

文章编号: 1000-0887(2005) 11-1345-06

Poisson 系统的辛结构*

孙建强^{1,2}, 马中骥¹, 田益民³, 秦孟兆⁴

- (1. 中国科学院 高能物理研究所, 北京 100039;
2. 应用物理与计算数学研究所, 北京 100088;
3. 中国科学院 软件研究所, 北京 100080;
4. 中国科学院 计算数学研究所, 北京 100080)

(顾元宪 推荐)

摘要: 当 Poisson 系统中的 Poisson 矩阵是非常数时, 经典的辛方法如辛 Runge_Kutta 方法, 生成函数法一般不能保持 Poisson 系统的 Poisson 结构, 利用非线性变换可把非常数 Poisson 结构转化成辛结构, 然后任意阶的辛方法可以长时间计算 Poisson 系统的辛结构. 自由刚体问题中 Euler 方程被转换成辛结构并用辛中点格式进行数值求解, 数值结果给出了这种非线性变换的有效性

关键词: Poisson 系统; 非线性变换; 辛方法; 自由刚体问题

中图分类号: O241.8; O152.5 文献标识码: A

引 言

对常微分方程

$$\frac{dz}{dt} = J \cdot \dot{H}(z), \quad z = (p, q)^T \in R^{2n}, \quad (1)$$

J 是一个斜对称矩阵和 $H(z)$ 是关于 z 的函数, $\dot{H}(z) = (H_{z_1}(z), H_{z_2}(z), \dots, H_{z_{2n}}(z))^T$.

$$J = J_{2n} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -I_n \\ I_n & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

I_n 是 $n \times n$ 的单位矩阵, 方程(1)为 Hamiltonian 系统. 所有的 Hamiltonian 向量场 $c := J \cdot \dot{H}(z)$ 与李括号一起构成李代数 $L = \text{sp}V_{2n} \in V_{2n}$. 定义变换的复合之后, 所有 R^{2n} 上的辛变换在变换的复合之下构成一个群, 即 L 的局部李群 $G = \text{sp}D_{2n} \in D_{2n}$, G 是由所有的辛映射 $g \in D_{2n}$ 构成的辛群. R^{2n} 上的辛结构由下面的微分 2-形式定义为

$$\omega = \sum_{i=1}^n dp_i \wedge dq_i. \quad (3)$$

系统(1)的相流表示 g_H^t , 它保持辛结构 ω ,

$$(g_H^t)^* \omega = \omega, \quad \sum dp_i \wedge dq_i = \sum dp_i \wedge dq_i, \quad (4)$$

* 收稿日期: 2004_07_05; 修订日期: 2005_06_16

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10401033; 90103003; 10471145)

作者简介: 孙建强(1971—), 男, 湖南双峰县人, 博士(联系人. Tel: + 86_10_62014411_2874; E_mail: sun_jianqiang@iapcm.ac.cn)

$$\text{即} \quad \begin{pmatrix} \frac{\partial g^H}{\partial z} \end{pmatrix}^T \mathbf{J} \begin{pmatrix} \frac{\partial g^H}{\partial z} \end{pmatrix} = \mathbf{J}. \quad (5)$$

辛算法要求离散的相流 $f_{\dot{H}}^{\dot{s}} \approx g^H$, 即 $f_{\dot{H}}^{\dot{s}}$ 满足

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_{\dot{H}}^{\dot{s}}(z_k)}{\partial z_k} \end{pmatrix}^T \mathbf{J} \begin{pmatrix} \frac{\partial f_{\dot{H}}^{\dot{s}}(z_k)}{\partial z_k} \end{pmatrix} = \mathbf{J}, \quad (6)$$

即保持相空间的辛结构。离散的相流能保持辛结构, 如对系统(1)的 Euler 中点格式

$$z_{k+1} - z_k = \Delta t \mathbf{J} \cdot \dot{H} \left(\frac{z_{k+1} + z_k}{2} \right), \quad (7)$$

步进算子为 $\Phi(z_k) = z_{k+1}$, $\Phi: z_k \rightarrow z_{k+1}$ 满足

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial z_k} \end{pmatrix}^T \mathbf{J} \begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial z_k} \end{pmatrix} = \mathbf{J}. \quad (8)$$

