

# Hamilton 系统的连续有限元法<sup>\*</sup>

汤 琼<sup>1,2</sup>, 陈传森<sup>1</sup>

(1. 湖南师范大学 数学与计算机科学学院, 长沙 410081;  
2. 湖南工业大学 信息与计算科学系, 湖南 株洲 412008)

(钟万勰推荐)

摘要: 利用常微分方程的连续有限元法, 对非线性 Hamilton 系统证明了连续一次、二次有限元法分别是 2 阶和 3 阶的拟辛格式, 且保持能量守恒; 连续有限元法是辛算法对线性 Hamilton 系统, 且保持能量守恒. 在数值计算上探讨了辛性质和能量守恒性, 与已有的辛算法进行对比, 结果与理论相吻合.

关键词: Hamilton 方程; 连续有限元方法; 拟辛算法; 能量守恒  
中图分类号: O242 文献标识码: A

## 引 言

Hamilton 系统是动力系统的重要体系, 关于 Hamilton 系统的长期模拟, 近年来吸引了许多学者的兴趣. 辛格式和能量守恒是 Hamilton 系统的重要特征. 冯康<sup>[1,2]</sup>和他的研究小组提出了 Hamilton 系统的辛几何算法, 即算法的每一步进都是辛变换; J. M. Sanz-Serna<sup>[3]</sup>研究了 Hamilton 系统的辛 Runge-Kutta 格式; A. Aubry, P. Chartier<sup>[4]</sup>利用根树理论构造了拟辛的 Runge-Kutta 方法; Simo, Gonzalez<sup>[5]</sup>等人研究了辛算法的稳定性; Marsden, Ortiz, Kane<sup>[6]</sup>等利用变分方法研究了力学系统的辛能量动量守恒性; Bridges, Reich<sup>[7]</sup>等利用 Lagrange 变换研究 Hamilton 系统的多辛格式. 对线性 Hamilton 系统辛算法能保持能量守恒, 但对非线性的 Hamilton 系统, 能量为近似守恒.

本文利用连续有限元法研究了 Hamilton 系统的能量守恒和拟辛特征. 第 1 节利用常微分方程的连续有限元法, 证明了 Hamilton 系统保持能量守恒; 第 2 节证明了非线性 Hamilton 系统连续一次有限元法是 2 阶的拟辛格式, 特别的, 对线性 Hamilton 系统线性元是辛格式, 且保持能量守恒. 第 3 节证明了非线性 Hamilton 系统连续二次有限元法是 3 阶的拟辛格式, 对线性 Hamilton 系统二次元是辛格式, 且保持能量守恒. 第 4 节的数值试验结果与理论一致.

## 1 常微分方程的连续有限元法及守恒性

在区间  $J = [0, T]$  上考虑一阶常微分方程初值问题

\* 收稿日期: 2006-10-12; 修订日期: 2007-05-18

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10471038); 湖南省教育厅资助项目(05C525)

作者简介: 汤琼(1972—), 女, 湖南浏阳人, 副教授, 博士生(联系人. Tel: + 86-733-2622838; E-mail: zgxysx@163.com);

陈传森(Tel: + 86-713-8871806; E-mail: cmchen@hunnu.edu.cn).

$$\frac{du}{dt} = u' = f(t, u), \quad u(0) = u_0 \quad (1)$$

将  $J$  作拟一致剖分  $J^h: t_0 = 0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N = T$ , 单元  $I_j = (t_{j-1}, t_j)$ , 最大步长  $h = \max h_j, h_j \geq Ch, 1 \leq j \leq N$ . 常数  $C$  与  $j, h$  无关. 在此剖分上记连续且分片  $m$  次有限元空间

$$S^h = \left\{ w \mid w \in C(J), w \mid_{I_j} \in P_m \right\}.$$

解初值问题时可逐层单元求解. 连续有限元空间  $S^h$  中的元素  $U$  在每个单元  $I_j$  上是  $m$  次多项式, 有  $m+1$  个参数, 但在左端点的值  $U(t_{j-1}) = U_{j-1}$  已知, 故在  $I_j$  上只有  $m$  个自由度. 定义  $m$  次连续有限元解  $U \in S^h$  在每个单元  $I_j$  上满足<sup>[8,9]</sup>:

$$\int_{I_j} (U' - f(t, U))v dt = 0, \quad v \in P_{m-1}, \quad U(0) = u_0 \quad (2)$$

即在单元  $I_j$  上与任意  $m-1$  次多项式  $P_{m-1}$  正交. 若取  $w \in S^h$ , 其导数  $w'$  是  $m-1$  次多项式.

这里  $v$  在  $I_j$  上是  $m-1$  次多项式, 实际计算时可以取  $v = (t - t_{j-1})^i, i = 0, 1, \dots, m-1$ .

