应用数学和力学, 第 25 卷 第 4 期(2004 年 4 月)
Applied Mathematics and Mechanics

应用数学和力学编委会编
重 庆 出 版 社 出 版

文章编号: 1000_0887(2004) 04_0385_06

用投影方法求耗散广义 Hamilton 约束系统的李群积分*

张素英[1], 邓子辰[1,2]

(1. 西北工业大学 工程力学系, 西安 710072;
2. 大连理工大学 工业装备结构分析国家重点实验室, 大连 116023)

(钟万勰推荐)

摘要: 针对耗散广义 Hamilton 约束系统, 通过引入拉格朗日乘子和采用投影技术, 给出了一种保持动力系统内在结构和约束不变性的李群积分法• 首先将带约束条件的耗散 Hamilton 系统化为无约束广义 Hamilton 系统, 进而讨论了无约束广义 Hamilton 系统的李群积分法, 最后给出了广义 Hamilton 约束系统李群积分的投影方法• 采用投影技术保证了约束的不变性, 引入拉格朗日乘子后, 在向约束流形投影时不会破坏原动力系统的李群结构• 讨论的内容仅限于完整约束系统, 通过数值例题说明了方法的有效性•

关 键 词: 耗散广义 Hamilton 约束系统; 李群积分法; 投影方法
中图分类号: O322 文献标识码: A

引 言

人们广泛研究了 Hamilton 系统的数值积分方法, 越来越多的数据显示用典则离散格式长时间求积 Hamilton 系统效果最好[1], 它保持了流的辛结构• 文献[2, 3] 给出了 Hamilton 约束系统的辛积分方法• 然而, Hamilton 系统形式描述的是可以忽略耗散的物理过程• 人们自然会问: 保持守恒系统辛结构的积分方法能否推广到耗散 Hamilton 系统[4]? 我们已经得到一些结果[5]• 本文讨论了具有完整约束广义 Hamilton 系统的积分方法, 通过引入拉格朗日乘子, 并采用投影技术给出了一个保持系统内在结构和约束不变性的李群积分方法•

1 耗散 Hamilton 约束系统及其变形

考虑广义 Hamilton 系统:

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}, \tag{1}$$

* 收稿日期: 2002_07_17; 修订日期: 2003_11_11
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10372084); 霍英东青年教师基金资助项目(71005); 高校博士点专项基金资助项目(20010699016); 大连理工大学工业装备结构分析国家重点实验室开放基金资助项目
作者简介: 张素英(1967—), 女, 山西人, 博士生(E_mail: suyingzhang@yahoo.com.cn);
邓子辰(1964—), 男, 辽宁人, 教授, 博士, 博士生导师(联系人. Tel: + 86_29_8492157; Fax: + 86_29_8495540; E_mail: dweifan@nwpu.edu.cn).

满足约束条件

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}, \tag{2}$$

其中, $\boldsymbol{x} \in R^n$, $\boldsymbol{g} \in R^n \to R^m$, $H: R^n \to \mathbf{R}$ 是光滑函数, $\boldsymbol{M}$ 是任一 $n \times n$ 矩阵

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}} = \left(\frac{\partial H}{\partial x_1}, \frac{\partial H}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial H}{\partial x_n}\right)$$

是广义 Hamilton 函数 H 的梯度•

本节将导出原系统变形所得的无约束广义 Hamilton 系统, 并使得该系统和原系统在约束流形上恒等• 我们从无约束系统(1) 开始• 引入伪 Poisson 括号[4]:

$$\{\varphi, \psi\} = \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{M} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\tau},$$

其中 $\varphi: R^n \to R^l$ 和 $\psi: R^n \to R^k$, $k, l \geqslant 1$ 是足够光滑的矢量值函数, 可以将式(1) 重新写成如下形式:

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \{\boldsymbol{x}, H\}• \tag{3}$$

