich 和 Wanner 的著作[1]讲的主要是保守动力系统的数值积分.在其第一版的序言中说明了:什么是 geometric-preserving algorithms.本文这里不再赘述.

动力学必然导向 Hamilton 体系,辛对称是 Hamilton 正则方程所特有的数学性质,其核心就是“辛对称群”^[2].一般给出 Hamilton 函数,精确求解十分困难,只能寻求近似解.离散时,文献[3]提出“不可积系统,保辛近似算法不能使能量守恒”(approximate symplectic algorithms cannot preserve energy for nonintegrable system)的误判.这就将首次积分^[1](first integrators,其实就是积分守恒量)与保辛对立起来了.首次积分本来是正则方程的部分后果,它与保辛是不应该对立的.

受文献[3]理论的影响,著作[1]将首次积分作为几何量,希望在数值积分时达到保守,同时也汇合了 DAE(differential algebraic equation)的位移约束的几何量等,称为 geometric-preserving algorithms.随后,有许多文章抛弃了保辛^[1],只求 geometric-preserving,可谓舍本逐末.笔者认为这不是正确的方向.例如,动力学 Hamilton 系统的数值积分,如果只关心其能量守恒,而偏离了保辛,则就有问题:这是动力学吗?将能量保守与动力学保辛对立起来不行,它们应当是兼容的.文献[2,4]就提出了保辛-守恒算法,说明保辛和能量守恒本来是不对立的.

保辛对于首次积分不能严格满足,但大体上是可以的.尤其,对于机械 DAE 系统,有祖冲之类的算法^[2],其数值结果表明,约束条件满足很好.然而,应注意 DAE 系统的约束是在位移

* 收稿日期: 2014-05-29; 修订日期: 2014-06-30

基金项目: 国家自然科学基金(51278298); 国家高技术发展计划(863 计划)(2012AA022606)

作者简介: 孙雁(1965—),女,上海人,副教授,博士(通讯作者. E-mail: sunyan@sjtu.edu.cn).

空间的约束,而首次积分是在状态空间取常数的,约束的性质不同,不可等同。

以往的保辛算法是基于 Lagrange 函数和变形能的^[2,4],实际中有的课题只能提供 Hamilton 函数,而无法给出 Lagrange 函数,例如非线性 Schrödinger 方程等。本文针对 Hamilton 非线性动力系统,应用混合能变分原理,提出保辛算法,然后引入参变量,通过对参变量的调整,达到能量守恒的目的,实现 Hamilton 系统保辛-保能算法。本文方法只需要有 Hamilton 函数就可以执行,这样就拓宽了保辛-保能算法的应用范围。

1 混合能的保辛算法

对于 Hamilton 非线性动力系统,若给出 Hamilton 函数为 $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, 则对偶方程

$$\dot{\mathbf{q}} = \partial H / \partial \mathbf{p} = \mathbf{A}\mathbf{q} + \mathbf{D}\mathbf{p}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\partial H / \partial \mathbf{q} = -\mathbf{B}\mathbf{q} - \mathbf{A}^T \mathbf{p} \quad (1)$$

是一般的时变非线性动力方程,难以分析求解,只能采用近似数值积分。如果是时不变线性系统,矩阵 $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{D}$ 是不变的。

动力学是初值问题,近似系统是离散的 Hamilton 系统,其对应的二类变量变分原理是

$$\delta \int_{t_0}^{t_f} [\mathbf{p}^T \dot{\mathbf{q}} - H(\mathbf{q}, \mathbf{p})] dt = 0. \quad (2)$$