引理 1<sup>[9,10]</sup> 微分方程的  $m$  次连续有限元在单元节点  $t_j$  上有超收敛

$$(u - U)(t_j) = O(h^{2m}) \|u\|_{m+1, \infty} \quad (3)$$

考虑有限维自治的 Hamilton 正则系统  $H(p, q)$ :

$$p' = -H_q, \quad q' = H_p \quad (4)$$

其中  $p = (p_1, p_2, \dots, p_n)^T, q = (q_1, q_2, \dots, q_n)^T, T$  表矩阵的转置. 应用到力学,  $p, q, H$  分别表示动量、位移和能量, 记  $\Phi_H$  是方程(4)的相流.

令  $z = \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix}$ , 式(4)可表为  $z' = J^{-1}H_z$ , 其中  $J = \begin{bmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{bmatrix}, I_n$  为  $n$  阶单位矩阵,  $H_z =$

$$\begin{bmatrix} H_p \\ H_q \end{bmatrix}.$$

记  $Sp(2n)$  表所有辛阵组成的辛群, 若  $S \in Sp(2n)$ , 则矩阵  $S$  满足  $S^T J S = J$ .

定义 1<sup>[1]</sup> 一个变换  $z \rightarrow \hat{z}$  称为  $R^{2n}$  上正则变换, 如果对于每一个点  $z$  它的 Jacobi 矩阵  $\partial \hat{z} / \partial z = S$  是辛矩阵.

引理 2<sup>[1]</sup> 矩阵  $S = M^{-1}N \in Sp(2n)$ , 当且仅当  $MJM^T = NJN^T$ .

定义 2<sup>[4]</sup> 应用到 Hamilton 系统步长为  $h$  的单步法称为具有  $s$  阶的拟辛算法是它的相流  $\Phi_H$  满足  $\Phi_H^T J \Phi_H = J + O(h^{s+1})$ . 其中  $\Phi_H$  是它的 Jacobi 矩阵.

记方程组  $z' = J^{-1}H_z$  的  $m$  次连续有限元  $Z = \begin{bmatrix} P \\ Q \end{bmatrix}$ , 则满足正交关系

$$\int_{I_j} (Z + JH_z)v dt = 0, \quad Z(0) = z(0) \quad (5)$$

取  $v = \begin{bmatrix} Q' \\ P' \end{bmatrix}$ , 得

$$\begin{cases} \int_{I_j} (P' + H_q(P, Q))Q' dt = 0, & P(0) = p_0, \\ \int_{I_j} (Q' - H_p(P, Q))P' dt = 0, & Q(0) = q_0 \end{cases} \quad (6)$$

两式相减得

$$\int_{t_j} (H_q Q' + H_p P') dt = \int_{t_j} \frac{d}{dt} H(P, Q) dt = 0 \quad (7)$$

故在任何节点  $t_j$  上,  $H(P(t_j), Q(t_j)) = H(p_0, q_0)$ .

定理 1 用任意次连续有限元求解 Hamilton 方程组, 其能量是守恒的.

## 2 一般 Hamilton 系统的连续一次有限元法和拟辛格式

考虑一般 Hamilton 系统

$$\dot{z} = -JH_z(z), \quad z(0) = z_0, \quad (8)$$

$z$  的一次连续有限元  $Z = Z(t) = l_1(t)Z_{j-1} + l_2(t)Z_j, t \in (t_{j-1}, t_j)$ . 其中形函数满足  $l_1 + l_2 = 1$ .

在区间  $(t_{j-1}, t_j)$  上定义  $Z$  满足

$$(Z', 1) = -J(H_z(Z), 1). \quad (9)$$

左式积分得  $Z_j - Z_{j-1} = -J(H_z(Z), 1)$ . 对  $Z_{j-1}$  求偏导得

$$\frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}} = I - J(H_{zz}l_1, 1) - J(H_{zz}l_2, 1) \frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}}$$

即

$$\frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}} = (I + J(H_{zz}l_2, 1))^{-1}(I - J(H_{zz}l_1, 1)). \quad (10)$$

由  $l_1 + l_2 = 1$ , 记  $M = I + J(H_{zz}l_2, 1), N = I - J(H_{zz}l_1, 1)$ , 可得

$$NJN^T = MJM^T - J(H_{zz}l_1, 1)J(H_{zz}, 1)J + J(H_{zz}, 1)J(H_{zz}l_2, 1)$$

取  $t = h_j x/2 + (t_{j-1} + t_j)/2$ , 则  $l_1 = (1-x)/2, l_2 = (1+x)/2$ , 可得

$$\begin{aligned} (H_{zz}l_1, 1)J(H_{zz}, 1) - (H_{zz}, 1)J(H_{zz}l_2, 1) = \\ -\frac{h_j^2}{8}((H_{zz}x, 1)J(H_{zz}, 1) + (H_{zz}, 1)J(H_{zz}x, 1)). \end{aligned}$$

此等式左端积分在区间  $(t_{j-1}, t_j)$ , 右端积分在区间  $(-1, 1)$ .