进一步引用微分算子 $\boldsymbol{D}_G$, $G: R^n \to \mathbf{R}$,

$$\boldsymbol{D}_G F = \{F, G\},$$

那么式(1) 又可以表示为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{D}_H \boldsymbol{x}• \tag{4}$$

构造原广义 Hamilton 约束系统的变形形式的主要思想是: 约束 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \in R^m$ 应当在无约束的广义 Hamilton 系统(1) 的流的作用下不变• 也就是 $\boldsymbol{g}$ 和 H 的伪 Poisson 括号等于零, 即

$$\{\boldsymbol{g}, H\} = \boldsymbol{0}• \tag{5}$$

首先区分两种不同类型的不变量[6], 如果 $\{\varphi, H\}$ 恒等于零, 则 $\varphi(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ 称为源于 H 的广义 Hamilton 系统的流的强不变量; 如果仅当 $\varphi(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ 时, $\{\varphi, H\} = \boldsymbol{0}$ 才成立, 则称 $\varphi(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ 为弱不变量• 后者常写作 $\varphi(\boldsymbol{x}) \approx \boldsymbol{0}$•

如下的命题 1 对于以后的计算是必要的•

命题 1 对矢量值函数 $\varphi: R^n \to R^l$, $\psi: R^n \to R^k$, 和 $\lambda: R^n \to R^k$, 那么,

$$\{\varphi, \lambda^{\tau}\psi\} = \{\varphi, \psi\}\lambda + \{\varphi, \lambda\}\psi•$$

证明

$$\{\varphi, \lambda^{\tau}\psi\} = \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{M} \left[\frac{\partial(\lambda^{\tau}\psi)}{\partial \boldsymbol{x}}\right]^{\tau} = \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{M} \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\tau}\lambda + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\tau}\psi\right] =$$
$$\{\varphi, \psi\}\lambda + \{\varphi, \lambda\}\psi•$$

如果 $\{\boldsymbol{g}, H\} = \boldsymbol{0}$, 则 $\boldsymbol{g}$ 是广义 Hamilton 系统(1) 的一个不变量, 且约束系统(1) 和(2) 等同于广义 Hamilton 系统(1)• 如果 $\boldsymbol{g}$ 不是不变量, 我们考虑修正的(约束系统的) Hamilton 函数:

$$H_{N1} = H + \mu^{\tau}\boldsymbol{g}•$$

选取函数 $\mu(\boldsymbol{x}) \in R^m$ 使得沿解曲线 $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$ 成立, 即要求 $\boldsymbol{g}$ 是源于 Hamilton 函数 H_{N1} 的广义 Hamilton 系统的流的一个弱不变量• 为此, 须有

$$\boldsymbol{0} = \{\boldsymbol{g}, H_{N1}\} = \{\boldsymbol{g}, H\} + \{\boldsymbol{g}, \mu^{\tau}\boldsymbol{g}\} = \{\boldsymbol{g}, H\} + \{\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g}\}\mu + \{\boldsymbol{g}, \mu\}\boldsymbol{g}•$$

考虑上式中 $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$, 如果 $\{\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g}\} \in R^{m \times m}$ 满秩, 可以得到

$$\mu = -\{\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{g}, H\},$$

则修正的 Hamilton 函数为:

$$H_{N1} = H + \mu^{\tau}\boldsymbol{g}•$$

如果$\left\{\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g}\right\} = \boldsymbol{0}$, 须有$\left\{\boldsymbol{g}, H\right\} \approx \boldsymbol{0}$• 因为我们假设$\left\{\boldsymbol{g}, H\right\} \neq \boldsymbol{0}$, 所以必须考虑 $\varphi \equiv \left\{\boldsymbol{g}, H\right\} = \boldsymbol{0}$ 是隐含的约束, 则约束流形应当是:

$$\rho = \left\{\boldsymbol{x}: \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}, \left\{\boldsymbol{g}, H\right\} = \boldsymbol{0}\right\}• \tag{6}$$