可将时间划分为 $t_0 = 0, t_1 = \eta, t_2 = 2\eta, \dots, t_k = k\eta, \dots$, 当然 η 很小。假设用 $k^\#$ 表示时间区段 ($t_{k-1} \sim t_k$)。将泛函(2)离散。按著作[5] § 1.9 所述推论,时间区段 $k^\# : (t_{k-1} \sim t_k)$ 的混合能全微分为

$$\begin{cases} dV(\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{p}_k) = \mathbf{q}_k^T d\mathbf{p}_k + \mathbf{p}_{k-1}^T d\mathbf{q}_{k-1}, \\ \mathbf{p}_{k-1} = \partial V(\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{p}_k) / \partial \mathbf{q}_{k-1}, \quad \mathbf{q}_k = \partial V(\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{p}_k) / \partial \mathbf{p}_k. \end{cases} \quad (3)$$

混合能的区段合并变分原理为

$$\begin{aligned} V_{k-1, k+1}(\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{p}_{k+1}, t_{k-1}, t_{k+1}) = \min_{\mathbf{q}_k} [\max_{\mathbf{p}_k} [\mathbf{p}_k^T \mathbf{q}_k - V_{k-1, k}(\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{p}_k, t_{k-1}, t_k)] + \\ V_{k, k+1}(\mathbf{q}_k, \mathbf{p}_{k+1}, t_k, t_{k+1})]. \end{aligned} \quad (4)$$

区段混合能可表示为

$$\begin{cases} V(\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{p}_k) = -\mathbf{q}_{k-1}^T \mathbf{Q} \mathbf{q}_{k-1} / 2 + \mathbf{p}_k^T \mathbf{F} \mathbf{q}_{k-1} + \mathbf{p}_k^T \mathbf{G} \mathbf{p}_k / 2, \\ \mathbf{Q} = \mathbf{Q}(t_{k-1}, t_k), \quad \mathbf{F} = \mathbf{F}(t_{k-1}, t_k), \quad \mathbf{G} = \mathbf{G}(t_{k-1}, t_k), \\ \mathbf{q}_k = \mathbf{Q} \mathbf{q}_{k-1} + \mathbf{F}^T \mathbf{p}_k, \quad \mathbf{p}_{k-1} = \mathbf{F} \mathbf{q}_{k-1} + \mathbf{G} \mathbf{p}_k. \end{cases} \quad (5)$$

非线性系统时, $\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{Q}$ 是 $\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{p}_k$ 的函数。而 $\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{Q}$ 是可用区段长度 η 展开的:

$$\begin{cases} \mathbf{F}(\eta) = \mathbf{I} + \boldsymbol{\varphi}_1 \eta + \boldsymbol{\varphi}_2 \eta^2 + \boldsymbol{\varphi}_3 \eta^3 + \boldsymbol{\varphi}_4 \eta^4 + O(\eta^5), \\ \mathbf{G}(\eta) = \boldsymbol{\gamma}_1 \eta + \boldsymbol{\gamma}_2 \eta^2 + \boldsymbol{\gamma}_3 \eta^3 + \boldsymbol{\gamma}_4 \eta^4 + O(\eta^5), \\ \mathbf{Q}(\eta) = \boldsymbol{\theta}_1 \eta + \boldsymbol{\theta}_2 \eta^2 + \boldsymbol{\theta}_3 \eta^3 + \boldsymbol{\theta}_4 \eta^4 + O(\eta^5). \end{cases} \quad (6)$$