考虑分部积分

$$\int_{-1}^1 H_{zz}x dx = \int_{-1}^1 H_{zz}d\left(\frac{x^2-1}{2}\right) = -\frac{h_j}{4}\int_{-1}^1 (1-x^2)H_{zz}JH_z dx, \quad (11)$$

若  $H$  有三阶偏导数, 则

$$\begin{aligned} NJN^T = MJM^T - \frac{h_j^3}{32}J(((1-x^2)H_{zzz}, JH_z)J(H_{zz}, 1) - \\ (H_{zz}, 1)J((1-x^2)H_{zzz}, JH_z))J = MJM^T + O(h_j^3)A \end{aligned}$$

由定义 1, 引理 2 得

$$\left(\frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}}\right)^T J \left(\frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}}\right) = J + O(h_j^3)B. \quad (12)$$

由定义 2, 引理 1 可证明定理 2.

定理 2 一次元是 2 阶的拟辛算法对一般的 Hamilton 系统, 即

$$\left(\frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}}\right)^T J \left(\frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}}\right) = J + O(h^3)S,$$

具有 2 阶精度, 且保持能量守恒.

特殊的, 对线性的 Hamilton 系统

$H(z) = (1/2)z^T L z, L^T = L \cdot$  则  $H_z = L, (Lz, 1)J(L, 1)$  为零阵, 由以上分析得  $NJN^T = MJM^T$ , 即对线性的 Hamilton 系统一次连续有限元是辛格式, 且保持能量守恒.

### 3 一般 Hamilton 系统的连续二次有限元法和拟辛格式

$Z$  是  $z$  的二次连续有限元:

$$Z = Z(t) = l_0(t)Z_{j-1} + l_1(t)Z_{j-1/2} + l_2(t)Z_j, \quad t \in (t_{j-1}, t_j) \cdot$$

其中形函数满足  $l_0 + l_1 + l_2 = 1$ , 故  $\dot{l}_0 + \dot{l}_1 + \dot{l}_2 = 0$ , 记  $(\cdot)$  为区间  $[t_{j-1}, t_j]$  上的内积, 考虑基函数

$$q_1 = \frac{(\dot{l}_2, \dot{l}_2)\dot{l}_1 - (\dot{l}_1, \dot{l}_2)\dot{l}_2}{(\dot{l}_1, \dot{l}_1)(\dot{l}_1, \dot{l}_2) - (\dot{l}_1, \dot{l}_2)^2}, \quad q_2 = \frac{(\dot{l}_1, \dot{l}_1)\dot{l}_2 - (\dot{l}_1, \dot{l}_2)\dot{l}_1}{(\dot{l}_1, \dot{l}_1)(\dot{l}_2, \dot{l}_2) - (\dot{l}_1, \dot{l}_2)^2}$$

它满足  $(q_1, \dot{l}_1) = 1, (q_2, \dot{l}_2) = 1, (q_1, \dot{l}_2) = 0, (q_2, \dot{l}_1) = 0$ , 二次连续有限元在单元  $I_j$  上满足  $(Z', q_1) = -J(H_z(Z), q_1), (Z', q_2) = -J(H_z(Z), q_2) \cdot$  (13)

将  $Z' = \dot{l}_0 Z_{j-1} + \dot{l}_1 Z_{j-1/2} + \dot{l}_2 Z_j$  代入式 (13), 由形函数性质, 可得

$$Z_{j-1/2} = Z_{j-1} - J(H_z(Z), q_1), \quad Z_j = Z_{j-1} - J(H_z(Z), q_2) \cdot$$
 (14)

对  $Z_{j-1}$  求偏导得

$$\begin{cases} \frac{\partial Z_{j-1/2}}{\partial Z_{j-1}} = I - J \left[ H_{zz} l_0 + H_{zz} l_1 \frac{\partial Z_{j-1/2}}{\partial Z_{j-1}} + H_{zz} l_2 \frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}}, q_1 \right], \\ \frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}} = I - J \left[ H_{zz} l_0 + H_{zz} l_1 \frac{\partial Z_{j-1/2}}{\partial Z_{j-1}} + H_{zz} l_2 \frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}}, q_2 \right]. \end{cases}$$
 (15)

整理得

$$\begin{cases} (I + J(H_{zz} l_1, q_1)) \frac{\partial Z_{j-1/2}}{\partial Z_{j-1}} + J(H_{zz} l_2, q_1) \frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}} = I - J(H_{zz} l_0, q_1), \\ J(H_{zz} l_1, q_2) \frac{\partial Z_{j-1/2}}{\partial Z_{j-1}} + (I + J(H_{zz} l_2, q_2)) \frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}} = I - J(H_{zz} l_0, q_2). \end{cases}$$
 (16)

类似的可得

$$\frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}} = M^{-1}N,$$

其中

$$M = I + J(H_{zz} l_2, q_2) - J(H_{zz} l_2, q_1)(I + J(H_{zz} l_1, q_1))^{-1}J(H_{zz} l_1, q_2),$$

$$N = I - J(H_{zz} l_0, q_2) - (I - J(H_{zz} l_0, q_1))(I + J(H_{zz} l_1, q_1))^{-1}J(H_{zz} l_1, q_2) \cdot$$

