卓越大学出版联盟
学术出版精品工程

专著 西北工业大学出版基金资助项目 ZIZHU XIANGMU

ZHUANZHU

无限维动力学系统的保结构分析方法

胡伟鹏　邓子辰　编著

ZHUANZHU

西北工业大学出版社

西北工业大学出版基金资助项目

WUXIANWEI DONGLIXUE XITONG DE BAOJIEGOU FENXI FANGFA

无限维动力学系统的保结构分析方法

胡伟鹏　邓子辰　编著

西北工業大學出版社

【内容简介】 本书在简要介绍保结构思想及其相关数学理论基础上，首先论述了无限维保守哈密顿(Hamilton)系统的多辛分析方法，在数值分析中体现多辛分析方法在保持无限维动力学系统局部守恒量方面的优势；从多辛结构数学对称性与系统守恒量之间的内在联系出发，将多辛分析方法推广至可应用于无限维非保守动力学系统的广义多辛分析方法，完善保结构算法理论体系。本书可供高等院校应用数学专业、物理专业及力学专业的高年级学生、研究生、教师以及有关的科技工作者参考。

图书在版编目(CIP)数据

无限维动力学系统的保结构分析方法/胡伟鹏，邓子辰编著．—西安：西北工业大学出版社，2015.4

ISBN 978-7-5612-4371-8

Ⅰ．①无…　Ⅱ．①胡…②邓…　Ⅲ．①无限维—动力学系统—结构分析—分析方法—研究　Ⅳ．①TP27

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 074141 号

出版发行：西北工业大学出版社
通信地址：西安市友谊西路 127 号　　**邮编**：710072
电　　话：(029)88493844　88491757
网　　址：www.nwpup.com
印 刷 者：陕西向阳印务有限公司
开　　本：787 mm×1 092 mm　　1/16
印　　张：16.625
字　　数：276 千字
版　　次：2015 年 9 月第 1 版　　2015 年 9 月第 1 次印刷
定　　价：45.00 元

序

无限维非线性动力学系统广泛存在于物理、力学及工程科学中，其数值分析方法已经引起国内外学者的广泛关注，成为数学和力学，特别是计算数学和计算力学最活跃的前沿研究领域之一。

保结构方法起源于已故著名数学家冯康院士。他从 20 世纪 80 年代初开始，系统地研究了有限维哈密顿系统，基于辛几何理论创立了辛几何算法。这一原创性工作极大地推动了计算数学和计算力学的发展，荣获了 1997 年国家自然科学一等奖。经过 30 余年的发展，保结构方法已经从有限维哈密顿系统的辛几何算法发展到无限维哈密顿系统的多辛算法，围绕“力求在数值分析过程中尽可能多地保持原连续系统的固有几何性质”的核心思想，形成了保结构算法的理论体系。

将保辛思想引入力学领域是著名力学家钟万勰院士的重要贡献之一，他基于计算结构力学和控制论在数学结构上的一致性，建立了有限维哈密顿动力学系统的辛几何算法和精细积分方法，因此荣获 2010 年国家自然科学二等奖。

本书第一作者自攻读博士学位以来，与其导师（第二作者）一起，开展了无限维保守动力学系统多辛算法研究，并将保结构思想推广至无限维非保守动力学系统，建立了耗散动力学系统的广义多辛分析方法，拓宽了保结构方法的应用领域。主要成果有，非线性波动问题局部几何性质（孤波演化、孤子传播、孤子碰撞等）的多辛方法；超导混合态电磁特性的多辛方法；耗散动力学系统的广义多辛理论框架；黏性耗散波动问题的广义多辛方法；碳纳米管振荡特性的保结构方法；脉冲爆震发动机性能损失机理的保结构分析方法等。

本书是第一作者在其博士论文和博士后出站报告的基础上，整合了他们在耗散动力学系统保结构算法方面的创新性成果而形成的，是无限维非线性动力学系统计算方法领域里的一本新的学术专著。其公开出版为保结构方法研究注入了新活力，在推动无限维非线性动力学系统数值方法及其应用研究方面将发挥重要作用。

在此，向本书作者表示祝贺。

崔俊芝

2015 年 1 月 8 日

前　　言

动力学系统包括有限质点动力学系统(有限维动力学系统)和连续体动力学系统(无限维动力学系统)两大类,其中应用最广泛的是无限维动力学系统。与有限维动力学系统相比,无限维动力学系统的动力学行为表现得更为复杂多变,但是无论其动力学行为如何复杂,描述无限维动力学系统的数学模型却均是偏微分方程,这为无限维动力学系统的理论分析和数值研究带来了极大的便利。