保离散的辛结构

$$dz_{k+1} \wedge \mathbf{J} dz_{k+1} = dz_k \wedge \mathbf{J} dz_k, \quad (9)$$

冯康和其保结构算法组成员对 Hamiltonian 系统进行了系统的研究, 提出了辛几何算法, 发展了生成函数理论, 在此基础上构造了种类繁多的任意阶精度的辛格式, 研究了它的对称性和守恒律^[1~3]。辛几何算法已在天体力学、分子动力学、刚体和多刚体运动等众多领域中得到了成功的应用。

当方程(1)的 \mathbf{J} 是一个斜对称的常数矩阵时, 方程(1)称为 Poisson 系统。系统(1)的相流 $\Phi^h(z(t)) := z(t+h)$ 是一个 Poisson 变换, 如果满足 Poisson 结构

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial z(t)}{\partial z_0} \end{pmatrix} \mathbf{J}(z_0) \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t)}{\partial z_0} \end{pmatrix}^T = \mathbf{J}(z(t)), \quad (10)$$

在文献[4]和文献[5], \mathbf{J} 是一个斜对称的常数矩阵时, 辛 Runge_Kutta 方法保 Poisson 结构。

当 \mathbf{J} 是关于 z 的斜对称矩阵时, 即 $\mathbf{J}(z) = -\mathbf{J}^T(z)$ 满足

$$\sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial J_{ij}(z)}{\partial z_l} J_{lk}(z) + \frac{\partial J_{jk}(z)}{\partial z_l} J_{li}(z) + \frac{\partial J_{ki}(z)}{\partial z_l} J_{jl}(z) \right) = 0, \quad (11)$$

$i, j, k = 1, \dots, m,$

称矩阵 $\mathbf{J}(z)$ 为 Poisson 矩阵和系统(1)称为 Poisson 系统。变换 $\Phi: R^m \rightarrow R^m$ 称为 Poisson 变换, 如果满足 Poisson 结构

$$\Phi_z(z) \mathbf{J}(z) \Phi_z^T(z) = \mathbf{J}(\Phi(z)), \quad (12)$$

经典的辛 Runge_Kutta 方法和一般辛方法不保 Poisson 结构(12)^[6,7]。下面通过一个非线性变换把非常数的 Poisson 结构转化成辛结构。

1 Poisson 系统转化成辛结构

对自由刚体问题

$$\begin{pmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \\ \dot{z}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -z_3 & z_2 \\ z_3 & 0 & -z_1 \\ -z_2 & z_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial H / \partial z_1 \\ \partial H / \partial z_2 \\ \partial H / \partial z_3 \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$H = \sum b_i z_i^2 + \sum b_{ij} z_i z_j = (b_{11} z_1^2 + b_{22} z_2^2 + b_{33} z_3^2 + (b_{12} + b_{21}) z_1 z_2 + (b_{13} + b_{31}) z_1 z_3 + (b_{23} + b_{32}) z_2 z_3). \quad (14)$$

定理 1 自由刚体问题的 Casimir 函数 $L = z_1^2 + z_2^2 + z_3^2$ 是一个常数。

证明 方程(13)可写成

$$\begin{pmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \\ \dot{z}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Psi_1 & -\Psi_2 \\ -\Psi_1 & 0 & \Psi_3 \\ \Psi_2 & -\Psi_3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix},$$

其中 $\Psi_1 = (b_{13} + b_{31})z_1 + (b_{23} + b_{32})z_2 + 2b_{33}z_3$, $\Psi_2 = (b_{12} + b_{21})z_1 + (b_{23} + b_{32})z_3 + 2b_{22}z_2$, $\Psi_3 = (b_{13} + b_{31})z_3 + (b_{12} + b_{21})z_2 + 2b_{11}z_1$. 方程(13)可写成 $dz/dt = S(z)z$, $z = (z_1, z_2, z_3)^T$, $S(z)$ 是斜对称矩阵. 由

$$\frac{dz^T z}{dt} = (z')^T z + z^T z' = z^T S^T(z)z + z^T S(z)z = z^T (S^T(z) + S(z))z = 0, \tag{15}$$

可知 Casimir 函数 $L(z) = z^T z = z_1^2 + z_2^2 + z_3^2 = \text{const}$. 方程(13)有模平方和守恒的特性. 方程(13)是非常数的 Poisson 系统

$$\frac{dz}{dt} = J(z) \cdot \nabla H(z), J^T(z) = -J(z), \tag{16}$$

辛算法中的中点格式, 生成函数法, 分裂方法对非常数 Poisson 系统(16)的数值求解都不甚理想的.

