Numerical Analysis

Zhiping Li

LMAM and School of Mathematical Sciences
Peking University

Hamilton 系统

Hamilton 系统一般可表示为

$$\begin{cases} \dfrac{d\mathbf{p}}{dt} = -H_{\mathbf{q}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \\ \dfrac{d\mathbf{q}}{dt} = H_{\mathbf{p}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \end{cases}$$

其中 $\mathbf{p} = (p_1, \cdots, p_n)$ 称为广义动量, $\mathbf{q} = (q_1, \cdots, q_n)$ 称为广义坐标, 可微函数 $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ 称为系统的 Hamilton 函数. 若记

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}_{2n} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I}_n \\ -\mathbf{I}_n & \mathbf{0} \end{pmatrix},$$

这里 $\mathbf{I}_n$ 为 n 阶单位矩阵, 则 Hamilton 系统又可表示为

$$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = \mathbf{J}_{2n}^{-1} H_{\mathbf{z}} = \mathbf{J}_{2n}^{-1} \begin{pmatrix} H_{\mathbf{p}} \\ H_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}.$$

矩阵 $\mathbf{J}_{2n}$ 的性质

引理： 矩阵 $\mathbf{J}_{2n} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I}_n \\ -\mathbf{I}_n & \mathbf{0} \end{pmatrix}$ 具有如下性质:

1. $\mathbf{J}_{2n}^{-1} = \mathbf{J}_{2n}^T = -\mathbf{J}_{2n}$, $\mathbf{J}_{2n}\mathbf{J}_{2n} = -\mathbf{I}_{2n}$;
2. 对任意向量 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{2n}$, 有 $\mathbf{v}^T\mathbf{J}_{2n}\mathbf{v} = 0$;
3. 如果 $\mathbf{A}$ 是对称矩阵, $\mathbf{B} = \mathbf{J}_{2n}\mathbf{A}$, 则 $\mathbf{B}^T\mathbf{J}_{2n} + \mathbf{J}_{2n}\mathbf{B} = \mathbf{0}$.

容易验证 $\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^T\mathbf{J}_{2n}\mathbf{y}$ 定义了一个 $\mathbb{R}^{2n} \times \mathbb{R}^{2n}$ 上的一个非退化的反对称双线性形式: 记 $\mathbf{x}^T = (\mathbf{x}_1^T, \mathbf{x}_2^T)$, $\mathbf{y}^T = (\mathbf{y}_1^T, \mathbf{y}_2^T)$,

$$\mathbf{x}^T\mathbf{J}_{2n}\mathbf{y} = \mathbf{x}_1^T\mathbf{y}_2 - \mathbf{x}_2^T\mathbf{y}_1 = -(\mathbf{x}_2^T\mathbf{y}_1 - \mathbf{x}_1^T\mathbf{y}_2) = -\mathbf{y}^T\mathbf{J}_{2n}\mathbf{x}.$$

注： $\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 非退化是指如果 $\mathbf{x} \in \mathbf{V}$ 满足 $\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$, $\forall \mathbf{y} \in \mathbf{V}$, 则 $\mathbf{x} = 0$.

辛空间和辛映射（辛结构或辛内积）

定义： 设 $\mathbf{V}$ 是定义在实数域 $\mathbb{R}$ 上的向量空间. 如果在 $\mathbf{V}\times\mathbf{V}$ 上定义的映射 ω 满足下列性质：

1. 双线性: $\omega(\mathbf{x},\mathbf{y})$ 关于 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 都是线性的;
2. 非退化: 如果 $\mathbf{x}\in\mathbf{V}$ 满足 $\omega(\mathbf{x},\mathbf{y})=0,\ \forall\mathbf{y}\in\mathbf{V}$, 则 $\mathbf{x}=0$;
3. 反对称: 对任意 $\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbf{V}$ 有 $\omega(\mathbf{x},\mathbf{y})=-\omega(\mathbf{y},\mathbf{x})$,

则称 $(\mathbf{V},\omega)$ 称为辛空间, ω 为辛映射或辛结构或辛内积.