Hamilton 函数变为:

$$H_{N2} = H + \mu^{\tau}\boldsymbol{g} + \lambda^{\tau}\varphi•$$

要求 $\mu = \mu(\boldsymbol{x})$ 和 $\lambda = \lambda(\boldsymbol{x})$ 保证$\left\{\boldsymbol{g}, H_{N2}\right\} \approx \boldsymbol{0}$和$\left\{\varphi, H_{N2}\right\} \approx \boldsymbol{0}$, 就必须:

$$\left\{\boldsymbol{g}, H_{N2}\right\} = \boldsymbol{0} \Rightarrow \left\{\boldsymbol{g}, H\right\} + \left\{\boldsymbol{g}, \varphi\right\}\lambda = \boldsymbol{0}, \tag{7}$$

$$\left\{\varphi, H_{N2}\right\} = \boldsymbol{0} \Rightarrow \left\{\varphi, H\right\} + \left\{\varphi, \boldsymbol{g}\right\}\mu + \left\{\varphi, \varphi\right\}\lambda = \boldsymbol{0}• \tag{8}$$

已假定 $\varphi(\boldsymbol{x}) \equiv \left\{\boldsymbol{g}, H\right\} = \boldsymbol{0}$ 是隐含约束, 由式(7)可得 $\lambda = \boldsymbol{0}$• 进一步由式(8)可得 $\mu = -\left\{\varphi, \boldsymbol{g}\right\}^{-1}\left\{\varphi, H\right\}$•

根据上面的推理, 原广义 Hamilton 约束系统可变形为如下无约束广义 Hamilton 系统:

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \left\{\boldsymbol{x}, H_{N1}\right\}, \tag{9}$$

或

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{D}_{H_{N1}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{M}\frac{\partial H_{N1}}{\partial \boldsymbol{x}}, \tag{10}$$

其中 $H_{N1} = H + \mu^{\tau}\boldsymbol{g} = H - \left\{\varphi, H\right\}^{\tau}\left\{\varphi, \boldsymbol{g}\right\}^{-\tau}\boldsymbol{g}$•

2 变形所得无约束广义 Hamilton 系统的李群积分法

本节将讨论式(1)和(2)的变形形式(9)或(10), 它们是无约束问题, 对变形所得无约束广义 Hamilton 系统进行李群积分, 给出了保持原约束系统的本质结构和约束不变性的李群积分法• 该方法基于将无约束系统的李群积分和投影技术的思想加以结合•

根据文献[5], 广义 Hamilton 系统(9)或(10)的解形式地表示为:

$$\boldsymbol{x}(t) = [\exp(t\boldsymbol{D}_{N1})](\boldsymbol{x}(0)), \tag{11}$$

其中, $\exp(t\boldsymbol{D}_{N1})$ 是变形系统(9)的李群上的映射•

为了应用投影方法以保证约束不变性, 先考虑如下命题:

命题 2 设 $\lambda: R^n \to R^m$ 是$\boldsymbol{x}$ 的任意矢量值函数, $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$, 那么, 下面的映射:

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} + h\boldsymbol{M}\left(\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\tau}\lambda \tag{12}$$

是源于 Hamilton 函数 $H = \boldsymbol{g}^{\tau}\lambda$ 的广义 Hamilton 系统李群上的一个映射, 其中 h 为时间步长•

证明 考虑到等式 $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$, 显然映射(12)是源于Hamilton 函数 $H = \boldsymbol{g}^{\tau}\lambda$的广义 Hamilton 系统的一阶李群积分•

记 $\dfrac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}_k} = \dfrac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}_k)$,

对于变形所得的系统(9)或(10), 我们采用如下保持约束的积分方法:

第一步:

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_k + \frac{h}{2}\boldsymbol{M}\left(\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}_k}\right)^{\tau}\lambda_k;$$

第二步:

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = [\exp(h\boldsymbol{D}_{H_{N1}})](\boldsymbol{x}_k);$$

第三步:

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_{k+1} + \frac{h}{2}\boldsymbol{M}\left(\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}_{k+1}}\right)^{\tau}\lambda_{k+1}•$$

要求 λ_k 满足:

$$g(x_{k+1}) = 0$$

及 λ_{k+1} 满足:

$$\varphi(x_{k+1}) = \{g, H\} = 0.$$

如上所述的积分格式可以看作是源于 $H_N = H_{N1} + \lambda^\tau g = H + \mu^\tau g + \lambda^\tau g$ 的广义 Hamilton 系统的积分. 因为 $g = 0$, 变形系统(9) 又可以表为如下无约束系统:

$$\dot{x} = \{x, H_N\}, \tag{13}$$

或

$$\dot{x} = D_{H_N} x = M\frac{\partial H_N}{\partial x}. \tag{14}$$

我们把(14) 分裂成两个无约束广义 Hamilton 问题:

$$\dot{x} = M\frac{\partial}{\partial x}(\lambda^\tau g) \quad 和 \quad \dot{x} = M\frac{\partial}{\partial x}(H + \mu^\tau g),$$

分别求解这两个无约束系统, 那么, 应用对称合成积分法可得 $\phi_h = \exp(tD_{H_N})$[7, 8]. 上面的积分法可以简单地表示为:

$$\phi_h = \exp\left(\frac{h}{2}D_{g^\tau\lambda_{k+1}}\right)\cdot\exp(hD_{H_{N1}})\cdot\exp\left(\frac{h}{2}D_{g^\tau\lambda_k}\right), \tag{15}$$

且满足:

$$g\circ\phi_h = \varphi\circ\phi_h = 0.$$

它是一个保约束的一阶李群积分. 高阶积分格式可以通过 Yoshida 方法构造[7].

3 广义 Hamilton 约束系统李群积分的投影方法

我们还可以对原约束系统直接使用投影技术而简化第 2 节中的积分法. 那么, 保持约束的李群积分法可以表示为:

第一步:

$$x_k = x_k + \frac{h}{2}M\left(\frac{\partial g}{\partial x_k}\right)^\tau\lambda_k;$$

第二步:

$$x_{k+1} = [\exp(hD_H)](x_k);$$

第三步:

$$x_{k+1} = x_{k+1} + \frac{h}{2}M\left(\frac{\partial g}{\partial x_{k+1}}\right)^\tau\lambda_{k+1}.$$

要求 λ_k 满足:

$$g(x_{k+1}) = 0$$

及 λ_{k+1} 满足:

$$\varphi(x_{k+1}) = \{g, H\} = 0.$$

因 $g = 0$, 该积分格式可以看作源于 Hamilton 函数 $H = H + \lambda^\tau g$ 的广义 Hamilton 系统的积分, 保证了积分格式属于原系统的李群, 经过投影同时满足了约束不变性.

4 数 值 实 验

考虑广义 Hamilton 约束系统:

$$\dot{x} = M(x)\frac{\partial H}{\partial x}, \tag{16}$$

满足:

$$g(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1) = 0, \tag{17}$$

其中

$$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^{\tau} \in R^4,\ H = \frac{1}{2}(x_3^2 + x_4^2),$$

$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

设初始条件为$(x_1, x_2, x_3, x_4) = (1, 0, 0, -0.15)$, 我们用第3节所述的一阶积分格式求积广义 Hamilton 约束系统(16) 和(17). 约束不变量的残差的数值结果示于图1(步长 $h = 0.1$).