具体计算公式为

$$\begin{cases} \boldsymbol{\gamma}_1 = -\mathbf{D}, \quad \boldsymbol{\gamma}_2 = (\mathbf{A}\boldsymbol{\gamma}_1 + \boldsymbol{\gamma}_1 \mathbf{A}^T) / 2, \\ \boldsymbol{\gamma}_3 = (\mathbf{A}\boldsymbol{\gamma}_2 + \boldsymbol{\gamma}_2 \mathbf{A}^T - \boldsymbol{\gamma}_1 \mathbf{B}\boldsymbol{\gamma}_1) / 3, \quad \boldsymbol{\gamma}_4 = (\mathbf{A}\boldsymbol{\gamma}_3 + \boldsymbol{\gamma}_3 \mathbf{A}^T - \boldsymbol{\gamma}_2 \mathbf{B}\boldsymbol{\gamma}_1 - \boldsymbol{\gamma}_1 \mathbf{B}\boldsymbol{\gamma}_2) / 4, \\ \boldsymbol{\varphi}_1 = \mathbf{A}, \quad \boldsymbol{\varphi}_2 = (\mathbf{A}\boldsymbol{\varphi}_1 - \boldsymbol{\gamma}_1 \mathbf{B}) / 2, \\ \boldsymbol{\varphi}_3 = (\mathbf{A}\boldsymbol{\varphi}_2 - \boldsymbol{\gamma}_2 \mathbf{B} - \boldsymbol{\gamma}_1 \mathbf{B}\boldsymbol{\varphi}_1) / 3, \quad \boldsymbol{\varphi}_4 = (\mathbf{A}\boldsymbol{\varphi}_3 - \boldsymbol{\gamma}_3 \mathbf{B} - \boldsymbol{\gamma}_2 \mathbf{B}\boldsymbol{\varphi}_1 - \boldsymbol{\gamma}_1 \mathbf{B}\boldsymbol{\varphi}_2) / 4, \\ \boldsymbol{\theta}_1 = \mathbf{B}, \quad \boldsymbol{\theta}_2 = (\boldsymbol{\varphi}_1^T \mathbf{B} + \mathbf{B}\boldsymbol{\varphi}_1) / 2, \\ \boldsymbol{\theta}_3 = (\boldsymbol{\varphi}_2^T \mathbf{B} + \mathbf{B}\boldsymbol{\varphi}_2 + \boldsymbol{\varphi}_1^T \mathbf{B}\boldsymbol{\varphi}_1) / 3, \quad \boldsymbol{\theta}_4 = (\boldsymbol{\varphi}_3^T \mathbf{B} + \mathbf{B}\boldsymbol{\varphi}_3 + \boldsymbol{\varphi}_2^T \mathbf{B}\boldsymbol{\varphi}_1 + \boldsymbol{\varphi}_1^T \mathbf{B}\boldsymbol{\varphi}_2) / 4. \end{cases} \quad (7)$$

用混合能来积分,因为式(5)的展开式,这是区段变形能不具备的.从区段混合能转化到区段变形能(作用量)^[2]是

$$U(\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{q}_k) = \max_{\mathbf{p}_k} [\mathbf{p}_k^T \mathbf{q}_k - V(\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{p}_k)]. \quad (8)$$

不过实际中有些课题,只能提供区段混合能,而按式(8)提供区段变形能不容易.

离散后,根据式(5),利用区段 $k^\#:(t_{k-1} \sim t_k)$ 混合能的逐步积分算法可执行如下:

1) 已知 $\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{p}_{k-1}$,要积分区段 $k^\#:(t_{k-1} \sim t_k)$,以计算 $\mathbf{q}_k, \mathbf{p}_k$.

2) 根据已知的 Hamilton 函数,由方程(1)得到的 $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{D}$,通过式(7)和(6)计算 $\mathbf{F}(\boldsymbol{\eta}), \mathbf{G}(\boldsymbol{\eta}), \mathbf{Q}(\boldsymbol{\eta})$.

3) 通过方程组(5),联立求解得到 $\mathbf{q}_k, \mathbf{p}_k$.

4) 检验 Hamilton 函数的能量,一般不守恒,但相差很小.

5) 既然已经计算得到 $\mathbf{q}_k, \mathbf{p}_k$,则区段 $k^\#:(t_{k-1} \sim t_k)$ 的积分已经完成,可进入后面区段 $(k+1)^\#$ 时间区段的积分.

这样积分虽然保辛但因为没有参变量,故无法调整能量.但以往的保辛算法^[2,4]是基于变形能的,需要 Lagrange 函数;而以上算法只要有 Hamilton 函数 $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ 就可以执行.实际中有些课题只能提供 Hamilton 函数,例如非线性 Schrödinger 方程,等.