考虑一个非线性变换 $u = \Lambda(z)$, 使得非常数 Poisson 系统在新的坐标里变成一个辛结构. 由 Darboux 定理可知, 这样的变换是局部存在的. 现在我们把非常数的 Poisson 结构转化成辛结构. 设 $u = \Lambda(z)$ 的逆变换为 $z = g(u)$. 定义 $h(u) := H(g(u))$, 从 $u' = \Lambda_z(z)z'$ 得到

$$u' = j(u) h_u^T(u), \tag{17}$$

其中 $j(u) = \Lambda_z(g(u))J(g(u))\Lambda_z^T(g(u))$, 对 u 是 Poisson 结构矩阵. 设 $u = \Lambda(z)$, 可得到 u 关于 z 的导数.

$$\Lambda_z(z) = \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} & \Lambda_{13} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} & \Lambda_{23} \\ \Lambda_{31} & \Lambda_{32} & \Lambda_{33} \end{pmatrix}, \tag{18}$$

设 $\Lambda_z(z)J(z)\Lambda_z^T(z) = A$ 可以写成

$$\begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} & \Lambda_{13} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} & \Lambda_{23} \\ \Lambda_{31} & \Lambda_{32} & \Lambda_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -z_3 & z_2 \\ z_3 & 0 & -z_1 \\ -z_2 & z_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{21} & \Lambda_{31} \\ \Lambda_{12} & \Lambda_{22} & \Lambda_{32} \\ \Lambda_{13} & \Lambda_{23} & \Lambda_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, \tag{19}$$

方程(19)等价于

$$a_{11} = (\Lambda_{13}\Lambda_{12} - \Lambda_{12}\Lambda_{13})z_1 + (\Lambda_{11}\Lambda_{13} - \Lambda_{13}\Lambda_{11})z_2 + (\Lambda_{12}\Lambda_{11} - \Lambda_{11}\Lambda_{12})z_3, \tag{20}$$

$$a_{12} = (\Lambda_{13}\Lambda_{22} - \Lambda_{12}\Lambda_{23})z_1 + (\Lambda_{11}\Lambda_{23} - \Lambda_{13}\Lambda_{21})z_2 + (\Lambda_{12}\Lambda_{21} - \Lambda_{11}\Lambda_{22})z_3, \tag{21}$$

$$a_{13} = (\Lambda_{13}\Lambda_{32} - \Lambda_{12}\Lambda_{33})z_1 + (\Lambda_{11}\Lambda_{33} - \Lambda_{13}\Lambda_{31})z_2 + (\Lambda_{12}\Lambda_{31} - \Lambda_{11}\Lambda_{32})z_3, \tag{22}$$

$$a_{21} = (\Lambda_{12}\Lambda_{23} - \Lambda_{13}\Lambda_{22})z_1 + (\Lambda_{13}\Lambda_{21} - \Lambda_{11}\Lambda_{23})z_2 + (\Lambda_{11}\Lambda_{22} - \Lambda_{12}\Lambda_{21})z_3, \tag{23}$$

$$a_{22} = (\Lambda_{23}\Lambda_{22} - \Lambda_{22}\Lambda_{23})z_1 + (\Lambda_{21}\Lambda_{23} - \Lambda_{23}\Lambda_{21})z_2 + (\Lambda_{22}\Lambda_{21} - \Lambda_{21}\Lambda_{22})z_3, \tag{24}$$

$$a_{23} = (\Lambda_{23}\Lambda_{32} - \Lambda_{22}\Lambda_{33})z_1 + (\Lambda_{21}\Lambda_{33} - \Lambda_{23}\Lambda_{31})z_2 + (\Lambda_{22}\Lambda_{31} - \Lambda_{21}\Lambda_{32})z_2, \tag{25}$$

$$a_{31} = (\Lambda_{33}\Lambda_{12} - \Lambda_{32}\Lambda_{13})z_1 + (\Lambda_{31}\Lambda_{13} - \Lambda_{33}\Lambda_{11})z_2 + (\Lambda_{32}\Lambda_{11} - \Lambda_{31}\Lambda_{12})z_3, \tag{26}$$

