Hamilton 方程的变分离散方法

王雨顺[1,2]，王斌[2]，王云峰[2]，杨宏伟[2]

(1.南京师范大学数学与计算机科学学院，210097，江苏，南京)

(2.中国科学院大气物理所大气科学与地球流体力学数值模拟国家重点实验室，100029，北京)

[摘要]　讨论了经典 Hamilton 系统的变分原理，通过离散方程所对应的 Lagrangian 函数的方法，由离散的变分原理得到了一系列的辛差分算法，其中包括传统的辛格式，如：辛 Euler 格式和中点格式.

[关键词]　Hamilton 系统，辛格式，离散变分原理

[中图分类号]O176，　[文献标识码]A，　[文章编号]1001-4616(2004)02-0001-04

0　引言

自从冯康[1]等提出 Hamilton 系统辛算法以来，辛算法得到了广泛的关注和发展.如今有限维的 Hamilton 系统的辛算法的构造理论和分析理论已基本成熟.其构造方法主要有三类[2]：生成函数法，复合构造法和 Runge-Kutta 方法.由于优异的稳定性和长时间跟踪能力等优点，实际计算中许多领域都在研究和使用辛算法[3,4].变分方法是既古老又在现代科学中具有广泛应用的有力工具.计算方法中的有限元方法也是基于变分的思想.变分在 Lagrange 力学中的一个重要应用就是 Hamilton 最小作用原理，即：函数 $\boldsymbol{q}(t)=(q_1,q_2,\cdots,q_n)^T$ 是作用泛函

$$S(q(t))=\int_a^b L(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}})\mathrm{d}t, \tag{1}$$

的极值点当且仅当 $\boldsymbol{q}(t)$ 是下列 S 所对应的 Euler-Lagrangian 方程的解，

$$\frac{\partial L}{\partial q_i}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)=0,\ i=1,2,\cdots,n. \tag{2}$$

实际上，上述方程的左端就是作用泛函 S 对其自变量 q_i 的变分导数 $\frac{\delta S}{\delta q_i}$. Veselov 离散的变分原理是首先离散作用泛函，然后通过在离散点上求极值导出对应 Euler-Lagrangian 方程的离散格式，具体参考文献[5].

本文讨论构造辛格式另外一种方法，即把离散变分的方法应用于 Hamilton 方程，推导出一系列差分格式，我们证明这些格式是辛格式.

1　Hamilton 方程的变分原理及其离散

由 Darboux 定理，总可以找到适当的典则坐标，$z=(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})^T=(p_1,p_2,\cdots,p_n,q_1,q_2,\cdots,q_n)^T\in\boldsymbol{R}^{2n}$.将有限维 Hamilton 系统写成如下的形式：

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}=J^{-1}\nabla_z H,\ J=\begin{pmatrix}0 & I_n\\ -I_n & 0\end{pmatrix}. \tag{3}$$

方程(3)对应标准的辛形式 $\omega_J=\mathrm{d}\boldsymbol{p}\wedge\mathrm{d}\boldsymbol{q}=\sum_i \mathrm{d}p_i\wedge\mathrm{d}q_i$，$\wedge$ 表示普通微分形式的外积.对于点 z 的切空间上的任意两个向量 ξ,η，有

$$\omega_J(\xi,\eta)_z=\xi' J\eta.$$

设 g_t 是 Hamilton 系统(3)解相流，即解可以表示成

收稿日期：2004-02-07.

基金项目：国家自然科学基金创新群体(40221503)、国家基础研究重点发展规划(1999032081)、国家自然科学基金(40105012)和中科院"百人"计划资助项目.

作者简介：王雨顺，1972-，博士，南京师范大学数学与计算机科学学院讲师，主要从事保结构算法及其应用研究，E-mail：wangyushun@njnu.edu.cn

$$z(t) = g_t z(0).$$

所谓保辛结构就是 g_t 是典则变换(或辛变换),满足

$$g_t^* \omega_J = \omega_J,$$

其中 g_t^* 表示 g_t 的拉回映射.若离散以后的步进算子仍能保持上述性质,则称该离散为辛离散,或称离散对应的算法为辛算法.