由  $l_0 + l_1 + l_2 = 1$  得

$$N = M - J(H_{zz}, q_2) + J(H_{zz}, q_1)(I + J(H_{zz} l_1, q_1))^{-1}J(H_{zz} l_1, q_2) \cdot$$

记

$$A = (H_{zz}, q_1), \quad B = (H_{zz}, q_2), \quad C = (H_{zz} l_1, q_1),$$

$$D = (H_{zz} l_1, q_2), \quad E = (H_{zz} l_2, q_1), \quad F = (H_{zz} l_2, q_2),$$

可得

$$NJN^T = MJM^T + J(FJB + BJF + DJ(I - CJ)^{-1}A + A(I + JC)^{-1}JD - BJB + BJDJ(I - CJ)^{-1}E - E(I + JC)^{-1}JDJB + FJDJ(I - CJ)^{-1}A - A(I + JC)^{-1}JDJF + A(I + JC)^{-1}JDJB - BJDJ(I - CJ)^{-1}A - E(I + JC)^{-1}JDJDJ(I - CJ)^{-1}A - A(I + JC)^{-1}JDJDJ(I - CJ)^{-1}E +$$

$$A(I+JC)^{-1}JDJDJ(I-CJ)^{-1}AJ \quad (17)$$

取  $l_0, l_1, l_2$  为 Lagrange 型基函数, 进行坐标变换:

$$t = \frac{h_j}{2}x + \frac{t_{j-1} + t_j}{2}, \quad x \in [-1, 1], \quad q_1 = \frac{2-3x}{4}, \quad q_2 = 1,$$

得

$$\begin{aligned} A &= \frac{h_j}{2} \left[ \mathbf{H}_{zz}, \frac{2-3x}{4} \right] = \frac{h_j}{2} \mathbf{A}_1, \quad \mathbf{B} = \frac{h_j}{2} (\mathbf{H}_{zz}, 1) = \frac{h_j}{2} \mathbf{B}_1, \\ C &= \frac{h_j}{2} \left[ \mathbf{H}_{zz}(1-x^2), \frac{2-3x}{4} \right] = \frac{h_j}{2} \mathbf{C}_1, \quad \mathbf{D} = \frac{h_j}{2} (\mathbf{H}_{zz}(1-x^2), 1) = \frac{h_j}{2} \mathbf{D}_1, \\ E &= \frac{h_j}{2} \left[ \mathbf{H}_{zz} \frac{x^2+x}{2}, \frac{2-3x}{4} \right] = \frac{h_j}{2} \mathbf{E}_1, \quad \mathbf{F} = \frac{h_j}{2} \left[ \mathbf{H}_{zz} \frac{x^2+x}{2}, 1 \right] = \frac{h_j}{2} \mathbf{F}_1. \end{aligned}$$

此处积分在标准区间  $[-1, 1]$  由式(17), 可得

$$\begin{aligned} \mathbf{N}\mathbf{J}\mathbf{N}^T &= \mathbf{M}\mathbf{J}\mathbf{M}^T + \frac{h_j^2}{4} \mathbf{J}(\mathbf{F}_1\mathbf{J}\mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_1\mathbf{J}\mathbf{F}_1 + \mathbf{D}_1\mathbf{J}(\mathbf{I}-\mathbf{C}\mathbf{J})^{-1}\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_1(\mathbf{I}+\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{J}\mathbf{D}_1 - \\ &\quad \mathbf{B}_1\mathbf{J}\mathbf{B}_1)\mathbf{J} + \frac{h_j^3}{8} \mathbf{J}(\mathbf{B}_1\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}(\mathbf{I}-\mathbf{C}\mathbf{J})^{-1}\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_1(\mathbf{I}+\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}\mathbf{B}_1 + \mathbf{F}_1\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}(\mathbf{I}- \\ &\quad \mathbf{C}\mathbf{J})^{-1}\mathbf{A}_1 - \mathbf{A}_1(\mathbf{I}+\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}\mathbf{F}_1 + \mathbf{A}_1(\mathbf{I}+\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}\mathbf{B}_1 - \\ &\quad \mathbf{B}_1\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}(\mathbf{I}-\mathbf{C}\mathbf{J})^{-1}\mathbf{A}_1)\mathbf{J} + \frac{h_j^4}{16} \mathbf{J}(-\mathbf{E}(\mathbf{I}+\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}(\mathbf{I}- \\ &\quad \mathbf{C}\mathbf{J})^{-1}\mathbf{A}_1 - \mathbf{A}_1(\mathbf{I}+\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}(\mathbf{I}-\mathbf{C}\mathbf{J})^{-1}\mathbf{E}_1 + \\ &\quad \mathbf{A}_1(\mathbf{I}+\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}\mathbf{D}_1\mathbf{J}(\mathbf{I}-\mathbf{C}\mathbf{J})^{-1}\mathbf{A}_1)\mathbf{J}. \end{aligned} \quad (18)$$