记向量空间 $\mathbb{R}^n$ 上的欧氏空间内积为 $(\mathbf{x},\mathbf{y})=\mathbf{x}^T\mathbf{I}_n\mathbf{y}$, 则向量空间 $\mathbb{R}^{2n}$ 上的双线性形式 $[\mathbf{x},\mathbf{y}]=\mathbf{x}^T\mathbf{J}_{2n}\mathbf{y}=\sum_{i=1}^n(x_iy_{n+i}-x_{n+i}y_i)$ 定义了 $\mathbb{R}^{2n}$ 上的辛内积.

Hamilton 系统的相空间在由 $\mathbf{J}_{2n}$ 定义的辛内积 $[\mathbf{x},\mathbf{y}]=\mathbf{x}^T\mathbf{J}_{2n}\mathbf{y}$ 下是一个辛空间.

Hamilton 系统相空间上的几何 — 辛几何

辛空间上的几何称为辛几何. 由于辛内积的反对称性, 辛几何中没有长度（距离）的概念, 这是与欧氏几何的本质区别.

当 $n = 1$ 时, 辛内积为 $[\mathbf{x}, \mathbf{y}] = x_1y_2 - x_2y_1$, 这恰为向量 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 张成的平行四边形的面积. 一般地说, 辛内积是面积的度量.

与欧氏几何平行地, 可以引入辛空间上的一组正交基 $\{\mathbf{e}_1, \cdots, \mathbf{e}_n, \mathbf{e}_{n+1}, \cdots, \mathbf{e}_{2n}\}$, 满足

$$[\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j] = [\mathbf{e}_{n+i}, \mathbf{e}_{n+j}] = 0, \; [\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_{n+j}] = [\mathbf{e}_{n+i}, \mathbf{e}_j] = \delta_{ij}, \; i, j = 1, \cdots, n.$$

可以证明, 对任给的 $\mathbf{V} \subset \mathbb{R}^{2n}$, 存在斜交补集

$$\mathbf{V}^{\perp} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{2n} : [\mathbf{x}, \mathbf{y}] = 0, \;\; \forall \mathbf{y} \in \mathbf{V}\}.$$

正交变换是保长度（欧氏结构）不变的，相应地可以引入保面积（辛结构）不变的辛变换的概念.

辛变换 — 辛空间上的保辛内积线性变换 —— 定理 6.9.1

定义： 如果一个线性变换 $\mathbf{S} : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}^{2n}$ 是保辛内积的, 即 $[\mathbf{Sx}, \mathbf{Sy}] = [\mathbf{x}, \mathbf{y}]$, 则称其为一个辛变换.

定义： 一个 $2n$ 阶矩阵 $\mathbf{S}$ 是辛的, 如果

$$\mathbf{S}^T \mathbf{J}_{2n} \mathbf{S} = \mathbf{J}_{2n}.$$

定理： 辛空间上的一个线性变换 $\mathbf{S}$ 是辛的充分必要条件是

$$\mathbf{S}^T \mathbf{J}_{2n} \mathbf{S} = \mathbf{J}_{2n}.$$

所有辛矩阵组成一个群, 称为辛群, 记为 $Sp(2n)$.

辛变换的重要性质 —— 定理 6.9.2, 定理 6.9.3

定理： 如果 $\mathbf{S} \in Sp(2n)$, 则

1. $\det \mathbf{S} = 1$; *(由定义知 $(\det \mathbf{S})^2 = 1$. 设 $(\lambda_i, \mathbf{x}_i)_{i=1}^{2n}$ 为 $\mathbf{S}$ 的特征对, 可证共轭复特征值满足 $\lambda\bar{\lambda} = 1$, 实特征值满足: 若 $[\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j] \neq 0$, 则 $\lambda_i = \lambda_j^{-1}$, 且相应特征向量空间维数相同(-1 有偶数维特征向量空间).)*
2. $\mathbf{S}^{-1} = -\mathbf{J}_{2n}\mathbf{S}^T\mathbf{J}_{2n} = \mathbf{J}_{2n}^{-1}\mathbf{S}^T\mathbf{J}_{2n}$; *($\because \mathbf{S}^T\mathbf{J}_{2n} = \mathbf{J}_{2n}\mathbf{S}^{-1} \Rightarrow \mathbf{S}^{-1} = \mathbf{J}_{2n}^{-1}\mathbf{S}^T\mathbf{J}_{2n}$.)*
3. $\mathbf{S}\mathbf{J}_{2n}\mathbf{S}^T = \mathbf{J}_{2n}$. *($\because \mathbf{S}\mathbf{J}_{2n}\mathbf{S}^T\mathbf{J}_{2n}\mathbf{S} = -\mathbf{S} \Rightarrow \mathbf{S}\mathbf{J}_{2n}\mathbf{S}^T\mathbf{J}_{2n} = -\mathbf{I} \Rightarrow \mathbf{S}\mathbf{J}_{2n}\mathbf{S}^T = \mathbf{J}_{2n}$.)*

