

辛算法的发展历史与现状

曾文平 孔令华

(华侨大学数学系, 福建 泉州 362011)

摘要 Hamilton 系统是用来描述无耗散的物理过程与物理现象的一种力学系统. 辛几何算法是保结构算法中的一种, 国内外学者在这一领域的研究, 取得了丰硕的成果. 文中介绍针对 Hamilton 系统的辛几何算法发展的简要历史、研究现状和未来发展与应用, 尤其是国内学者在这一领域的主要工作.

关键词 Hamilton 系统, 辛算法, 进展研究

中图分类号 O 241.82-1

文献标识码 A

1 早期的工作

19 世纪, 英国著名物理学家、数学家 Hamilton 提出了 Hamilton 系统

$$\frac{dz}{dt} = J^{-1} \nabla_z H(z), \quad (1)$$

其中 $z = [p_1, p_2, \dots, p_n, q_1, q_2, \dots, q_n]^T \in \mathbb{R}^{2n}$, $H(z)$ 为 Hamilton 函数, J 为 $2n$ 阶反对称矩阵.

Hamilton 系统(1)它具有两个重要性质. (1) Hamilton 量 $H(z)$ 是守恒量. (2) 对应的流形是辛流形, 即保持微分 2-形式为 $\omega^2 = \sum_{i=1}^n dp_i \wedge dq_i = \text{constant}$ 也就是对应的流形是保持面积不变的.

一切保守的无耗散的物理过程与物理现象, 我们都可以用 Hamilton 系统来描述. 从而, 它能广泛地用于描述自然现象, 并在自然界中具有普遍性. 辛性是 Hamilton 系统的基本特征之一, 然而在用传统数值方法模拟 Hamilton 系统时, 此特征往往被破坏. 由于这一重要性质的破坏, 常常使数值模拟失败, 特别是在长时间的数值模拟之后, 使问题的面目全非. 从而, 寻找一种保持 Hamilton 系统辛结构的算法成为必要, 具有重要的实际与理论意义. 我们称能够保持 Hamilton 系统辛结构的算法为辛算法. 对辛算法的研究有 3 位先行者, 他们分别是 Vogelaere, Ruth 和冯康.

1956 年 4 月, Vogelaere 在美国海军的一份秘密报告^[1]的摘要中, 写到 Hamilton 方程从时刻 t_0 到时刻 t_1 之间的变换是接触性变换. 他在这份报告中, 还给出了能够保持接触变换性质的 Hamilton 方程的积分变换. Vogelaere 在这份秘密报告中所说的接触性变换, 就是我们现在通常所说的辛变换. 此份报告主要给出了两个辛格式, 但它并没有给出计算实例. 由于篇幅所限, 我们在此不列出这两个格式. Vogelaere 的报告是美国海军的一份秘密报告, 一直不为人所知, 因而未能产生多大的学术影响. 在以后的将近 30 年中, 没有人继续在这一领域里进行研究. 1983 年, Ruth 公开发表了第 1 篇 Hamilton 系统辛算法的论文^[2]. 他构造 Hamilton 系统辛算法的思想是独立于 Vogelaere 的. 在这篇论文中, 他构造了可分 Hamilton 系统(即 Hamilton 函数可写成形式 $H(p, q) = T(p) + V(q)$ 的 Hamilton 系统)的一阶、二阶和三阶辛格式.

1984 年, 在北京举行的国际微分方程与微分几何会议上, 我国已故数学家冯康先生作了题为“差分格式与辛几何”的报告^[3]. 首次系统地提出了基于辛几何的辛算法.

收稿日期 2003-12-17

作者简介 曾文平(1940-), 男, 教授, 主要从事计算数学的研究. E-mail: zengwp@hqu.edu.cn

基金项目 国务院侨务办公室科研基金资助项目(02QZR07)

2 单辛算法的进展

自从冯康 1984 年的报告后,他和他的研究小组在这一领域取得了斐然的成就.首先,对 Hamilton 系统单辛算法得到了系统的理论框架.其次,得到了构造 Hamilton 系统单辛算法的方法,特别是系统地提出了用生成函数法构造单辛算法.再次,构造性地给出了得到任意阶精度的辛差分格式的方法,等等.这些都是开创性的工作,受到国际同行的高度评价.由于篇幅所限,且冯康及其所领导的研究小组的成果丰硕,我们在此只介绍他们的部分主要工作.具体情况可以参考有关文献 [3~12],特别是《冯康文集 II》^[9],里面概括了冯康在这一领域的主要工作.