利用分部积分, 和 Hamilton 方程  $\dot{z}_t = -\mathbf{J}\mathbf{H}_z$ , 得

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \mathbf{H}_{zz} \left( x^2 - \frac{1}{3} \right) dx &= \int_{-1}^1 \mathbf{H}_{zz} d \left( \frac{x^3 - x}{3} \right) = -\frac{1}{3} \int_{-1}^1 (x^3 - x) \mathbf{H}_{zz} \frac{dz}{dx} dx = \\ &= \frac{h_j}{6} \int_{-1}^1 (x^3 - x) \mathbf{H}_{zz} \mathbf{J}\mathbf{H}_z dx = \frac{h_j}{6} \int_{-1}^1 \mathbf{H}_{zz} \mathbf{J}\mathbf{H}_z d \left( \frac{x^4}{4} - \frac{x^2}{2} + \frac{1}{4} \right) = O(h_j^2) \mathbf{G}_2. \end{aligned} \quad (19)$$

故

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1\mathbf{J}\mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_1\mathbf{J}\mathbf{F}_1 + \mathbf{D}_1\mathbf{J}(\mathbf{I}-\mathbf{C}\mathbf{J})^{-1}\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_1(\mathbf{I}+\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{J}\mathbf{D}_1 - \mathbf{B}_1\mathbf{J}\mathbf{B}_1 &= \\ \left[ \mathbf{H}_{zz} \frac{x^2+x}{2}, 1 \right] \mathbf{J}(\mathbf{H}_{zz}, 1) + (\mathbf{H}_{zz}, 1) \mathbf{J} \left[ \mathbf{H}_{zz} \frac{x^2+x}{2}, 1 \right] + \\ (\mathbf{H}_{zz}(1-x^2), 1) \mathbf{J}(\mathbf{I}-\mathbf{C}\mathbf{J})^{-1} \left[ \mathbf{H}_{zz}, \frac{2-3x}{4} \right] + \\ \left[ \mathbf{H}_{zz}, \frac{2-3x}{4} \right] (\mathbf{I}+\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1} \mathbf{J}(\mathbf{H}_{zz}(1-x^2), 1) - (\mathbf{H}_{zz}, 1) \mathbf{J}(\mathbf{H}_{zz}, 1) &= \\ \left[ \mathbf{H}_{zz} \left( \frac{x^2}{2} - \frac{1}{6} \right), 1 \right] \mathbf{J}(\mathbf{H}_{zz}, 1) + (\mathbf{H}_{zz}, 1) \mathbf{J} \left[ \mathbf{H}_{zz} \left( \frac{x^2}{2} - \frac{1}{6} \right), 1 \right] + \\ \left[ \mathbf{H}_{zz} \left( \frac{1}{3} - x^2 \right), 1 \right] \mathbf{J}(\mathbf{I}-\mathbf{C}\mathbf{J})^{-1} \left[ \mathbf{H}_{zz}, \frac{2-3x}{4} \right] + \\ \left[ \mathbf{H}_{zz}, \frac{2-3x}{4} \right] (\mathbf{I}+\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1} \mathbf{J} \left[ \mathbf{H}_{zz} \left( \frac{1}{3} - x^2 \right), 1 \right] + \left[ \mathbf{H}_{zz} \frac{x}{2}, 1 \right] \mathbf{J}(\mathbf{H}_{zz}, 1) + \\ (\mathbf{H}_{zz}, 1) \mathbf{J} \left[ \mathbf{H}_{zz} \frac{x}{2}, 1 \right] + \left[ \mathbf{H}_{zz} \frac{2}{3}, 1 \right] \mathbf{J}(\mathbf{I}-\mathbf{C}\mathbf{J})^{-1} \left[ \mathbf{H}_{zz}, \frac{2-3x}{4} \right] + \\ \left[ \mathbf{H}_{zz}, \frac{2-3x}{4} \right] (\mathbf{I}+\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1} \mathbf{J} \left[ \mathbf{H}_{zz} \frac{2}{3}, 1 \right] - \frac{2}{3} (\mathbf{H}_{zz}, 1) \mathbf{J}(\mathbf{H}_{zz}, 1) &= \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & O(h_j^2) G_3 + \left[ H_{zz} \frac{x}{2}, 1 \right] J(H_{zz}, 1) + (H_{zz}, 1) J \left[ H_{zz} \frac{x}{2}, 1 \right] + \\
 & \left[ H_{zz} \frac{2}{3}, 1 \right] J(I - CJ)^{-1} \left[ H_{zz}, \frac{1}{2} \right] + \left[ H_{zz} \frac{2}{3}, 1 \right] J(I - CJ)^{-1} \left[ H_{zz}, \frac{-3x}{4} \right] + \\
 & \left[ H_{zz} \frac{1}{2}, 1 \right] (I + JC)^{-1} J \left[ H_{zz}, \frac{2}{3}, 1 \right] + \left[ H_{zz}, \frac{-3x}{4} \right] (I + JC)^{-1} J \left[ H_{zz}, \frac{2}{3}, 1 \right] - \\
 & \frac{1}{3} (H_{zz}, 1) J(H_{zz}, 1) - \frac{1}{3} (H_{zz}, 1) J(H_{zz}, 1) = \\
 & O(h_j^2) G_3 + \left[ H_{zz} \frac{x}{2}, 1 \right] JC(I + JC)^{-1} J(H_{zz}, 1) + \\
 & (H_{zz}, 1) J(I - CJ)^{-1} (-CJ) \left[ H_{zz} \frac{x}{2}, 1 \right] + \\
 & \left[ H_{zz} \frac{1}{3}, 1 \right] J(I - CJ)^{-1} CJ(H_{zz}, 1) + \frac{1}{3} (H_{zz}, 1) (-JC) (I + JC)^{-1} J(H_{zz}, 1) = \\
 & O(h_j^2) G_4 + \frac{1}{3} (H_{zz}, 1) J((I - JC)^{-1} C - C(I + JC)^{-1}) J(H_{zz}, 1) = \\
 & O(h_j^2) G_4 + \frac{1}{3} (H_{zz}, 1) J(I - JC)^{-1} (C(I + JC) - (I - CJ)C) (I + JC)^{-1} J(H_{zz}, 1) = \\
 & O(h_j^2) G_4 + \frac{h_j^2}{6} (H_{zz}, 1) J(I - CJ)^{-1} C_1 J C_1 (I + JC)^{-1} J(H_{zz}, 1) = O(h_j^2) G_5 \quad (20)
 \end{aligned}$$