2 无阻尼 Duffing 弹簧保辛数值计算

就以 Duffing 弹簧为例来说明方法论.用具体的例题表述便于理解.说清楚无阻尼 Duffing 弹簧振动的求解,推广就容易了.无阻尼 Duffing 弹簧自由振动微分方程是

$$\ddot{q}(t) + [\omega_s^2 + \beta q^2]q(t) = 0, \quad (9)$$

初始条件为 $q(0)$ 和 $\dot{q}(0)$.

该方程有 Jacobi 椭圆函数的分析解^[6],这里不采用椭圆函数的分析解,而是进行离散数值求解.

方程(9)对应的 Hamilton 函数为

$$H(q, p) = (p^2 + \omega_s^2 q^2 + \beta q^4/2)/2. \quad (10)$$

正则对偶方程为

$$\dot{q} = \partial H / \partial p = p, \quad \dot{p} = -\partial H / \partial q = -(\omega_s^2 q + \beta q^3). \quad (11)$$

此时问题是 1 维的,只要将上节的公式黑体修改为白体就可以了.由式(11)得到

$$A = 0, \quad B = -(\omega_s^2 + \beta q^2), \quad D = 1. \quad (12)$$

计算 $B = -\omega_s^2 - \beta q^2$ 时,取 $q = q_{k-1}$.按照上节所述步骤,逐步积分,计算得到方程的解.

算例 1 考虑上述 Duffing 方程(9),取参数 $\omega_s = 0.2, \beta = 1.0$;初始条件为 $q(0) = 1.0, \dot{q}(0) = p(0) = 1.0$.在 0 s 到 20 s 区间上积分,时间步长为 $\eta = 0.02$.

虽然, Duffing 弹簧是 $n = 1$ 的系统,但推广到 n 维系统是直截了当的.计算结果如图 1、图 2.不过以上提出的算法只是保辛,并未保证算法能使首次积分也守恒,这点由图 3(图 4)可以看出,Hamilton 函数能量在积分过程中有波动,但相差不大.如何在保辛的前提下,又做到保能,在下一节中介绍.