在文 [4] 中,冯康证明了 Euler 中点格式与针对可分 Hamilton 系统的交错格式,并得出均是辛格式的结论.即

$$\frac{1}{h}(z^{k+1} - z^k) = J^{-1} H_z \left(\frac{1}{2}(z^{k+1} + z^k) \right), \quad (2)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{h}(p^{k+1} - p^k) &= - \frac{\partial V(q^{k+1/2})}{\partial q}, \\ \frac{1}{h}(q^{k+1} - q^k) &= - \frac{\partial T(p^{k+1/2})}{\partial p}. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

在文 [7] 中,得到了线性 Hamilton 系统的格式为辛格式的充要条件,还得到了一维与多维空间变量的双曲型方程的辛格式与多层格式为辛格式的充要条件.在辛算法创始初期,一般认为传统算法均不可能是辛的.但这一观点在 1988 年前后被否认了. Lasagni, Sanz-Serna 和 Suris 先后独立地用不同方法,证明了 Runge-Kutta 格式为辛格式的如下定理^[13~15].

定理 一个隐式的 s 级 Runge-Kutta 格式为辛格式的充分条件是对应的矩阵 $M = (m_{ij}) = 0$, 即

$$m_{ij} = b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad i, j = 1, 2, \dots, s. \quad (4)$$

在某些特定情况下,此条件还是必要的^[9].

这一重要定理的证明为辛算法的发展提供了广阔的空间.用生成函数法虽然可以构造任意阶精度的辛格式,但用此方法构造高阶精度的格式时计算量非常大.由于计算量的迅速增加,舍入误差积累也必然增大,因而可操作性不是很强.这一定理的证明为我们寻找高阶辛格式提供了途径.众多的学者开始研究辛 RK 方法.现在已有很多构造高阶辛 RK 格式的方法.在文 [16], [17] 中,孙耿系统地得到了高阶辛 RK 格式和辛块 RK 格式的方法.在构造高阶辛 RK 格式和辛块 RK 格式方面他做了大量的工作.在文 [18] 中,1993 年唐贻发证明了线性多步法不可能是辛的.在文 [19] 中,1997 年 Hairer 与 Leone 证明了在一般线性方法中只有 Runge-Kutta 方法才可能是辛的,也就是线性多步法不可能是辛的.在文 [20] 中,蒋长锦研究了如何计算四级四阶隐式对角辛 Runge-Kutta 的参数.

正当辛算法迅速发展时,其奠基人冯康先生于 1993 年不幸过早地逝世了,使其发展受到很大的挫折.冯康的突出贡献受到国际好评与肯定.他曾应邀参加了许多重要国际会议并在会上发言作报告.他的学术影响是深远的.国际上许多著名的辛算法的专家学者都或多或少地受到他直接或间接的影响,如 Sanz-Serna, Marsden 等.著名美国科学院院士、美国前数学会主席 Lax 对他作出高度评价.认为“冯康对中国科学发展的重要性是不可多得的.他通过自己及学生的研究工作,把中国引上了计算数学和应用数学的轨道.冯康教授的声望是国际性的,在各种国际会议上我们都记得他短小的身材,散发着活力的慧眼以及充满灵感的面孔.整个数学界里,他众多的朋友将怀念他”.

3 多辛算法的进展

单辛算法是对只有一个辛结构的 Hamilton 系统而言的.若一个微分方程有两个或多个辛结构的 Hamilton 系统,可认为也能构造出保持它的所有辛结构的数值方法.我们称能够保持 Hamilton 系统的多个辛结构数值方法为多辛算法.冯康的去逝,使辛算法受到很大的挫折,并曾一度陷于停滞不前的状态.然而,不久后经过国内外许多学者(如 Bridges, Reich, Marsden, 以及秦孟兆、洪佳林、尚在久)的不懈努力,使这一领域自从上世纪 90 年代中后期以来,又取得了丰硕的成果.他们开创性地发展了多辛算

法. Bridges, Reich, Marsden 等在这一领域做了开创性的工作^[21~27].

多辛 Hamilton 系统的一般形式为^[28]

$$M(x, t) z_t + \sum_{i=1}^m K_i(x, t) z_{x_i} = \nabla S(z, x, t), \quad (5)$$

其中 $M(x, t)$, $K_i(x, t)$ 为 n 阶反对称矩阵, $M_t(x, t) = K_{ix_i}(x, t) = 0$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)^T \in \mathbf{R}^m$, $z \in \mathbf{R}^n$, $S(z, x, t)$ 为光滑函数. 式(5)满足多辛守恒律

$$\tilde{I}_t(x, t) = + \sum_{i=1}^m K_i(x, t) = 0, \quad (6)$$

其中 $\tilde{I}(x, t) = [M(x, t) u, v]$, $K_i(x, t) = [K_i(x, t) u, v]$. 我们称能够保持式(6)的离散形式的格式为多辛格式.