同理可得

$$\begin{aligned}
 & B_1 J D_1 J(I - CJ)^{-1} E_1 - E_1 (I + JC)^{-1} J D_1 J B_1 + F_1 J D_1 J(I - CJ)^{-1} A_1 - \\
 & A_1 (I + JC)^{-1} J D_1 J F_1 + A_1 (I + JC)^{-1} J D_1 J B_1 - \\
 & B_1 J D_1 J(I - CJ) A_1 = O(h_j) G_6 \quad (21)
 \end{aligned}$$

由式(18)、式(20)、式(21), 得

$$NJN^T = MJM^T + O((h_j)^4) Q \quad (22)$$

故

$$\left[ \frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}} \right]^T J \left[ \frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}} \right] = J + O(h)^4 S \quad (23)$$

综上所述, 由引理 1、2, 我们已证明了下面的定理 3.

**定理 3** 连续二次有限元法是 3 阶的拟辛算法对一般的 Hamilton 系统, 即

$$\left[ \frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}} \right]^T J \left[ \frac{\partial Z_j}{\partial Z_{j-1}} \right] = J + O(h^4) S,$$

有 4 阶精度, 且保持能量守恒.

类似地, 对线性的 Hamilton 系统有  $H_z = L$ , 由式(18)可证明

$$NJN^T = MJM^T \quad (24)$$

即对线性 Hamilton 系统二次元是辛格式, 且保持能量守恒.

## 4 Hamilton 系统的连续有限元法的数值实验

利用连续二次元求解非线性 Huygens 振子

$$H = p^2 - q^2 + p^4, \quad (25)$$

对应正则方程

$$p' = 2q - 4q^3, \quad q' = 2p; \quad p_0 = 0, \quad q_0 = 1.1 \quad (26)$$

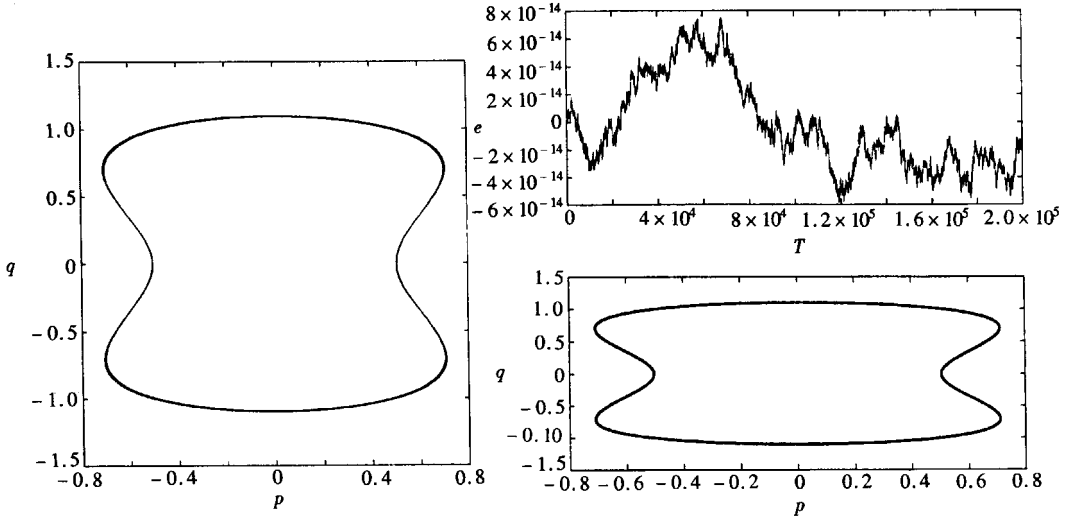


图 1 二次元, 前、中、后 1000 个点的相空间  $(p, q)$  轨道图 ( $h = 0.1, K = 10^7, T = [0, 10^6]$ )