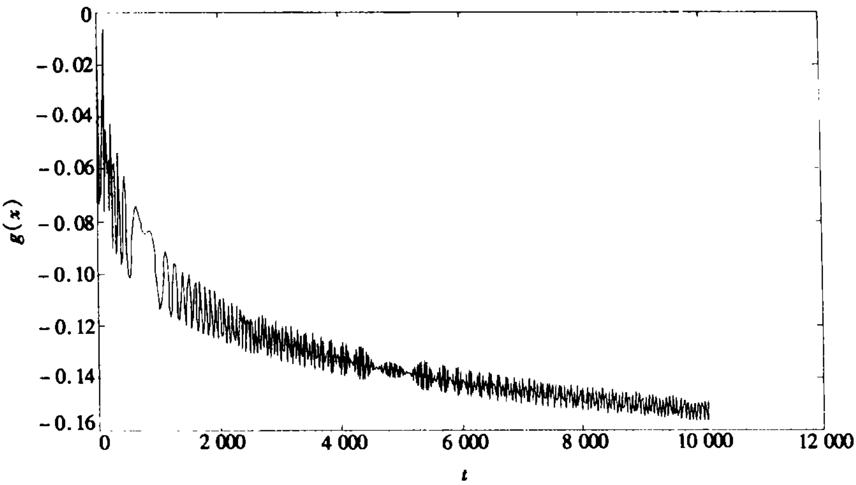

图1 约束不变量 $g(x) = 0$ 的误差

5 结论

本文把具有完整约束的广义 Hamilton 系统变为无约束的常微分方程广义 Hamilton 系统, 给出一个保持动力系统内在结构和约束不变性的李群积分法. 通过投影方法保持了约束不变性, 向约束流形投影时引入拉格朗日乘子保持了动力系统的李群性质. 而后, 进一步简化了积分过程, 对原广义 Hamilton 约束系统直接应用投影方法进行积分. 数值实验显示本文方法是有效的.

[参 考 文 献]

[1] Sanz_Serna J M. Runge_Kutta schemes for Hamiltonian systems [J]. BIT, 1988, **28**(4): 877—883.

[2] Leimkuhler B, Reich S. Symplectic integration of constrained Hamiltonian systems [J]. Math Comp, 1994, **63**(208): 589—605.

[3] Reich S. Symplectic integration of constrained Hamiltonian systems by composition methods [J]. SIAM J Numer Anal, 1996, **33**(2): 475—491.

[4] 程代展, 卢强. 广义 Hamilton 控制系统的几何结构及其应用[J]. 中国科学, E 辑, 2000, **30**(4): 341—355.

[5] ZHANG Su_ying, DENG Zi_chen. Lie group integration for general Hamiltonian system with dissipation [J]. International Journal of Nonlinear Science and Numerical Simulation, 2003, **4**(1): 89—94.

[6] Dirac P A M. Lecture on Quantum Mechanics [M]. Belfer Graduate School Monographs. No 3. New York: Yeshiva University, 1964.

[7] Yoshida H. Construction of higher order symplectic integrators[J]. Physics Letters A, 1990, **150**(2): 262—268.

[8] McLachlan R I. On the numerical integration of ordinary differential equations by symmetric composition methods [J]. SIAM J Sci Comput, 1995, **16**(1): 151—168.

Lie Group Integration for Constrained Generalized Hamiltonian System With Dissipation by Projection Method

ZHANG Su_ying[1], DENG Zi_chen[1,2]

(1. Department of Engineering Mechanics, Northwestern Polytechnical University, Xi' an 710072, P.R. China;

2. State Key Laboratory of Structural Analysis of Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116023, P.R. China)

Abstract: For the constrained generalized Hamiltonian system with dissipation, by introducing Lagrange multiplier and using projection technique, the Lie group integration method was presented, which can preserve the inherent structure of dynamic system and the constraint_invariant. Firstly, the constrained generalized Hamiltonian system with dissipative was converted to the non_constraint generalized Hamiltonian system, then Lie group integration algorithm for the non_constraint generalized Hamiltonian system was discussed, finally the projection method for generalized Hamiltonian system with constraint was given. It is found that the constraint invariant is ensured by projection technique, and after introducing Lagrange multiplier the Lie group character of the dynamic system can' t be destroyed while projecting to the constraint manifold. The discussion is restricted to the case of holonomic constraint. A presented numerical example shows the effectiveness of the method.

Key words: constrained generalized Hamiltonian system; Lie group integration; projection technique