现在对式(5)已构造了很多多辛格式,如时间和空间方向分别为 r 级与 s 级的多辛 Gauss-Legendre 方法^[22~24]、多辛有限体积法^[25]和多辛谱方法^[26]. 其中最为常用的是 Euler 中点格式,它是多辛 Gauss-Legendre 方法的 $r = s = 1$ 的特殊情形,也是多辛有限体积法的平形四边形单元为矩形单元的特殊情形. 消去中间变量后这一格式即为 Preissmann 格式. 现已证明多辛格式在非线性的情形下,不可能保持离散的局部能量守恒或离散的局部动量守恒. 需要指出的是 Bridges 和 Reich 等,他们是从多辛守恒律关于时间与空间方向辛结构的保持性的角度得到的理论框架;而 Marsden 等,则是从多辛几何与 Lagrange 力学的角度构造的理论框架^[27].

无论是 Bridges, Reich 的多辛算法的理论框架,还是 Marsden 的多辛算法的理论框架,其所针对的都是常系数的情形. 这样就有很大的局限性,因为大部分微分方程都是变系数的. 近几年来,洪佳林等人把这一算法推广到变系数的情形. 同时,这一算法进行了初步的整体误差分析,从而取得了一些比较好的结果^[29,30].

秦孟兆及其研究生等构造了许许多多实用的多辛算法^[31~39]. 他们与蒋长锦都研究了多辛格式的周期边界问题的处理办法^[40].

曾文平及其指导的研究生从 1995 年以来,对偏微分方程的单辛算法与多辛算法进行了大量的研究,取得了可喜成果^[41~54]. 尤其是对杆振动方程、Schrödinger 方程、“good Boussinesq 方程等进行了深入的研究,取得了较好的理论与数值结果. 正由于此可喜成果,本课题组应邀参加了历次由中国科学院高等科学技术中心承办的全国或国际保结构算法会议并发言作报告. 其研究工作,在 2001 年的国际保结构算法会议上,受到同行专家的重视与好评. 我们已经完成或正在完成的主要课题,包括福建省自然科学基金项目《高阶发展方程与辛格式》、国务院侨务办公室基金资助项目《非线性发展方程的保结构算法》,以及与中科院计算数学与大规模工程计算研究所国家重点实验室,进行合作的课题《非线性发展方程的辛算法》、《非线性发展方程的多辛算法》等.

辛算法已经广泛地应用于许多微分方程、大气研究和地球物理勘探,以及原子结构分析等领域,而且取得了很好的数值效果. 在长时间数值稳定性方面,辛算法尤其具有独特的优越性. 由于篇幅所限,这部分工作我们在此不再列举.

4 未来展望

辛算法特别是多辛算法自创始以来只有一二十年,虽然它的发展十分迅猛并日臻完善,但是有许多有重要意义的工作尚待去做. (1) 辛算法理论框架的进一步完善. (2) 收敛性、稳定性的理论上尚未得到证明. 这是一项复杂而有意义的工作. (3) 在线性方程组与非线性方程组方面应用的研究,特别是变系数或间断系数方程中的进一步应用. (4) 辛算法与其它方法(如谱方法、有限元方法、有限体积法、小波方法等)的结合与联系的进一步研究. (5) 把辛算法更加广泛地应用于实际问题中. 这些方面的研究都是很有理论和实际意义的,有待于我们去深入研究.

限于我们的水平及所掌握的资料十分有限,错漏和不当之处在所难免,欢迎批评、指正和谅解.

本文在写作过程中,参考了中国科学院数学研究所林立军提供的博士论文. 对他的支持与帮助,藉此表示衷心感谢!