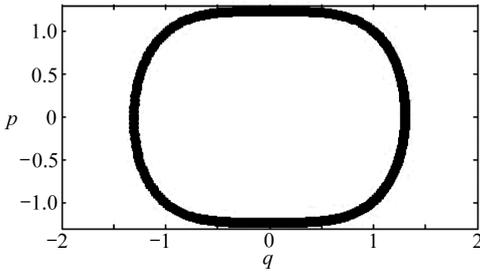


图 1 Duffing 方程相轨迹

Fig.1 Phase trajectory of the Duffing equation

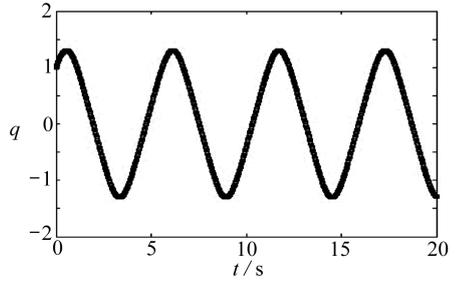


图 2 位移

Fig.2 Displacement

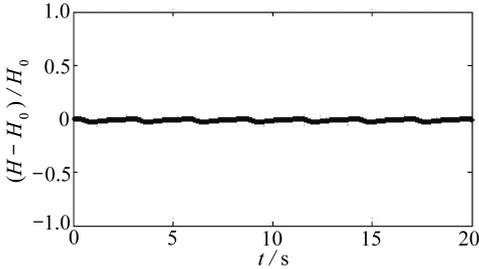


图 3 Hamilton 函数相对误差

Fig.3 Relative error of the Hamilton function

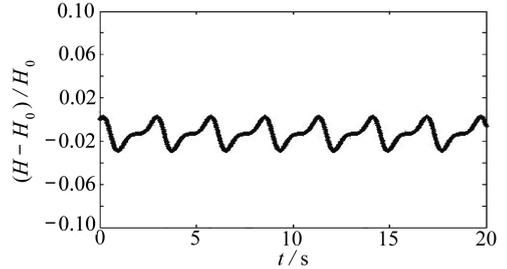


图 4 图 3 的放大图

Fig.4 Scaling-up of fig.3

3 保辛-保能算法

文献[2,4]给出了保辛-守恒算法,是基于 Lagrange 函数和区段变形能位移法的.上节算法则是基于区段混合能的.若想在保辛的基础上,要达到保能的目的,就要针对式(5)进行修改,即对应于守恒量引入参变量.然后就是调整参变量以使区段积分时,达到首次积分量的守恒.

回顾利用区段变形能的保辛-守恒算法,是运用区段变形能的积分的单点积分近似,积分点的选择可带上参变量的.这里仍然以 Duffing 弹簧为例,说明在本文提出的基于区段混合能的保辛守恒算法中,如何引入参变量,实现保辛-保能的算法.

在上一节中,对于公式(12) $B = -(\omega_s^2 + \beta q^2)$ 的计算时, q 取为端部值 q_{k-1} .而取端部值是极端情况.单点积分 q 可取区段 $k^\# : (t_{k-1} \sim t_k)$ 内任意点的值.实际操作时,在计算 B 时可设

$$\omega^2 = -(\omega_s^2 + \beta q^2), \quad (13)$$

为简单计,直接将 ω^2 就作为一个参变量.因当前只考虑能量的守恒,所以一个参变量 ω^2 就可以了.这样,已经可进行保辛-保能计算了.

通过能量守恒求解参变量 ω^2 , 必然导致迭代.迭代步骤可设计如下:

- 1) 已知 q_{k-1}, p_{k-1} , 积分区段 $k^\# : (t_{k-1} \sim t_k)$, 设定初始参变量 ω^2 .
- 2) 根据参变量 ω^2 , 确定由方程(12)得到的 A, B, D , 通过式(7)和(6)计算 $F(\eta), G(\eta), Q(\eta)$.
- 3) 已知 q_{k-1}, p_{k-1} , 通过方程组(5), 联立求解得到 q_k, p_k .
- 4) 根据 q_k, p_k , 计算 t_k 处的 Hamilton 函数的能量 $H_k(q_k, p_k)$, 并计算与初始 Hamilton 函数之差 $\Delta H(\omega^2) = H_k(q_k, p_k) - H_0(q_0, p_0)$. 如果 ΔH 满足指定精度, 则迭代结束, 区段 $k^\# : (t_{k-1} \sim$

t_k) 的积分完成,可进入后面 $(k + 1)^{\#}$ 时间区段的积分.否则,修改新的参变量 ω^2 .

5) 参变量 ω^2 的修改方法可以是,根据前后两次的 ω^2 和对应的 Hamilton 函数值,通过割线按直线插值,确定新的参变量 ω^2 值,然后返回步骤 2)。

由于用了混合能变分原理,保辛是有保证的^[2].这里通过参变量的调整,经过迭代求解,在保辛的情况下,使得在积分格点处能量守恒条件得以保证.因此可称为“保辛-保能算法”。

算例 2 考虑上述 Duffing 方程,取参数 $\omega_s = 0.2$, $\beta = 1.0$;初始条件为 $q(0) = 1.0$, $p(0) = 1.0$.在 0 s 到 20 s 区间上积分,时间步长为 $\eta = 0.1$.