下面我们讨论 Hamilton 系统(3)的类似于 Lagrangian 系统的变分原理.令 Lagrangian 函数为 $L = \boldsymbol{p}\dot{\boldsymbol{q}} - H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})$,则作用泛函就为

$$S(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = \int_a^b L\mathrm{d}t = \int_a^b [\boldsymbol{p}\dot{\boldsymbol{q}} - H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})]\mathrm{d}t. \tag{4}$$

设 $\delta\boldsymbol{p},\delta\boldsymbol{q}$ 分别是 $\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}$ 的变分,对 S 作变分,具体步骤可以参照文献[6],

$$\mathrm{d}S\cdot(\delta\boldsymbol{p},\delta\boldsymbol{q}) = \int_a^b [(\dot{\boldsymbol{q}} - \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}})\delta\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\dot{\boldsymbol{q}} - \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}}\delta\boldsymbol{q}]\mathrm{d}t = \int_a^b [(\dot{\boldsymbol{q}} - \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}})\delta\boldsymbol{p} - (\boldsymbol{p} + \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}})\delta\boldsymbol{q}]\mathrm{d}t + \boldsymbol{p}\delta\boldsymbol{q}|_a^b.$$

限定固定边界,$\boldsymbol{p}\delta\boldsymbol{q}|_a^b = 0$,由 $dS = 0$ 我们可以得到 Hamilton 系统(3)

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{p}} &= \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}},\\ \dot{\boldsymbol{q}} &= -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}.\end{aligned} \tag{5}$$

由边界项定义 Cartan 形式 $\theta_L = \boldsymbol{p}\mathrm{d}\boldsymbol{q}$,作用微分算子 d 得到辛形式 $\omega = \mathrm{d}\theta_L = \mathrm{d}\boldsymbol{p}\wedge\mathrm{d}\boldsymbol{q}$.

用时间步长 $\tau = \frac{b-a}{n}$ 平均划分区域$[a,b]$,两顶点分别为第 0 个和 n 格点,$(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})$ 在第 i 个格点上的近似值记为$(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{q}_i)$.因为 Lagrangian 函数中含有 $\dot{\boldsymbol{q}}$,所以至少要用两个点的函数值才能近似,那么 Lagrangian 函数的离散空间就为 $\Omega = \boldsymbol{R}^{2n}\times\boldsymbol{R}^{2n}$.$\Omega$ 中的任一点$(\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{q}_k,\boldsymbol{p}_{k+1},\boldsymbol{q}_{k+1})$对应着 $\dot{\boldsymbol{q}}$ 的离散形式为 $\frac{\boldsymbol{q}_{k+1}-\boldsymbol{q}_k}{\tau}$.作用泛函的离散形式就为定义在 Ω 上的离散 Lagrangian 函数的和式,记为 S_D,

$$S_D = \sum_{k=0}^{n-1} L(\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{q}_k,\boldsymbol{p}_{k+1},\boldsymbol{q}_{k+1})\tau. \tag{6}$$

类似于连续情形的泛函 S 求变分,我们求函数 S_D 的微分.

$$\begin{aligned}&\mathrm{d}S_D(\boldsymbol{p}_0,\cdots,\boldsymbol{p}_n,\boldsymbol{q}_0,\cdots,\boldsymbol{q}_n)\cdot(\delta\boldsymbol{p}_0,\cdots,\delta\boldsymbol{p}_n,\delta\boldsymbol{q}_0,\cdots,\delta\boldsymbol{q}_n)\\ &= \sum_{k=0}^{n-1}(D_1L(v_k)\delta\boldsymbol{p}_k + D_2L(v_k)\delta\boldsymbol{q}_k + D_3L(v_k)\delta\boldsymbol{p}_{k+1} + D_4L(v_k)\delta\boldsymbol{q}_{k+1})\tau\\ &= \sum_{k=1}^{n-1}[(D_1L(v_k) + D_3L(v_{k-1})\delta\boldsymbol{p}_k + D_2L(v_k) + D_4L(v_{k-1})\delta\boldsymbol{q}_k)\tau]\\ &\quad + [D_1L(v_0)\delta\boldsymbol{p}_0 + D_3L(v_{n-1})\delta\boldsymbol{p}_n + D_2L(v_0)\delta\boldsymbol{q}_0 + D_4L(v_{n-1})\delta\boldsymbol{q}_n]\tau,\end{aligned} \tag{7}$$

其中 D_iL 表示 L 对第 i 个变量的导数,$v_k = (\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{q}_k,\boldsymbol{p}_{k+1},\boldsymbol{q}_{k+1}),k = 0,1,\cdots,n-1$.

固定$(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{q}_0),(\boldsymbol{p}_n,\boldsymbol{q}_n)$,即(7)式中边界项为 0,我们可以得到离散的 Hamilton 方程,

$$\begin{aligned}D_1L(v_k) + D_3L(v_{k-1}) &= 0,\\ D_2L(v_k) + D_4L(v_{k-1}) &= 0.\end{aligned} \tag{8}$$

(8)就是 Hamilton 系统(5)的差分格式.由(7)式中的边界项,可以定义 Ω 上的两个一形式:

$$\theta_L^-(v_k) = D_1L(v_k)\mathrm{d}\boldsymbol{p}_k + D_2L(v_k)\mathrm{d}\boldsymbol{q}_k,$$
$$\theta_L^+(v_k) = D_3L(v_k)\mathrm{d}\boldsymbol{p}_{k+1} + D_4L(v_k)\mathrm{d}\boldsymbol{q}_{k+1}.$$

从而我们得到离散的辛形式 $\omega_D = \mathrm{d}\theta_L^-$.