$$a_{32} = (\Lambda_{33}\Lambda_{22} - \Lambda_{32}\Lambda_{23})z_1 + (\Lambda_{31}\Lambda_{23} - \Lambda_{33}\Lambda_{21})z_2 + (\Lambda_{32}\Lambda_{21} - \Lambda_{31}\Lambda_{22})z_3, \tag{27}$$

$$a_{33} = (\Lambda_{33}\Lambda_{32} - \Lambda_{32}\Lambda_{33})z_1 + (\Lambda_{31}\Lambda_{33} - \Lambda_{33}\Lambda_{31})z_2 + (\Lambda_{32}\Lambda_{31} - \Lambda_{31}\Lambda_{32})z_3, \tag{28}$$

从方程(20)~(28)知 $a_{11} = a_{22} = a_{33} = 0$, $a_{12} = -a_{21}$, $a_{13} = -a_{31}$, $a_{32} = -a_{23}$. 设矩阵 A 等于下面的辛矩阵

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (29)$$

只需下面的等式成立

$$1 = (\Lambda_{13} \Lambda_{22} - \Lambda_{12} \Lambda_{23})z_1 + (\Lambda_{11} \Lambda_{23} - \Lambda_{13} \Lambda_{21})z_2 + (\Lambda_{12} \Lambda_{21} - \Lambda_{11} \Lambda_{22})z_3, \quad (30)$$

$$0 = (\Lambda_{13} \Lambda_{32} - \Lambda_{12} \Lambda_{33})z_1 + (\Lambda_{11} \Lambda_{33} - \Lambda_{13} \Lambda_{31})z_2 + (\Lambda_{12} \Lambda_{31} - \Lambda_{11} \Lambda_{32})z_3, \quad (31)$$

$$0 = (\Lambda_{23} \Lambda_{32} - \Lambda_{22} \Lambda_{33})z_1 + (\Lambda_{21} \Lambda_{33} - \Lambda_{23} \Lambda_{31})z_2 + (\Lambda_{22} \Lambda_{31} - \Lambda_{21} \Lambda_{32})z_3, \quad (32)$$

由 $(\Lambda_3(z))' = 0$, 可知 $\Lambda_3(z)$ 是一个常量, 由定理(1)知 Casimir 函数是一个常数, 取

$$\Lambda_3(z) = L(z) := (1/2)(z_1^2 + z_2^2 + z_3^2), \quad (33)$$

取 $\Lambda_1(z) := z_1$, 只需寻找一个函数 $\Lambda_2(z)$ 满足

$$1 = z_2 \Lambda_{z_3} - z_3 \Lambda_{z_2}, \quad (34)$$

取 $\Lambda_2(z) := \arctan(z_3/z_2)$ 可满足方程(34). 这样通过非线性变换, 变量 (z_1, z_2, z_3) 可用辛变量 u_1, u_2 表示

$$z_1 = u_1, \quad z_2 = \sqrt{2L - u_1^2} \cos(u_2), \quad z_3 = \sqrt{2L - u_1^2} \sin(u_2), \quad (35)$$

自由刚体问题(13)可用辛变量 u_1, u_2 表示

$$\begin{aligned} u_1' &= \sqrt{2L - u_1^2} (b_{13} \cos(u_2) + b_{12} \sin(u_2)) + \\ &\quad (1/2)(2L - u_1^2)(b_2 + b_3) \sin(2u_2) + b_{23}(2L - u_1^2) \cos(2u_2), \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} u_2' &= (b_2 + b_{23})u_1 \cos(u_2) + (b_3 + b_{23})u_1 \sin(u_2) - \\ &\quad (b_1 u_1 + \sqrt{2L - u_1^2} (b_{12} \cos(u_2) + b_{13} \sin(u_2))), \end{aligned} \quad (37)$$

当矩阵 A 取下面的辛矩阵时, 可得到 Poisson 系统中自由刚体问题的另外两种不同的辛结构

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (38)$$

2 数值实验

一个典型的刚体问题是 Euler 方程

$$\frac{d}{dt} \Pi = \mathcal{L} \cdot H \times \mathcal{L} \cdot L, \quad (39)$$