定理： 矩阵

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I}_n & \mathbf{B} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_n \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \mathbf{I}_n & \mathbf{0} \\ \mathbf{D} & \mathbf{I}_n \end{pmatrix}$$

是辛的, 当且仅当 $\mathbf{B}^T = \mathbf{B}$, $\mathbf{D}^T = \mathbf{D}$. *(根据定义直接验证.)*

Hamilton 系统定义了其相空间上的一族单参数辛变换

Hamilton 系统的解有一个重要的性质，即它给出了Hamilton 系统相空间上的一族单参数可微映射: $(\mathbf{p}(t_0), \mathbf{q}(t_0)) \mapsto (\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t))$, 且该族映射是保辛结构的. (对比欧氏空间上的保形映射)

李群和李代数是研究 Hamilton 系统的有力工具之一.

注 1： 简单地说，李群就是有可微（三次以上连续可微）局部坐标系的群，在该坐标系下群的单位元对应于坐标原点.

注 2： 一般，若 $\mathbb{R}$ 上的 k 维向量空间 $\mathbf{V}$ 上的对易运算 $[\mathbf{a}, \mathbf{b}]$ 满足

1. 双线性性: $[\alpha\mathbf{a} + \alpha'\mathbf{a}', \mathbf{b}] = \alpha[\mathbf{a}, \mathbf{b}] + \alpha'[\mathbf{a}', \mathbf{b}]$, and so to $\mathbf{b}$;
2. 反对称性: $[\mathbf{a}, \mathbf{b}] + [\mathbf{b}, \mathbf{a}] = 0$;
3. Jacobi 条件: $[\mathbf{a}, [\mathbf{b}, \mathbf{c}]] + [\mathbf{b}, [\mathbf{c}, \mathbf{a}]] + [\mathbf{c}, [\mathbf{a}, \mathbf{b}]] = 0$,

则称以该对易运算为乘法的向量空间 $\mathbf{V}$ 为 $\mathbb{R}$ 上的一个李代数.

相空间的李代数和由无穷小辛矩阵定义的李代数

设 F 和 G 是定义在相空间 $\mathbb{R}^{2n}$ 上的实值函数, 定义 Poisson 括号为

$$\{F, G\} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial G}{\partial q_i} \right).$$

则 Poisson 括号是一个满足 Jacobi 条件

$$\{F, \{G, H\}\} + \{G, \{H, F\}\} + \{H, \{F, G\}\} = 0,$$

的双线性反对称变换. 因此它定义了相空间 $\mathbb{R}^{2n}$ 上无穷次可微实值函数空间的一个李代数. 此外, Poisson 括号运算还满足 Leibniz 法则 $\{F, G \cdot H\} = \{F, G\} \cdot H + G \cdot \{F, H\}$.

定义: $2n$ 阶矩阵 $\mathbf{B}$ 称为是无穷小辛矩阵, 如果

$$\mathbf{B}^T \mathbf{J}_{2n} + \mathbf{J}_{2n} \mathbf{B} = \mathbf{0}.$$

无穷小辛矩阵组成的线性空间与对易运算 $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}$ 一起定义了一个李代数, 记作 $sp(2n)$.

用无穷小辛矩阵生成辛矩阵 —— 引理 6.9.2, 定理 6.9.4, 定理 6.9.5

由辛变换组成的辛群是一个典型的李群, 其上的对易运算 $[\mathbf{A},\mathbf{B}] = \mathbf{AB}-\mathbf{BA}$ 又通过无穷小辛变换定义了相应的李代数.

一个重要的结论是: 辛矩阵可以由无穷小辛矩阵生成. 李群可以由李代数通过无穷小辛变换生成.