参 考 文 献

- 1 Vogelaere R De. Method of integration which preserve the contact transformation property of the Hamilton equations[J]. Notre Dame. Ind. ,1956,(4):98~154
- 2 Ruth R D. A canonical integration technique[J]. IEEE Trans. Nuclear Science ,1983,(3):2 669~2 671
- 3 Feng Kang. On difference schemes and symplectic geometry[A]. Proceeding of the 5th Intern. Symposium on Differential Geometry and Differential Equations. 1984[C]. Beijing: Science Press, 1985. 42~58
- 4 Feng Kang. Difference schemes for Hamiltonian formalism and symplectic geometry[J]. J. C. M. , 1986,(3):279~289
- 5 Feng Kang. How to compute property Newton's equation of motion[A]. Proceeding of 2nd Conference on Numerical Methods for PDEs[C]. In: Ying L A, et al,Eds. Tianjin:Nakai Univ. Press, 1986. 12~22
- 6 Feng K, Wu H M, Qin M Z, et al. Construction fo canonical difference schemes for Hamilton formalism via generating functions[J]. J. C. M. , 1989, 11:71~96
- 7 Zhong Ge, Feng Kang. On the approximation for linear Hamiltonian system[J]. J. C. M. , 1988,(1):88~97
- 8 冯 康,秦孟兆. Hamilton 力学体系的 Hamilton 算法[J]. 自然科学进展——国家重点实验室通讯,1990,(2):110~120
- 9 冯 康.冯康文集() [J]. 北京:国防工业出版社,1995. 12~103
- 10 Qin Mengzhao. A difference scheme for the Hamiltonian equation[J]. J. C. M. , 1987,(3):203~209
- 11 Qin M Z, Zhang M Q. Multi-stage symplectic schemes of two kinds of Hamiltonian systems for wave equations[J]. Comp. Math. Applic. , 1990,(4):51~62
- 12 秦孟兆. 辛几何及计算哈密顿力学[J]. 力学与实践,1996,(6):1~20
- 13 Lasagni F M. Canonical Runge-Kutta methods[J]. ZAMP,1933,5(39):952~953
- 14 Sanz-Serna J M. Runge-Kutta schemes for Hamilton systems[J]. BIT, 1988,28:877~883
- 15 Suris YB. The canonicity of mappings generated by Runge-Kutta type method when integrating the systems[J]. Zh. Vychist. Mat. Fiz. , 1989, 29:202~211
- 16 Sun Geng. Construction of high order symplectic Runge-Kutta methods[J]. J. C. M. , 1993,(3):250~260
- 17 Sun Geng. Symplectic PRK methods[J]. J. C. M. , 1993,(4):365~372
- 18 Tang Yifa. The symplecticity of multi-step methods[J]. Computers Math. Applic. , 1993,(1):83~90
- 19 Hairer E, Leone P. Order barriers for symplectic multi-step methods[J]. Numerical Analysis, 1997,(2):53~85
- 20 蒋长锦. 四级四阶对角隐式辛 Runge-Kutta 方法参数计算[J]. 数值计算与计算机应用,2002,(3):161~166
- 21 Bridges T J. Multisymplectic structure, Boussinesq equation and periodic traveling waves[A]. In Proc. IUTAM/ ISIMM SYMP. On Nonlinear Wave in Fluids[C]. Singapore: World Scientific,1995. 135~217
- 22 Bridges T J. A geometric formulation of the conservation of wave action and its implications for signature and the classification of instabilities[M]. New York: Pineridge Press, 1993. 331~357
- 23 Bridges T J. Multisymplectic structures and wave propagation[J]. Math. Proc. Camb. Phil. Soc. , 1997,121:147~190
- 24 Bridges T J, Reich S. Multisymplectic integrators: Numerical schemes for Hamilton PDEs that conserve symplecticity[J]. Phys. Lett. ,2001,A:184~193
- 25 Reich S. Finite volume method for multisymplectic PDEs[J]. BIT, 2000, 40(3):559~582
- 26 Bridges T J, Reich S. Multisymplectic spectral discretization for the Z-K and shallow water equation[J]. Physica, 2001, D:491~504
- 27 Marsden J E, Patric G P, Shkoller S. Multisymplectic geometry, variational integrators, and nonlinear PDEs[J]. Comm. in Math. Phys. , 1998,(4):351~395
- 28 Hong J L, Liu Y. Multisymplecticity of the center box discret for a class of Hamilton PDEs and an application to quasi-periodic solitary wave of dqpkdv equation[J]. Preprint,2004
- 29 Hong J L, Qin M Z. Multisymplectic of center box discretization of Hamilton PDEs with m^2 space dimensions[J]. Appl. Math. Letters, 2002,15:1 005~1 011
- 30 Hong J L, Lin Y. Hans Munthe-Kass, Antonella Zanna, Globality conservative properties and error estimation of a multi-symplectic scheme for schrödinger with variable coefficients[J]. Appl. Math. Letters, Preprint, 2004
- 31 Qin M Z, Wang Y S. Multi-symplectic schemes for nonlinear wave equation[J]. Collected Works of CCAST-WL, 2001, 10:69~86
- 32 秦孟兆. 多辛几何差分格式[A]. 见:高等科学技术中心主编. 1999 年北京全国保结构算法及其应用研讨会论文集