定理　差分格式(8)是 Hamilton 系统(5)的辛格式.

证明　设差分格式(8)的步进算子为 Φ,即:$v_k = \Phi(v_{k-1})$.只要证明 $\Phi^*\omega_D = \omega_D$.

$$\begin{aligned}\Phi^*\omega_D = \Phi^*(\mathrm{d}\theta_L^-) &= \Phi^*\mathrm{d}[D_1L(v_k)\mathrm{d}\boldsymbol{p}_k + D_2L(v_k)\mathrm{d}\boldsymbol{q}_k] = \mathrm{d}[\Phi^*(D_1L(v_k)\mathrm{d}\boldsymbol{p}_k + D_2L(v_k)\mathrm{d}\boldsymbol{q}_k]\\ &= \mathrm{d}[D_1L\circ\Phi(v_{k-1})\Phi^*(\mathrm{d}\boldsymbol{p}_k) + D_2L\circ\Phi(v_{k-1})\Phi^*(\mathrm{d}\boldsymbol{q}_k)]\end{aligned}$$

$$= -\mathrm{d}[D_3L(v_k)\mathrm{d}\boldsymbol{p}_{k+1} + D_4L(v_k)\mathrm{d}\boldsymbol{q}_{k+1}] = -\mathrm{d}\theta_L^+ .$$

从 θ_L^- 和 θ_L^+ 的表达式可以看出

$$\mathrm{d}L = \theta_L^- + \theta_L^+ . \tag{9}$$

上式作用微分算子 d 有：$\mathrm{dd}L = \mathrm{d}\theta_L^- + \mathrm{d}\theta_L^+ = 0$，即 $\mathrm{d}\theta_L^- = -\mathrm{d}\theta_L^+$. 所以我们就有：

$$\Phi^* \omega_D = -\mathrm{d}\theta_L^+ = -\mathrm{d}\theta_L^- = \omega_D .$$

下面看一些具体的例子.

例 1 若取离散 Lagrangian 函数为

$$L(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{p}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+1}) = \boldsymbol{p}_k \frac{\boldsymbol{q}_{k+1} - \boldsymbol{q}_k}{\tau} - H(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{q}_k),$$

将上述 L 代入(8)，我们得到经典的辛 Euler 格式

$$\begin{aligned} \frac{\boldsymbol{q}_{k+1} - \boldsymbol{q}_k}{\tau} &= \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{q}_k), \\ \frac{\boldsymbol{p}_{k+1} - \boldsymbol{p}_k}{\tau} &= -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}}(\boldsymbol{p}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+1}). \end{aligned} \tag{10}$$

当 Hamilton 系统为可分系统时，即：$H(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{q}_k) = f(\boldsymbol{p}_k) + g(\boldsymbol{q}_k)$，格式(10) 就是 Patrition-Runge-Kutta 辛格式类和多级显辛格式类[7] 中最简单的格式.

例 2 若取离散 Lagrangian 函数为

$$L(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{p}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+1}) = \boldsymbol{p}_{k+\frac{1}{2}} \frac{\boldsymbol{q}_{k+1} - \boldsymbol{q}_k}{\tau} - H(\boldsymbol{p}_{k+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k+\frac{1}{2}}),$$

其中，$\boldsymbol{p}_{k+\frac{1}{2}} = \dfrac{\boldsymbol{p}_k + \boldsymbol{p}_{k+1}}{2}$，$\boldsymbol{q}_{k+\frac{1}{2}} = \dfrac{\boldsymbol{q}_k + \boldsymbol{q}_{k+1}}{2}$.

同样将代入(8)，我们得到

$$\begin{aligned} \frac{\boldsymbol{q}_{k+1} - \boldsymbol{q}_k}{\tau} + \frac{\boldsymbol{q}_k - \boldsymbol{q}_{k-1}}{\tau} &= \frac{1}{2}\left[\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}(\boldsymbol{p}_{k+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}(\boldsymbol{p}_{k-\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k-\frac{1}{2}})\right], \\ \frac{\boldsymbol{p}_{k+1} - \boldsymbol{p}_k}{\tau} + \frac{\boldsymbol{p}_k - \boldsymbol{p}_{k-1}}{\tau} &= -\frac{1}{2}\left[\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}}(\boldsymbol{p}_{k+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}}(\boldsymbol{p}_{k-\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k-\frac{1}{2}})\right], \end{aligned} \tag{11}$$