引理： 矩阵 $\mathbf{B}$ 是无穷小辛矩阵当且仅当 $\mathbf{B}=\mathbf{J}_{2n}\mathbf{A}$, 其中 $\mathbf{A}$ 是对称矩阵.

证明： 令 $\mathbf{A}=-\mathbf{J}_{2n}\mathbf{B}$, 则 $\mathbf{A}^T=-\mathbf{B}^T\mathbf{J}_{2n}^T=\mathbf{B}^T\mathbf{J}_{2n}$. 由此知, $\mathbf{A}=\mathbf{A}^T \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{B}^T\mathbf{J}_{2n}+\mathbf{J}_{2n}\mathbf{B}=\mathbf{0}$. ■

定理： 如果 $\mathbf{B}\in sp(2n)$, 则 $\exp(t\mathbf{B})\in Sp(2n)$, $\forall t\in\mathbb{R}$. 若还有 $|\mathbf{I}_{2n}+\mathbf{B}|\neq 0$, 则有 $\mathbf{F}\triangleq(\mathbf{I}_{2n}+\mathbf{B})^{-1}(\mathbf{I}_{2n}-\mathbf{B})\in Sp(2n)$.

Hamilton 系统的辛结构有重要的物理意义

Hamilton 系统的辛结构有重要的物理意义. 例如, 对线性可分 Hamilton 系统来说, 保辛结构等价于能量守恒.

因此, 设计保辛结构的数值方法对正确模拟 Hamilton 系统的重要性是不言而喻的. 尤其对长时间模拟.

辛算法就是求解 Hamilton 系统的保辛结构的数值方法.

线性 Hamilton 系统及其解的无穷小辛矩阵表示

考虑线性 Hamilton 系统, 即 Halmilton 函数 H 是 $\mathbf{z}$ 的二次型:

$$H(\mathbf{z}) = \frac{1}{2}\mathbf{z}^T\mathbf{S}\mathbf{z}, \quad \mathbf{S}^T = \mathbf{S}.$$

在这种情况下, Hamilton 系统可以写成

$$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = \mathbf{B}\mathbf{z}, \qquad \mathbf{B} = \mathbf{J}_{2n}^{-1}\mathbf{S}.$$

由于 $\mathbf{B} \in sp(2n)$, 所以 $\exp(t\mathbf{B}) \in Sp(2n)$. 此时, Hamilton 系统初值问题的解可以表示为 $\mathbf{z}(t) = \exp(t\mathbf{B})\mathbf{z}(0)$, 容易看出这是一个由无穷小辛矩阵的指数变换定义的相空间上保辛结构映射.

线性 Hamilton 系统的加权格式 —— 定理 6.9.6

线性 Hamilton 系统的差分格式称为是辛的, 如果差分格式定义了从 $\mathbf{z}_m$ 到 $\mathbf{z}_{m+1}$ 一个辛变换.

定理: 线性 *Hamilton* 系统的加权格式

$$\frac{\mathbf{z}_{m+1}-\mathbf{z}_m}{h}=\mathbf{B}[\alpha\mathbf{z}_{m+1}+(1-\alpha)\mathbf{z}_m]$$

是辛的, 当且仅当 $\alpha=\frac{1}{2}$ *(*即 *Euler* 中点公式或梯形公式*)*. 此时, 从 $\mathbf{z}_m$ 到 $\mathbf{z}_{m+1}$ 的变换是无穷小辛变换 $\frac{1}{2}h\mathbf{B}$ 的 *Cayley* 变换*:*

$$\mathbf{F}_h=\psi\left(\frac{1}{2}h\mathbf{B}\right)\triangleq\left(\mathbf{I}_{2n}+\frac{1}{2}h\mathbf{B}\right)^{-1}\left(\mathbf{I}_{2n}-\frac{1}{2}h\mathbf{B}\right).$$

线性可分 Hamilton 系统的辛格式

若线性 Hamilton 系统还是可分的, 即

$$H(\mathbf{p},\mathbf{q}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^T\mathbf{U}\mathbf{p}+\frac{1}{2}\mathbf{q}^T\mathbf{V}\mathbf{q}, \quad \text{即} \ \ \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{U} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{V} \\ \mathbf{U} & \mathbf{0} \end{pmatrix},$$