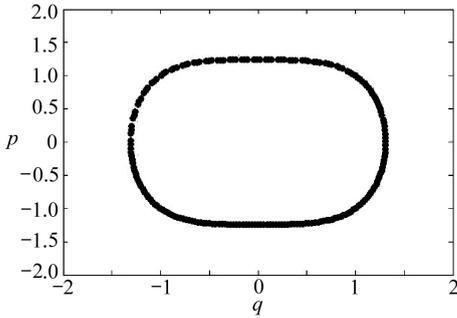


图 5 Duffing 方程相轨迹

Fig.5 Phase trajectory of the Duffing equation

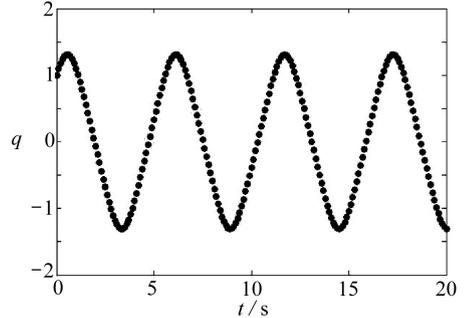


图 6 位移

Fig.6 Displacement

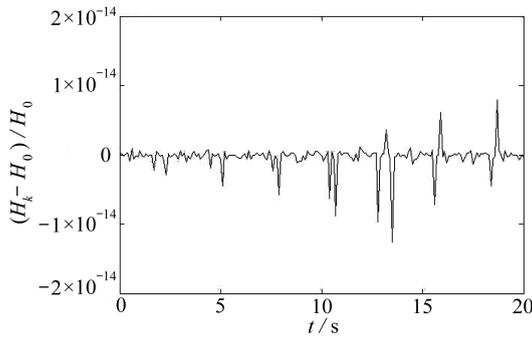


图 7 Hamilton 函数相对误差

Fig.7 Relative error of the Hamilton function

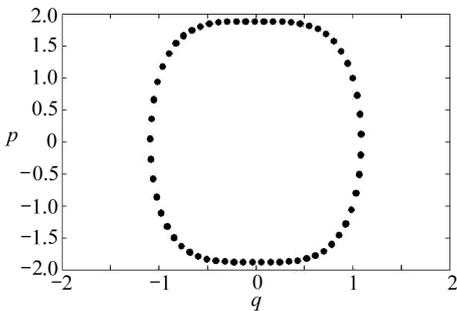


图 8 Duffing 方程相轨迹

Fig.8 Phase trajectory of the Duffing equation

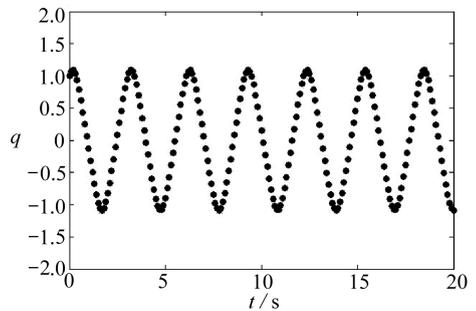


图 9 位移

Fig.9 Displacement

计算结果如图 5 和图 6,与文献[4]完全一致.本文方法得到的 Hamilton 函数能量在积分

格点上相对误差达到 10^{-14} (如图7),已经接近计算机精度.如果计算机系统精度更高,则 Hamilton 函数也能达到更高的精度.

算例 3 Duffing 方程同上,取参数 $\omega_s = 0.2$, $\beta = 5.0$,此时非线性程度明显较深;初始条件为 $q(0) = 1.0$, $p(0) = 1.0$.在 0 s 到 20 s 区间上积分,时间步长为 $\eta = 0.1$.

计算结果如图 8 和图 9,由算例 3 可以看出,本文提出的保辛-保能算法对于非线性程度较深时,数值结果依然很好,在积分格点上 Hamilton 函数的相对误差在 10^{-14} 量级,如图 10.说明本文算法确实达到了保辛-保能的目的.