随着计算机科学的发展,数值计算已经与理论分析和试验研究一道,成为了科学研究的三大手段之一。而复杂动力学系统的高性能数值计算方法是动力学与控制领域的前沿研究课题之一。

"一切耗散效应可以忽略不计的物理过程都可表示成具有能量守恒且辛几何结构不变的哈密顿系统的形式。"这一论断一方面强调了哈密顿表述形式在经典力学中的地位,另一方面为哈密顿动力学系统的数值分析提出了更高要求:数值分析需要充分体现哈密顿系统包含首次积分、辛结构和能量守恒在内的诸多几何性质。冯康院士及其研究团队在有限维哈密顿系统的辛算法领域的开创性工作,首次将哈密顿系统的数值分析过程与系统几何性质联系起来,开拓了保结构分析方法这一长期被忽视的重要研究领域。30 年的探索发现,有限维哈密顿动力学系统的辛结构、首次积分等重要几何性质都能通过辛算法得到长时间的保持。

为了将应用于有限维哈密顿系统的辛算法推广至无限维哈密顿系统,Thomas J. Bridges 和 Jerrold E. Marsden 教授从纯数学的角度创立了多辛算法理论,其基本思想是在无限维哈密顿系统数值分析过程中,通过构造多辛差分格式来精确保持系统的诸如多辛结构、局部能量和局部动量等局部几何性质。

辛算法和多辛算法的应用领域是严格的保守系统,然而,保守哈密顿系统毕竟是实际物理力学系统忽略一切耗散效应后的理想系统。针对这一局限性,张素英和邓子辰教授基于李群李代数理论研究了广义有限维哈密顿系统及其带耗散的广义有限维哈密顿系统的几何积分方法,提出了几何积分的基本理论框架,针对耗散有限维哈密顿系统,开展了一些保结构分析方法的探索性研究。

正如开篇所述,无限维动力学系统具有更广泛的物理力学背景。因此,本书基于多辛积分理论,讨论了无限维哈密顿动力学系统的多辛分析方法和非保守无限

维哈密顿动力学系统的广义多辛分析方法。一方面，无限维哈密顿动力学系统的局部动力学行为千差万别，如何在保结构分析过程中发现并保持这些局部动力学行为是无限维哈密顿动力学系统的多辛分析方法研究需要解决的核心问题。另一方面，耗散是实际无限维哈密顿动力学系统的本质属性，如何针对耗散无限维哈密顿动力学系统，构造无数值耗散的保结构算法，在保持局部守恒型几何性质的同时，精确再现系统局部耗散效应是非保守无限维哈密顿动力学系统的广义多辛分析方法需要解决的核心问题。

全书共分为七章。第 1 章简要介绍保结构分析方法的起源、研究背景及意义、无限维动力学系统的传统数值分析方法等；第 2 章介绍保结构分析方法的基本思想和数学基础，并以简谐振子为例，从物理力学意义角度详细阐述辛几何和多辛几何的理论框架及基本概念；第 3 章阐述无限维保守哈密顿动力学系统的多辛分析方法，主要介绍多辛形式的数学特征和局部守恒律，以及多辛离散的常见方法等；第 4 章介绍多辛分析方法在保守动力学问题中的应用，以孤子演化、孤子碰撞及孤子共振等具有挑战性的物理力学问题为例，研究多辛离散与动力学系统固有几何性质之间的内在联系；第 5 章阐述无限维非保守哈密顿动力学系统的广义多辛分析方法，主要介绍广义多辛方法的研究背景和基本思想；第 6 章和第 7 章分别介绍广义多辛分析方法在无源和有源非保守动力学问题中的应用，以孤波演化、激波捕捉、碳纳米管中的混沌分叉等前沿研究课题为例，阐述了广义多辛分析方法的实现过程和潜在优势。

本书的主要内容是基于笔者自攻读博士学位至今，与其合作者的研究工作而完成的。为了使得本书的内容更具系统性，我们还介绍了散见于国内外专著和相关期刊中的相关研究成果和保结构分析方法的基础知识。

在本书相关内容的研究和全书成稿过程中，得到了大连理工大学钟万勰院士、浙江大学朱位秋院士、英国 Surrey 大学数学系 Thomas J Bridges 教授、英国利物浦大学工程系欧阳华江教授、加拿大英属哥伦比亚大学数学系 James J. Feng 教授、西班牙数学委员会主席兼 2006 年世界数学家大会主席 Manuel de León 教授、中国科学院数学与系统科学研究院崔俊芝院士和洪佳林研究员等人的指导和支持。同时，本书相关内容的研究工作得到了国家自然科学基金（编号：10772147，10972182，11002115，11172239，11372252，11372253，11432010）、航空科学基金（编号：2010ZB53021，2013ZB53020）、陕西省自然科学基金（编号：2015JM1026）、航天支撑技术基金（编号：2015 - HT - XGD）、西北工业大学基础研究基金（编号：