其中 $\mathbf{U}$ 对称正定, $\mathbf{V}$ 对称, 则 Hamilton 系统可写成

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\mathbf{V}\mathbf{q}, \quad \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{U}\mathbf{p}.$$

此时, Euler 中点公式可以写成

$$\frac{\mathbf{p}_{m+1}-\mathbf{p}_m}{h} = -\mathbf{V}\frac{\mathbf{q}_{m+1}+\mathbf{q}_m}{2}, \quad \frac{\mathbf{q}_{m+1}-\mathbf{q}_m}{h} = \mathbf{U}\frac{\mathbf{p}_{m+1}+\mathbf{p}_m}{2},$$

或

$$\begin{pmatrix} \mathbf{p}_{m+1} \\ \mathbf{q}_{m+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_n & \frac{h}{2}\mathbf{V} \\ -\frac{h}{2}\mathbf{U} & \mathbf{I}_n \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_n & -\frac{h}{2}\mathbf{V} \\ \frac{h}{2}\mathbf{U} & \mathbf{I}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{p}_m \\ \mathbf{q}_m \end{pmatrix}.$$

Cayley 变换的进一步推广 —— 定理 6.9.7

定理: 设函数 $\psi(\lambda)$ 在 $\lambda = 0$ 处能展成幂级数, $\psi(\lambda)\psi(-\lambda) = 1$, 且 $\psi(0) = 1$, $\psi'(0) \neq 0$. 如果 $\mathbf{B} \in sp(2n)$, 则 $\psi(h\mathbf{B}) \in Sp(2n)$. *(此时称* $\psi(h\mathbf{B})$ *为无穷小辛阵* $h\mathbf{B}$ *的 Cayley 变换).*

证明略.

现考虑 e^x 的有理逼近 $e^x \approx \frac{P_l(x)}{Q_k(x)}$, 其中 $P_l(x)$, $Q_k(x)$ 分别是 x 的 l 和 k 次多项式, 且 $Q_k(0) \neq 0$. 对给定的 l 和 k 选 $P_l(x)$, $Q_k(x)$ 使得 $\frac{P_l(x)}{Q_k(x)}$ 在原点的 Taylor 展开式与 e^x 有尽可能多相同的主项. 特别地, e^x 有如下形式的有理逼近:

$$e^x = \frac{P_k(x)}{P_k(-x)} + O(|x|^{2k+1}),$$

Cayley 变换的进一步推广 —— 定理 6.9.8

其中 $P_0(\lambda) = 1,\ P_1(\lambda) = 2 + \lambda,$

$$P_2(\lambda) = 12 + 6\lambda + \lambda^2,$$

$$P_3(\lambda) = 120 + 60\lambda + 12\lambda^2 + \lambda^3,$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$P_k(\lambda) = 2(2k-1)P_{k-1}(\lambda) + \lambda^2 P_{k-2}(\lambda),$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

记 $\psi(\lambda) = \frac{P_k(\lambda)}{P_k(-\lambda)}$, 则不难验证函数 $\psi(\lambda)$ 满足定理 6.9.7 的条件.

定理: 线性 *Hamilton* 系统的差分格式

$$\mathbf{z}_{m+1} = P_k(-h\mathbf{B})^{-1} P_k(h\mathbf{B})\mathbf{z}_m, \quad k = 1, 2, \cdots$$

是辛的, 具有 $2k$ 阶精度. 且有 $\frac{1}{2}\mathbf{z}_{m+1}^T \mathbf{S}\mathbf{z}_{m+1} = \frac{1}{2}\mathbf{z}_m^T \mathbf{S}\mathbf{z}_m$.

Cayley 变换的进一步推广 —— 定理 6.9.8 的证明

证明： 只需证 $\mathbf{z}^T\mathbf{S}\mathbf{z}$ 是格式的不变量. 由 $\mathbf{S} = \mathbf{J}_{2n}\mathbf{B}$, 知

$$\mathbf{z}_{m+1}^T\mathbf{S}\mathbf{z}_{m+1} = \mathbf{z}_m^T(P_k(-h\mathbf{B})^{-1}P_k(h\mathbf{B}))^T\mathbf{J}_{2n}\mathbf{B}(P_k(-h\mathbf{B})^{-1}P_k(h\mathbf{B}))\mathbf{z}_m.$$