- [C]. 北京: 高等科学技术中心出版社, 2000. 17 ~ 22
- 33 Chen J B, Qin M Z, Tang Y F. Symplectic and multi-symplectic methods for the Schrödinger equation[J]. Comp. Math. App., 2002, 43: 1 032 ~ 1 123
- 34 Chen J B, Qin M Z. Multisymplectic fourier pseudospectral method for the NLSE[J]. Numerical Analysis, 2001, 12: 503 ~ 512
- 35 王雨顺, 秦孟兆. 变分与无限维系统的高精度辛格式[J]. 计算数学, 2002, 24(4): 431 ~ 436
- 36 Qin M Z, Zhu W J. Volume-preserving schemes and numerical experiments[J]. Computers Math. Appli., 1993, 26(4): 33 ~ 42
- 37 秦孟兆. 波动方程的两种哈密顿型蛙跳格式[J]. 计算数学, 1988, (3): 272 ~ 281
- 38 秦孟兆. 任意阶精度蛙跳格式稳定性分析[J]. 计算数学, 1992, (1): 1 ~ 9
- 39 Qin M Z, Zhu W J. Construction of symplectic schemes for wave equations via Hyperbolic functions $\sinh(x)$, $\cosh(x)$ and $\tanh(x)$ [J]. Computers Math. Applic., 1993, 26(8): 1 ~ 11
- 40 蒋长锦. 有限区间上多辛 Preissmann 格式及其附加条件[J]. 中国科学技术大学学报, 2002, (4): 403 ~ 411
- 41 曾文平. 高阶 Schrödinger 方程的哈密顿型蛙跳格式[J]. 高等学校计算数学学报, 1995, 17(4): 305 ~ 317
- 42 曾文平. 用 Hyperbolic 函数构造 Schrödinger 方程的辛格式[J]. 应用数学学报, 1996, 19(3): 424 ~ 430
- 43 曾文平. 用 Hyperbolic 函数构造 高阶 Schrödinger 方程的辛格式[J]. 华侨大学学报(自然科学版), 1998, 19(1): 6 ~ 11
- 44 Zeng Wenping. A leap frog finite difference scheme for a class of nonlinear schrödinger equation of high order[J]. J. C. M., 1999, 17(2): 133 ~ 138
- 45 曾文平, 黄浪扬, 秦孟兆. “good Bousinesque”方程的多辛算法[J]. 应用数学与力学, 2002, 23(7): 744 ~ 747
- 46 黄浪扬. 四阶杆振动方程的 $\tanh(x)$ 辛格式[J]. 华侨大学学报(自然科学版), 2002, 23(3): 217 ~ 221
- 47 Huang Langyang, Zeng Wenping, Qin Mengzhao. Construct of multisymplectic scheme for “good Bousinesque” equation [J]. J. C. M., 2003, 25(6): 702 ~ 715
- 48 曾文平. 用 Hyperbolic 函数构造四阶杆振动方程的显式辛格式[A]. 见: 云南大学主编. 全国信息与计算科学研讨会(昆明)《数学与计算》论文集[C]. 西安: 陕西人民教育出版社, 2003. 45 ~ 50
- 49 孔令华, 曾文平. 四阶杆振动方程的多级辛格式[J]. 贵州大学学报(自然科学版), 2003, (3): 247 ~ 251
- 50 黄浪扬. 四阶杆振动方程的 $\sinh(x)$ 蛙跳辛格式[J]. 华侨大学学报(自然科学版), 2003, 24(2): 125 ~ 130
- 51 黄浪扬. 四阶杆振动方程的 $\cosh(x)$ 显式辛格式[J]. 华侨大学学报(自然科学版), 2003, 24(3): 239 ~ 244
- 52 曾文平, 孔令华. 四阶杆振动方程的一族高稳定的十字架格式[J]. 数学研究, 2003, 36(3): 288 ~ 292
- 53 曾文平, 郑小红. 四阶杆振动方程的多辛格式[J]. 漳州师范学院学报, 2003, (4): 1 ~ 5
- 54 曾文平. Schrödinger 方程的高精度辛格式[J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2003, 42(6): 697 ~ 700

History and Present State of Symplectic Algorithm

Zeng Wenping Kong Linghua

(Dept. of Math., Huaqiao Univ., 362011, Quanzhou, China)

Abstract Hamilton system is a mechanical system for the use of describing non-dissipative physical process and physical phenomenon. The algorithm of symplectic geometry is one of structure preserving algorithms. Scholars at home and abroad have scored great successes in this field. Aiming at algorithm of symplectic geometry for Hamilton system, the authors describe its concise history, present state, prospect and applications, especially the principal works of Chinese scholars in this field.

Keywords Hamilton system, symplectic algorithm, a study on the advances