图 2 二次元法,  $h = 0.2, K = 10^6$ , 能量误差曲线和相空间  $(p, q)$  曲线图

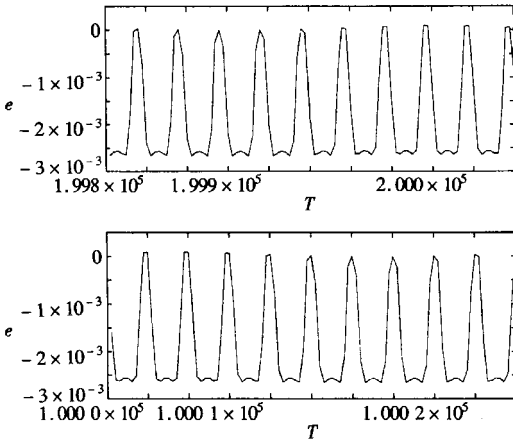


图 3 4 阶辛格式,  $h = 0.2, K = 10^6$ , 最后和中间 1000 个点的能量误差图

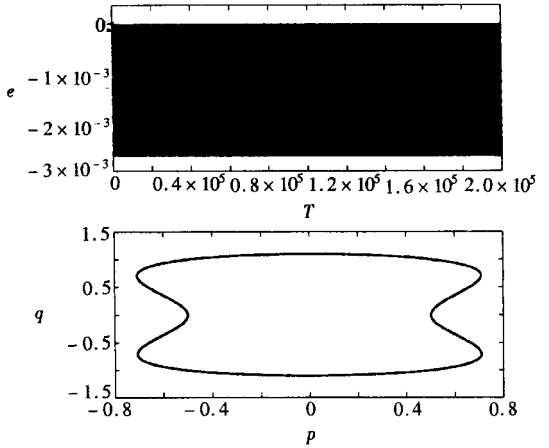


图 4 4 阶辛格式,  $h = 0.2, K = 10^6$ , 能量误差和相空间  $(p, q)$  曲线图

从图 1 可看出连续二次有限元法能长时间的保持非线性 Huygens 振子的轨道稳定性。

在图 2 至图 4 中分别用二次元和 4 阶辛格式<sup>[1]</sup> 求解此系统, 其中积分步数  $K = 10^6$ , 步长  $h = 0.2$ , 积分区间  $T = hK$ , 能量误差  $e = H_h - H$ 。

从以上各图可看出: 当  $T = 2 \times 10^5, h = 0.2$ , 用二次元计算的的能量误差仅有  $10^{-14}$ , 且相空间轨道保持不变。二次元法是拟辛算法, 当积分步长较大时, 能较长时间保持非线性 Hamilton 系统相空间轨道稳定性和能长时间保持能量守恒; 当步长  $h = 0.2$  时, 4 阶辛格式在节点的能量误差相对较大, 在  $0 \sim 10^{-3}$  之间周期摆动。

考虑  $A_2B$  型分子反应系统的 Hamilton 函数<sup>[11]</sup>

$$H(p, q) = 2p_1^2 + p_2^2 + 5\pi^2(D^2 - 5D + 6.5) + 4D^{-1} + 0.5\pi^2(|q_2| - 1.5)^2 + |q_2|^{-1},$$

$$D = (q_1^2 + q_2^2)^{1/2}.$$

经典轨迹的正则方程

$$\begin{cases} \frac{dp_1}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_1}, & \frac{dp_2}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_2}, \\ \frac{dq_1}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_1}, & \frac{dq_2}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_2}. \end{cases} \quad (27)$$

初始条件

$$q_1(0) = 3, q_2(0) = 3/2, p_1 = 0, p_2 = 0$$

取步长  $h = 0.01$ , 时间单位 =  $4.45 \times 10^{-14}$ s, 分别采用一次元、二次元、4 阶辛格式<sup>[10]</sup>法计算  $A_2B$  型分子反映系统在分子平面上的运动轨迹和总能量误差  $e = H_h - H$ .

从图 5 至图 7 可见, 在较长时间, 步长  $h = 0.01$  较大时, 连续有限元法能较好的保持  $A_2B$  型微观反映系统经典运动轨迹, 能量误差仅为  $10^{-9}$ , 且能量能保持守恒. 这为分子动力学的数值计算提供一种较好的方法. 由 4 阶辛格式计算出的能量误差相对较大, 在  $0 \sim 10^{-3}$  之间周期摆动.