由 矩阵 $\mathbf{B}$ 与矩阵$P_k(h\mathbf{B})$ 和 $P_k(-h\mathbf{B})^{-1}$ 可交换, 知

$$\mathbf{z}_{m+1}^T\mathbf{S}\mathbf{z}_{m+1} = \mathbf{z}_m^T(P_k(-h\mathbf{B})^{-1}P_k(h\mathbf{B}))^T\mathbf{J}_{2n}(P_k(-h\mathbf{B})^{-1}P_k(h\mathbf{B}))\mathbf{B}\mathbf{z}_m.$$

而 $P_k(-h\mathbf{B})^{-1}P_k(h\mathbf{B})$ 是辛矩阵, 定理得证.

用有理逼近和 Cayley 变换构造辛格式的例

例 1：取 $\psi(\lambda) = \frac{P_1(\lambda)}{P_1(-\lambda)}$, 则得具有二阶精度的 Euler 中点公式

$$\mathbf{z}_{m+1} = \mathbf{z}_m + \frac{h\mathbf{B}}{2}[\mathbf{z}_m + \mathbf{z}_{m+1}].$$

例 2：取 $\psi(\lambda) = \frac{P_2(\lambda)}{P_2(-\lambda)}$, 则得具有四阶精度的辛格式

$$\mathbf{z}_{m+1} = \mathbf{z}_m + \frac{h\mathbf{B}}{2}[\mathbf{z}_m + \mathbf{z}_{m+1}] + \frac{h^2\mathbf{B}^2}{12}[\mathbf{z}_{m+1} - \mathbf{z}_m].$$

注：由定理 6.9.8 知, 以上格式都是辛的, 且 $\frac{1}{2}\mathbf{z}_m^T\mathbf{S}\mathbf{z}_m$ 守恒. 在可分情形, 这就是系统的能量 $\frac{1}{2}\mathbf{p}_m^T\mathbf{U}\mathbf{p}_m + \frac{1}{2}\mathbf{q}_m^T\mathbf{V}\mathbf{q}_m$ 守恒.

Hamilton 系统的辛 Runge-Kutta 格式

将 Hamilton 系统表示为

$$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{z}), \qquad \mathbf{f}(\mathbf{z}) = \begin{pmatrix} -\mathbf{H}_q \\ \mathbf{H}_p \end{pmatrix},$$

考虑如下形式的 s 级隐式 Runge-Kutta 方法

$$\begin{cases} \mathbf{z}_{m+1} = \mathbf{z}_m + h\sum_{i=1}^{s} c_i \mathbf{f}(\mathbf{K}_i) \\ \mathbf{K}_i = \mathbf{z}_m + h\sum_{i=1}^{s} b_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{K}_j), \quad 1 \le i \le s. \end{cases}$$

对于非线性 Hamilton 系统的单步隐式数值格式, 令 $\mathbf{S}_m = \dfrac{\partial \mathbf{z}_{m+1}}{\partial \mathbf{z}_m}$, 如果 $\mathbf{S}_m \in Sp(2n)$, 即 $\mathbf{S}_m^T \mathbf{J}_{2n} \mathbf{S}_m = \mathbf{J}_{2n}$, $\forall m \ge 0$, 则称该格式是辛的.

注: 令 $\mathbf{S}(t) = \dfrac{\partial \mathbf{z}(t)}{\partial \mathbf{z}(t_0)}$, 则非线性 Hamilton 系统的保辛结构性质是由 $\mathbf{S}(t) \in Sp(2n)$, 即 $\mathbf{S}(t)^T \mathbf{J}_{2n} \mathbf{S}(t) = \mathbf{J}_{2n}$, $\forall t$, 刻画的.