其中 $H = \frac{\Gamma_1^2}{2I_1} + \frac{\Gamma_2^2}{2I_2} + \frac{\Gamma_3^2}{2I_3}$ 是能量函数, $L = \frac{1}{2}(\Gamma_1^2 + \Gamma_2^2 + \Gamma_3^2)$ 是角动量的平方. $\Pi = (\Pi_1,$

$\Pi_2, \Pi_3)^T \in R^3$ 是角动量, 取 $I_1 = 1, I_2 = \sqrt{2} - \frac{0.51\sqrt{2}}{\sqrt{1.51}}, I_3 = \sqrt{2} + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{1.51}}, \Pi(0) = \left[0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right]^T,$

$t > 0$, 通过非线性变换, 方程(39)可用具有辛特性的变量 u_1, u_2 表示

$$\frac{du}{dt} = \mathbf{J} \cdot \mathcal{L} \cdot h(u), \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (40)$$

$$u = (u_1, u_2)^T,$$

$$h(u_1, u_2) = \frac{1}{2} \left[\frac{u_1^2}{I_1} + \frac{(2L - u_1^2) \cos^2(u_2)}{I_2} + \frac{(2L - u_1^2) \sin^2(u_2)}{I_3} \right],$$

利用辛 Euler 中点格式到方程(40), 可计算变换的 Euler 方程, 从而可得到 Euler 方程的数值解

定义 $E_n(t) = (z_1^2(nh) + z_2^2(nh) + z_3^2(nh)) - (z_1^2(0) + z_2^2(0) + z_3^2(0))$ 表示在时间 $t = nh$ 与 $t = 0$ 的模平方和误差. 图 1 表示变换的 Euler 方程(40)分量 u_1 在 $t = [0, 30]$ 的数值解.