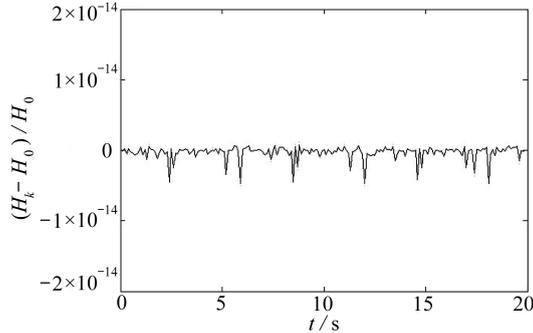


图 10 Hamilton 函数相对误差

Fig.10 Relative error of the Hamilton function

4 结 论

本文采用混合能变分原理,保辛是在保证的.引入参变量,并通过调整参变量,使能量在积分格点上也达到了守恒.所以本文提出的算法为保辛-保能算法.本文通过 Duffing 弹簧算例,证明了方法的有效和计算精度.虽然,Duffing 弹簧只是一个简单例题,但方法比较一般,可以推广到 n 维系统.

参考文献(References):

- [1] Hairer E, Lubich C, Wanner G. *Geometric-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*[M]. 2nd ed. Springer, 2006.
- [2] 钟万颢, 高强, 彭海军. 经典力学——辛讲[M]. 大连: 大连理工大学出版社, 2013. (ZHONG Wan-xie, GAO Qiang, PENG Hai-jun. *Classical Mechanics—Its Symplectic Description*[M]. Dalian: Dalian University of Technology Press, 2013. (in Chinese))
- [3] Zhong G, Marsden J E. Lie-Poisson Hamilton-Jacobi theory and Lie-Poisson integrators[J]. *Physics Letter A*, 1988, **113**(3): 134-139.
- [4] 高强, 钟万颢. Hamilton 系统的保辛-守恒积分算法[J]. 动力学与控制学报, 2009, **7**(3): 193-199. (GAO Qiang, ZHONG Wan-xie. The symplectic and energy preserving method for the integration of Hamilton system[J]. *Journal of Dynamics and Control*, 2009, **7**(3): 193-199. (in Chinese))
- [5] 钟万颢. 应用力学的辛数学方法[M]. 北京: 高等教育出版社, 2006. (ZHONG Wan-xie. *Symplectic Solution Methodology in Applied Mechanics*[M]. Beijing: Higher Education Press, 2006. (in Chinese))

- [6] 高本庆. 椭圆函数及其应用[M]. 北京: 国防工业出版社, 1991. (GAO Ben-qing. *Ellipse Function and Its Application*[M]. Beijing: National Defence Industry Press, 1991. (in Chinese))

Numerical Integration Algorithm of the Symplectic-Conservative and Energy-Preserving Method

SUN Yan¹, GAO Qiang², ZHONG Wan-xie^{1,2}

(1. *Department of Engineering Mechanics, School of Naval Architecture, Ocean and Civil Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, P.R.China;*

(2. *State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment (Dalian University of Technology); Department of Engineering Mechanics, Dalian University of Technology, Dalian, Liaoning 116024, P.R.China)*

(Contributed by ZHONG Wan-xie, M. AMM Editorial Board)

Abstract: A symplectic-conservative algorithm was proposed for the nonlinear dynamic Hamilton systems with the application of the mixed energy variational principle. Based on this, an iterative algorithm for the nonlinear problem was designed in which a parametric variable was introduced into the Hamilton system, and the goal of energy preservation was realized at the integration grid nodes through parametric adjustments. The numerical examples of the undamped Duffing spring systems show that, compared with the only symplectic-conservative algorithm, the proposed symplectic-conservative and energy-preserving algorithm bears far higher accuracy in the simulation of the nonlinear dynamic Hamilton systems

Key words: symplectic-conservative; energy-preserving; Hamilton system; interval mixed energy; parametric variable

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China(51278298); The National High-tech R&D Program of China (863 Program)(2012AA022606)