Hamilton 系统的辛 Runge-Kutta 格式 —— 定理 6.9.9

借助 Poisson 括号等做更深入的分析可以构造出 Hamilton 系统的辛 Runge-Kutta 格式. 我们有以下结果:

定理: 以上形式的 *Runge-Kutta* 方法是辛的, 如果

$$c_i b_{ij} + c_j b_{ji} = c_i c_j, \quad i, j = 1, 2, \cdots, s.$$

满足定理条件的 Runge-Kutta 方法有许多, 但达到 $2s$ 阶的只有 Gauss-Legendre 格式. 例如

- 一级二阶的中点 Euler 公式: $\mathbf{z}_{m+1} = \mathbf{z}_m + h\mathbf{f}\left(\frac{\mathbf{z}_{m+1}+\mathbf{z}_m}{2}\right)$;
- 二级四阶格式: $\mathbf{z}_{m+1} = \mathbf{z}_m + \frac{h}{2}[\mathbf{f}(\mathbf{K}_1) + \mathbf{f}(\mathbf{K}_2)]$, 其中

$$\mathbf{K}_1 = \mathbf{z}_m + h\left[\frac{1}{4}\mathbf{f}(\mathbf{K}_1) + \left(\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6}\right)\mathbf{f}(\mathbf{K}_2)\right],$$

$$\mathbf{K}_2 = \mathbf{z}_m + h\left[\left(\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6}\right)\mathbf{f}(\mathbf{K}_1) + \frac{1}{4}\mathbf{f}(\mathbf{K}_2)\right].$$

可分 Hamilton 系统的显式辛 Runge-Kutta 格式

对一般的 Hamilton 系统只存在隐式辛 Runge-Kutta 格式. 但对可分 Hamilton 系统则可以构造出显式辛 Runge-Kutta 格式. 例如 $H(\mathbf{p},\mathbf{q}) = U(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$, 则以下按 Runge-Kutta Nyström 方法构造的四级四阶显式 Runge-Kutta 格式是辛格式：

$$
\begin{aligned}
\mathbf{p}^1 &= \mathbf{p}_m + hc_1\mathbf{f}(\mathbf{q}_m), & \mathbf{q}^1 &= \mathbf{q}_m + hd_1\mathbf{g}(\mathbf{p}^1),\\
\mathbf{p}^2 &= \mathbf{p}^1 + hc_2\mathbf{f}(\mathbf{q}^1), & \mathbf{q}^2 &= \mathbf{q}^1 + hd_2\mathbf{g}(\mathbf{p}^2),\\
\mathbf{p}^3 &= \mathbf{p}^2 + hc_3\mathbf{f}(\mathbf{q}^2), & \mathbf{q}^3 &= \mathbf{q}^2 + hd_3\mathbf{g}(\mathbf{p}^3),\\
\mathbf{p}_{m+1} &= \mathbf{p}^3 + hc_4\mathbf{f}(\mathbf{q}^3), & \mathbf{q}_{m+1} &= \mathbf{q}^3 + hd_4\mathbf{g}(\mathbf{p}_{m+1}),
\end{aligned}
$$

其中 $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = -H_{\mathbf{q}} = -V_{\mathbf{q}}$, $\mathbf{g}(\mathbf{p}) = H_{\mathbf{p}} = U_{\mathbf{p}}$, 系数 c_i 和 d_i 满足:

$$
c_1 = 0,\ c_2 = c_4 = \frac{1}{3}(2+\alpha),\ c_3 = -\frac{1}{3}(1+2\alpha),
$$

$$
d_1 = d_4 = \frac{1}{6}(2+\alpha),\ d_2 = d_3 = \frac{1}{6}(1-\alpha),\ \alpha = 2^{1/3} + 2^{-1/3}.
$$

二阶常微分方程的两点边值问题

考虑二阶常微分方程的两点边值问题

$$\begin{cases} y''(t) = f(t, y(t), y'(t)), \quad t \in [a, b], \\ a_0 y(a) - a_1 y'(a) = \alpha, \\ b_0 y(b) + b_1 y'(b) = \beta. \end{cases}$$

我们总假定所给问题的适定性（解存在唯一且连续依赖边值）.

注 1： 做以上假定是必要的, 考虑方程 $y''(t) + \pi^2 y = 0$, 的两组边值问题: $y(0) = 0, y(1) = 1$, 和 $y(0) = 0, y(1) = 0$, 则前者无解, 而后者则有两个解： $y(t) \equiv 0$ 和 $y(t) = \sin(\pi t)$. 这类似于线性方程组: $Ax - \lambda x = b$, 当 λ 为特征值时的情况.

注 2： 在快速 Fourier 变换一章我们曾用差分法离散常系数线性两点边值问题, 并用 FFT 求解. 下面, 我们将针对更一般的两点边值问题介绍打靶法.