JC200938，JC20110259，3102014JCQ01035）和西北工业大学翱翔人才工程培养计划（翱翔之星培养计划和翱翔青年学者培养计划）的长期资助，在此一并表示诚挚的谢意。

此外，山西大学张素英教授，华中科技大学黄永安教授，西北工业大学李文成副教授、王艳副教授以及本课题组张宇博士等众多研究生在书稿整理过程中给予了大力协助，才使得本书手稿能够按时完成，在此表示感谢。

限于学识水平，书中难免存在不妥甚至错误之处，恳请读者批评指正。

编著者

2014 年 11 月

目　录

第1章 绪　论

1.1 引　言

1687年，人类历史上最伟大的科学家牛顿完成了划时代的巨著《自然科学之数学原理》。书中，牛顿创造性地提出了微积分这一强有力的数学工具，并用以描述经典力学的基本方程，使经典力学成为完整而严密的体系[1]。在此后的300多年间，一次又一次的数学革命促使经典力学理论体系逐渐完善，逐步形成了经典力学的三种等价描述形式：牛顿力学、拉格朗日力学和哈密顿力学。从某种意义上讲，拉格朗日力学更基本一些，因为它基于变分原理，并且可以被最直接地推广到广义相对论的框架；从另一种意义上讲，哈密顿力学更基本一些，因为它直接基于能量的概念，并且与量子力学联系得更为紧密。从根本上讲，牛顿力学的拉格朗日表述和哈密顿表述在数学上是完全等价的。然而，正如冯康院士体会到的：等价的数学形式，实践上可以是不等效的[2]。

随着力学研究的不断深入，描述力学系统的数学模型亦变得愈来愈复杂。限于当前代数理论的发展水平，许多描述力学问题的数学模型很难找到其精确解；或者能够得到其形式上的精确解，但是其中包含有大量的待定参数，从而限制了该数学模型在实际问题中的应用；甚至其精确解根本就不存在。这就要求力学工作者设计出能够保持原力学问题精确解真实信息的数值算法，从而借助计算机求解复杂的力学问题。

一直以来，纯数学的数值方法，无论是早期著名数学家欧拉创立的欧拉差分格式，还是一直备受计算数学界和工程界青睐的龙格库塔格式，其出发点只有一个，那就是采用差分近似逼近微积分问题，其致命弱点是只是注重了数值解逼近精确解的程度，而没有更多地考虑数学模型描述的力学系统本身所具有的几何性质。另外，描述力学系统的数学模型属于连续系统，而任一数值方法都可以看作是一个具有固定时间步长的离散力学模型。因此，利用数值方法求解力学系统的实质是用离散的力学模型去模拟连续系统。基于这一观点，我们很自然地要求数值模拟应该在同一几何框架中进行，并尽可能多地保持原力学系统的性质，特别是数值解的长时间数值稳定性应该得到足够的重视。

有限元方法一直被公认为是计算数学应用于力学问题的典范之作。从根本上讲,有限元方法是为解决平衡问题提出的系统化算法,这类平衡问题对应的物理问题在数学上有两种等价形式:一种是牛顿形式,即解二阶椭圆形方程;另一种是变分形式,即能量泛函极值原理。有限元法在实践上与理论上取得成功的关键在于合理地选取了变分形式作为基础。冯康院士曾经试图把这套思想和方法应用到连续介质动态问题中,但没有取得而且看来也难望取得相应的成功。故对动态问题的计算方法而言,拉格朗日系统可能不是合理的选择;而且对于牛顿形式同样也难寄期望。因此,合理的选择很可能是哈密顿系统,这是冯康院士早年的猜想[2]。

哈密顿系统是动态问题计算方法的合理选择这一论题一直被人们忽略,原因可能是受到早先人们对哈密顿系统评价的影响。

首先应该指出,哈密顿本人是从几何光学着手创建他的理论模式的,后来才转向与光学相距甚远的力学。1834 年,基于在几何光学和力学方面的研究成果,哈密顿曾预言“这套思想与方法业已应用到光学与力学,看来还有其他方面的应用,通过数学家的努力还将发展成一门独立的学问”[3]。但是这仅仅是他本人的期望。19 世纪的学术界对其反应则很冷淡,认为这套理论“漂亮而无用”[4]。著名数学家克莱因在对哈密顿形式的理论给于很高评价的同时,对其实用价值亦持怀疑态度,他认为“这套理论对于物理学家是有用的,而对工程师则根本无用[5]。”这种怀疑,至少就物理学的范畴而言,是被随后的历史发展完全否定了,20 世纪 20 年代量子力学却正是在哈密顿形式的框架下发展起来的。量子力学创始人之一薛定谔曾说:“哈密顿原理已经成为现代物理的基石……如果您要用现代理论解决任何物理问题,首先得把它表示为哈密顿形式”[6]。