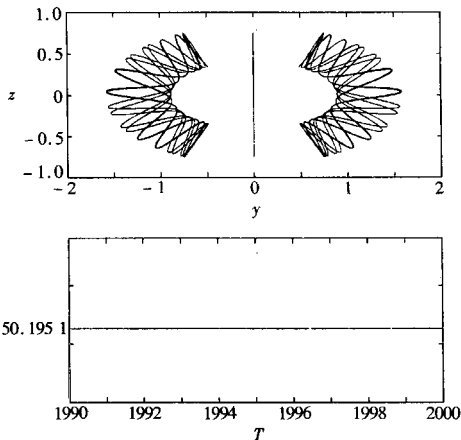


图 5 线性元,  $h = 0.01, K = 2 \times 10^5$ , 最后 1 000 个点的运动轨迹和能量曲线图

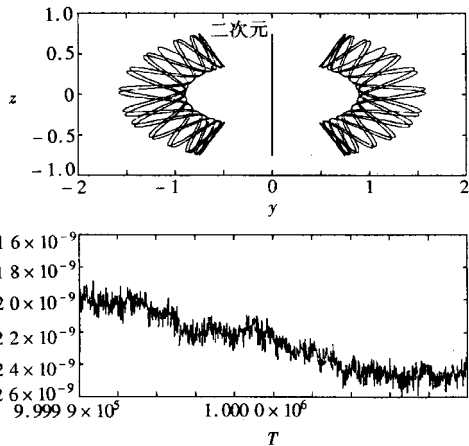


图 6 二次元,  $h = 0.01, K = 10^8$ , 最后 1 000 个点的运动轨迹和能量误差图

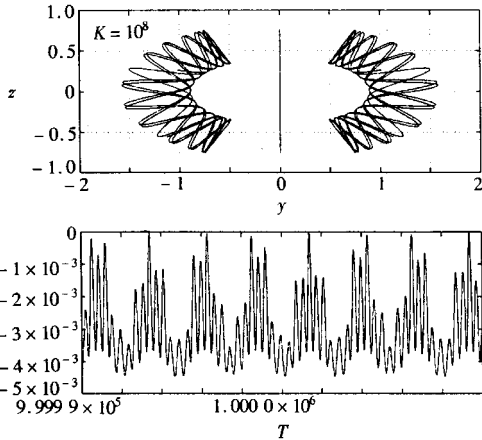


图 7 4 阶辛格式,  $h = 0.01, K = 10^8$ , 最后 1 000 个点的运动轨迹和能量误差图

## 5 结 论

从上面的分析和数值实验我们可得出连续有限元算法的主要特点: 线性元和二次元分别是 2 阶和 3 阶的拟辛格式对一般的 Hamilton 系统, 且保持能量守恒. 对线性系统, 连续有限元法是辛格式, 且保持能量守恒. 用连续有限元法求解 Hamilton 系统也有较好的效果.

### [参 考 文 献]

- [1] 冯康. 冯康文集[M]. 北京: 国防工业出版社, 1995, 1-185.
- [2] 冯康, 秦孟兆. 哈密尔顿系统的辛几何算法[M]. 杭州: 浙江科学技术出版社, 2003, 1-386.
- [3] Sanz Serna J M. Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems[J]. BIT, 1988, 28: 877-883.
- [4] Aubry A, Chartier P. Pseudo-symplectic Runge-Kutta methods[J]. BIT, 1997, 37: 1-21.
- [5] Gonzalez O, Simo J C. On the stability of symplectic and energy-momentum algorithms for nonlinear



- Hamiltonian systems with symmetry[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1996, **134**: 197-222.
- [6] Kane C, Marsde J E, Ortiz M. Symplectic energy-momentum preserving variational integrators[J]. *J Math Phys*, 1999, **40**: 3353-3371.
- [7] Bridges T J, Reich S. Multisymplectic intergrators: numerical schemes for Hamiltonian PDEs that conserve symplecticity[J]. *Physics Letters A*, 2001, **284**: 184-193.
- [8] 陈传森, 黄云清. 有限元高精度理论[M]. 长沙: 湖南科技出版社, 1995, 197-227.
- [9] 陈传森. 有限元超收敛构造理论[M]. 长沙: 湖南科技出版社, 2001, 19-225.
- [10] 杨禄源, 汤琼. 常微方程初值问题连续有限元的超收敛性[J]. *高等学校计算数学学报*, 2004, **26**(1): 91-96.
- [11] 李延欣, 丁培柱, 吴承坝, 等. A<sub>2</sub>B 模型分子经典轨迹的辛算法计算[J]. *高等学校化学学报*, 1995, **15**(8): 1181-1186.
- [12] 季江微, 廖新浩, 刘林. 辛差分格式的守恒量及其稳定性[J]. *计算物理*, 1997, **14**(1): 68-74.

## Continuous Finite Element Methods of Hamilton Systems

TANG Qiong<sup>1,2</sup>, CHEN Chuan-miao<sup>1</sup>

(1. College of Mathematics and Computer Science, Hunan Normal University, Changsha 410081, P. R. China;

(2. Department of Information and Computing Science, Hunan University of Technology, Zhuzhou, Hunan 412008, P. R. China)

**Abstract:** By applying the continuous finite element methods of ordinary differential equations, the linear element methods are proved have pseudo-symplectic scheme of order 2 and the quadratic element methods have pseudo-symplectic scheme of order 3 respectively for general Hamiltonian systems, as well as energy conservative. The finite element methods are proved to be symplectic as well as energy conservative for linear Hamiltonian systems. The numerical results are in agreement with theory.

**Key words:** Hamiltonian system; continuous finite element method; pseudo-symplectic; energy conservation