打靶法的基本思想

我们通过求解以下初值问题来试着求解两点边值问题

$$\begin{cases} y''(t) = f(t, y(t), y'(t)), & t \in [a, b], \\ a_0 y(a) - a_1 y'(a) = \alpha, \\ c_0 y(a) - c_1 y'(a) = s, \end{cases}$$

其中两个初值条件应该是线性无关的, 例如可取 c_0, c_1 满足 $c_0 a_1 - c_1 a_0 = 1$. 此时, 初值条件可等价地改写为

$$y(a) = a_1 s - c_1 \alpha, \quad y'(a) = a_0 s - c_0 \alpha.$$

记相应初值问题的解为 $y(t; s)$. 我们的目标是选 s^*, 使得 $\phi(s^*) \triangleq b_0 y(b; s^*) + b_1 y'(b; s^*) - \beta = 0$, 即求函数 $\phi(s)$ 的根.

注: 要计算一次函数值 $\phi(s)$, 就要求解一次二阶常微分方程初值问题. 因此, 应尽可能选高阶算法. 例如 Newton 法.

以 Newton 法求解打靶法

Newton 法迭代格式为

$$s_{n+1} = s_n - \frac{\phi(s_n)}{\phi'(s_n)}.$$

因此, 我们还需要计算 $\phi'(s_n) = b_0 y_s(b; s_n) + b_1 y_{st}(b; s_n)$. 这里 $y_s = \frac{\partial y}{\partial s}$, $y_{st} = \frac{\partial^2 y}{\partial s \partial t}$. 将关于 y 的常微分方程初值问题格式对参数 s 求导, 得关于 y_s 的常微分方程初值问题:

$$\begin{cases} y_s''(t) = f_2(t, y(t), y'(t)) y_s(t) + f_3(t, y(t), y'(t)) y_s'(t), \quad t \in [a, b], \\ y_s(a) = a_1, \quad y_s'(a) = a_0, \end{cases}$$

其中 $f_2(t, y, y') = \frac{\partial}{\partial y} f(t, y, y')$, $f_3(t, y, y') = \frac{\partial}{\partial y'} f(t, y, y')$.

Newton 法迭代格式的每一步都需要求解两个二阶常微分方程初值问题. 我们可以把它们改写成一个等价的有四个分量的一阶常微分方程组的初值问题.

Newton 法要求解的等价一阶常微分方程组初值问题

令 $y_1 = y$, $y_2 = y_t$, $y_3 = y_s$, $y_4 = y_{st}$, 则得一阶常微分方程组:

$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ y_2' = f(t, y_1, y_2), \\ y_3' = y_4, \\ y_4' = f_2(t, y_1, y_2) y_3(t) + f_3(t, y_1, y_2) y_4, \end{cases}$$

及相应的初值

$$\begin{cases} y_1(a) = a_1 s - c_1 \alpha, \\ y_2(a) = a_0 s - c_0 \alpha, \\ y_3(a) = a_1, \\ y_4(a) = a_0. \end{cases}$$

应用 Newton 法的打靶法的数值求解的流程

1. 令 $n = 0$, 赋初始值 s_0 和允许误差 ε;
2. 令 $s = s_0$, 数值求解一阶常微分方程初值问题得近似解 $y_i(b)$, $i = 1, 2, 3, 4$;
3. 令 $\phi(s_0) = b_0 y_1(b) + b_1 y_2(b) - \beta$, $\phi'(s_0) = b_0 y_3(b) + b_1 y_4(b)$;
4. 令 $s_1 = s_0 - \phi(s_0)/\phi'(s_0)$;
5. 如果迭代满足收敛条件 (例如 $|s_1 - s_0| < \varepsilon$), 转下一步, 否则令 $s_0 = s_1$, 返回第二步;
6. 令 $s = s_1$, 数值求解关于 y_1, y_2 的一阶常微分方程初值问题得近似解 $y_1(t)$, $y_2(t)$, 输出结果.

注: Newton 法一般只有局部收敛性. 因此, 常常需要用收敛较慢但收敛域较大的方法, 例如二分法, 给出一个较好的迭代初值.

习题六：10，11；　上机习题六：3，5.

Thank You!