上述格式(11) 实际上就是中点格式

$$\begin{aligned} \frac{\boldsymbol{q}_{k+1} - \boldsymbol{q}_k}{\tau} &= \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}(\boldsymbol{p}_{k+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k+\frac{1}{2}}), \\ \frac{\boldsymbol{p}_{k+1} - \boldsymbol{p}_k}{\tau} &= -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}}(\boldsymbol{p}_{k+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k+\frac{1}{2}}). \end{aligned}$$

例 3 若取离散 Lagrangian 函数为

$$L(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{p}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+1}) = \boldsymbol{p}_k \frac{\boldsymbol{q}_{k+1} - \boldsymbol{q}_k}{\tau} - H(\boldsymbol{p}_{k+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k+\frac{1}{2}}),$$

得到如下辛格式

$$\begin{aligned} \frac{\boldsymbol{q}_{k+1} - \boldsymbol{q}_k}{\tau} &= \frac{1}{2}\left[\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}(\boldsymbol{p}_{k+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}(\boldsymbol{p}_{k-\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k-\frac{1}{2}})\right], \\ \frac{\boldsymbol{p}_{k+1} - \boldsymbol{p}_k}{\tau} &= -\frac{1}{2}\left[\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}}(\boldsymbol{p}_{k+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}}(\boldsymbol{p}_{k-\frac{1}{2}}, \boldsymbol{q}_{k-\frac{1}{2}})\right]. \end{aligned} \tag{12}$$

我们还可以利用例 1，例 2 和例 3 中的离散的 Lagrangian 函数作加权平均作为新的离散 Lagrangian 函数，代入(8) 得到一系列辛格式. 我们没有给出数值试验，是因为本文的目的只是为了说明一种构造方法，而且有关说明辛格式优越性的数值比较试验已经出现在大量的文献中.

2 结论和讨论

我们利用 Hamilton 系统的变分原理及其离散形式构造了一系列的辛格式，这是一种构造辛算法的不同于传统方法的新方法. 我们只是作了初步讨论，有关的许多问题值得进一步讨论. 例如：从文章的讨论可以看出，格式的精度不超过 2 阶，如何提高？我们可以利用复合的方法在所构造的辛格式基础上提高精

度,但问题是如何系统地利用这种变分方法构造高精度的辛格式;我们只利用相邻两点离散 Lagrangian 函数,能不能多用些点? 这样既可以得到更多的辛格式,又可以提高精度,但如何保证格式的辛性质? Lagrangian 力学中变分原理从经典力学到场论的推广自然地把常微分系统推广到偏微分系统.现在,多辛 Hamilton 偏微分系统非常热门,能不能把上述方法作直接推广构造多辛格式? 还有,Hamilton 系统除了辛性质以外,一般还有能量守恒等其他性质,如何利用该方法构造既辛又有其他守恒性质的差分方法?

[参考文献]

[1] Feng Kang. On difference schemes and symplectic geometry[A]. Feng K. Proc 1984 Beijing Symp Diff Geometry and Diff Equations [C]. Beijing: Science Press, 1984. 42—58.

[2] Sanz-Serna J M, Calvo M P. Numerical Hamiltonian System[M]. London: Chapman London, 1994.

[3] 李延欣,丁培柱. A_2B 模型分子经典轨迹的辛算法计算[J]. 高等学校化学学报,1994,15(8):1181—1186.

[4] 王斌,曾庆存,季仲贞.平方守恒系统和 Hamilton 系统[J].中国科学(A 辑),1995,25(7):765—770.

[5] Veselov A P. Integrable discrete-time systems and difference iperators[J]. Funkts Anal Prilozhen, 1988, 22(2): 1—13.

[6] Wang Y S, Wang B, Ji Z Z, *et al*. High order symplectic schemes for the sine-Gordon equation[J]. Journal of the Physics of Japan, 2003, 72(11): 2731—2736.

[7] Qin M Z, Zhang M Q. Multi-stage symplectic schemes of two kinds of Hamiltonian systems for wave equation[J]. Computers Math Applic, 1990, 19(10): 51—62.

Variational Discrete Method for Hamiltonian Systems

Wang Yushun[1,2], Wang Bin[2], Wang Yunfeng[2], Yang Hongwei[2]

(1. School of Mathematics and Computer Science, Nanjing Normal University, 210097, Nanjing, China)

(2. State Key Laboratory of Numerical Modeling for Atmospheric Sciences and Goephysical Fluid Dynamics, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Science, 100029, Beijing, China)

Abstract: The variational principle of the classical Hamiltonian systems is discussed. Based on the discrete variational principle, a series of symplectic difference algorithms, which include some widely used symplectic schemes such as the symplectic Euler scheme and the midpoint scheme are constructed by discreting the corresponding Lagramgian functions.

Key words: Hamiltonian systems, symplectic scheme, discrete variational principle

[责任编辑:陆炳新]