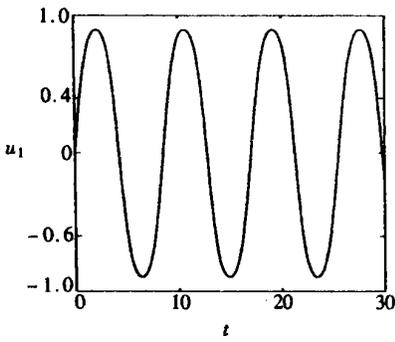


图 1 变换的 Euler 方程(40)分量 u_1 在 $t = [0, 30]$ 的数值解

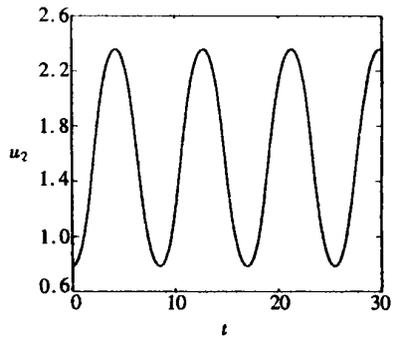


图 2 变换的 Euler 方程(40)分量 u_2 在 $t = [0, 30]$ 的数值解

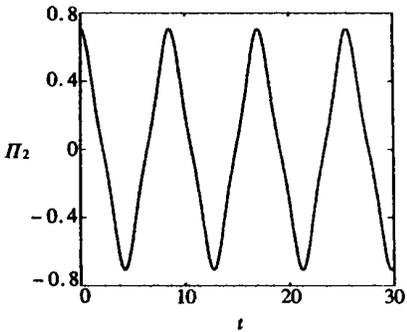


图 3 Euler 方程的角动量 Π_2 在 $t = [0, 30]$ 的数值解

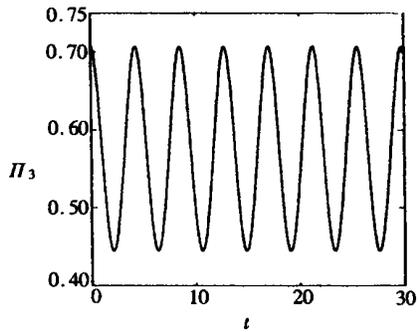


图 4 Euler 方程的角动量 Π_3 在 $t = [0, 30]$ 的数值解

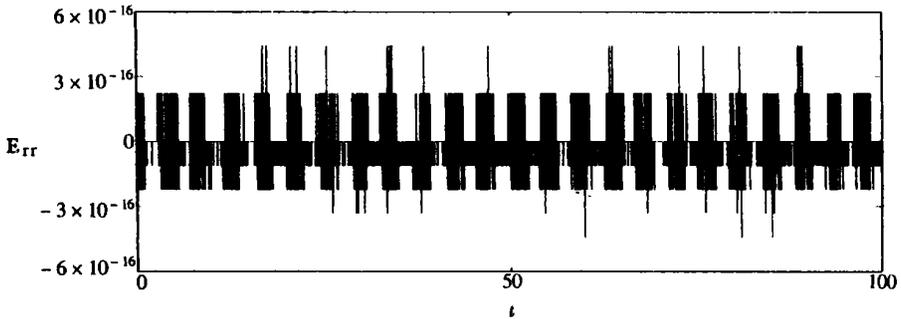


图 5 Euler 方程模平方和误差

图 2 表示变换的 Euler 方程(40)分量 u_2 在 $t = [0, 30]$ 的数值解。利用方程(35), 可得到自由刚体问题的角动量分量的运动。图 1 表示 Euler 方程的角动量 Π_1 在 $t = [0, 30]$ 的数值解, 可知 Π_1 的运动是一条正弦曲线。图 3 表示 Euler 方程的角动量 Π_2 在 $t = [0, 30]$ 的数值解。可知 Π_2 的运动是一条余弦曲线。图 4 表示 Euler 方程的角动量 Π_3 在 $t = [0, 30]$ 的数值解, 可知 Π_3 的运动也是一条余弦曲线。图 5 表示模平方和误差, 误差不增长, 可忽略, 可知该方法能很好地保方程的模平方守恒特性。通过数值计算表明该方法能长时间模拟 Euler 方程的运动和很好地保 Euler 方程模平方守恒特性。

3 结 论

利用非线性变换得到了非常数 Poisson 结构的辛结构, 然后把刚体问题中的 Euler 方程转化成辛结构, 用辛中点格式进行数值求解, 能长时间地模拟 Euler 角动量 z 的分量 z_1, z_2, z_3 的运动和保方程的模守恒特性。该方法可应用到其它刚体问题的数值求解。

[参 考 文 献]

- [1] HONG Jia_lin. A novel numerical approach to simulate nonlinear Schrödinger equations with varying coefficients[J]. Applied Mathematical Letter, 2003, 16: 759—765.
- [2] Feng K. Difference schemes for Hamiltonian formulation and symplectic geometry[J]. J Comp Math, 1986, 4(3): 279—289.
- [3] Feng K, Wu H M, Qin M Z, et al. Construction of canonical difference schemes for Hamiltonian formalism via generating functions[J]. J Comp Math, 1989, 7(1): 71—96.
- [4] QIN Meng_zhao, Li S T. A note for Lie_Poisson Hamiltonian_Jacobi equation and Lie_Poisson integrator[J]. Computers Mathematical Application, 1995, 30(7): 67—74.
- [5] McLachlan R I. Explicit Lie_Poisson integration and the Euler equations[J]. Phys Rev Lett, 1993, 71: 3043—3046.
- [6] Li S T, QIN Meng_zhao. Lie_Poisson integration for rigid body dynamics[J]. Computers Mathematical Application, 1995, 30(9): 105—118.
- [7] Zhu W, Qin M. Poisson schemes for Hamiltonian system on Poisson manifolds[J]. Computers Mathematical Application, 1994, 27(12): 7—16.

Symplectic Structure of Poisson System

SUN Jian_qiang^{1, 2}, MA Zhong_qi¹, TIAN Yi_min³, QIN Meng_zhao⁴

(1. Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences,

Beijing 100039, P. R. China;

2. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics,

Beijing 100088, P. R. China;

3. Institute of Software, Chinese Academy of Sciences,

Beijing 100080, P. R. China

4. Institute of Computational Mathematics, Chinese Academy of Sciences,

Beijing 100080, P. R. China)

Abstract: When the Poisson matrix of Poisson system is non_constant, classical symplectic methods, such as symplectic Runge_Kutta method, generating function method, cannot preserve the Poisson structure. The non_constant Poisson structure was transformed into the symplectic structure by the nonlinear transform. Arbitrary order symplectic method was applied to the transformed Poisson system. The Euler equation of the free rigid body problem was transformed into the symplectic structure and computed by the mid_point scheme. Numerical results show the effectiveness of the nonlinear transform.

Key words: Poisson system; nonlinear transformation; symplectic method; rigid body problem