基于此,我国已故著名数学家冯康院士于 1984 年在第五届国际双微会议(Differential Equation and Differential Geometry)上首次提出了基于辛几何原理计算哈密顿系统的新方法,即针对有限维哈密顿体系的哈密顿辛算法[7]。其基本思想是在哈密顿体系下构造辛格式,并进行辛差分处理。由于在这一领域的出色研究成果,冯康先生课题组于 1997 年获国家自然科学一等奖,由此开创了哈密顿体系计算方法的新方向,随后十多年的研究中,冯康先生及其弟子在辛算法方面取得了如下一系列的辉煌成就[8-15]:

(1)提出了哈密顿系统辛几何算法的完整理论框架。

(2)推广了分析力学中生成函数与哈密顿-雅克比方程理论,构造了为数众多的任意阶精度的辛格式。

(3)讨论了算法守恒性、算法辛不变性与守恒性之间的关系;研究了多步格式,证明了所有线性多步格式对非线性系统都不是辛的,研究了辛算法的 KAM 定理。

(4)发展了形式向量场和形式相流的幂级数的完备理论。

(5)把哈密顿系统辛算法的思想推广到一般具有李代数结构的动力系统,实现了动力系统算法的几何化;对接触系统构造了接触算法,对源系统构造了保体积算法,发展了利用组合格式构造高精度保结构乘积外推的理论;等等。

这些研究成果逐渐形成了辛几何算法的理论框架。随着对辛几何算法理论认识的不断深入,这一理论在科学和实际工程的诸多领域得到成功的应用。与传统算法相比,冯康提出的辛算法有保持体系辛结构的优点,在空间结构对称性和守恒性方面明显优于传统算法,特别在稳定性与长期跟踪能力上具有独特的优越性。深入的理论分析和大量的数值实验令人信服地表明,辛算法是计算动力学中长期预测问题的有效方法。

哈密顿系统最基本的性质是解相流的辛性质,这意味着哈密顿辛算法所对应的数值格式应能保持原系统的辛结构。在这一理论依据被学术界公认之后,辛算法在诸多领域引起了国内外众多学者的注意,取得了一系列的研究成果,提出了许多构造辛格式的方法和理论。其中主要有生成函数法[9-10,16],Runge-Kutta 方法[17-19],分块 Runge-Kutta 方法[20-21]等;刘林、刘学深等人将辛算法应用于天体力学计算[22-24]和分子动力学计算[25]等力学领域。

20 世纪 80 年代后期到 90 年代初,大连理工大学钟万勰院士等在计算结构力学与最优控制模拟理论的基础上,利用交叉学科的优势,借助最优控制领域的"状态空间法",通过引入对偶向量,建立了一套哈密顿动力体系的辛几何方法以及时程精细积分理论[26],被学术界公认为近年来计算力学领域最重要的突破之一,其所在团队也因此荣获 2010 年自然科学二等奖。应该说上述研究成果均在国内外学术界产生了重要的影响,确立了我国该领域学者在国际上的领先地位。

在取得上述成果的同时,我们应该清醒地认识到,上述研究的一个重要前提是研究对象大多限定为线性系统,而自然界及各类工程实际中,特别是在航空航天领域,广泛存在着非线性系统,诸如碰撞动力学问题,黏弹性动力学问题等。近年来,随着研究的深入,如何在哈密顿体系下处理非线性系统问题已成为学术界关注的焦点,但总体来说这方面的研究尚属于探索阶段。由于对其深入研究需要理论上的突破,这就迫使我们寻求新的思路,才有希望取得新的突破,因此,对辛算法的拓展工作既有理论难度又有重要的工程实际意义。

另外,即便是应用于线性系统,辛算法虽然能够保持系统的辛结构,但这种辛结构仅仅描述的是系统的整体性质。实践证明,对于非线性的无限维哈密顿系统,仅仅保持其辛结构等整体性质是远远不够的,因为其局部性质更能反映非线性无限维哈密顿系统的本质特征。

针对辛算法的这一局限性，Thomas J. Bridges，Brian E. Moore 和 Sebastian Reich 将用于求解有限维哈密顿微分方程系统的辛算法推广到求解无限维哈密顿偏微分方程系统的多辛算法[27-31]。此后，秦孟兆、洪佳林等人利用多辛算法研究了 KdV 方程，Schrödinger 方程，Sine-Gordon 方程等无限维哈密顿系统[32-38]，取得了一些初步的研究成果。这些研究成果大多针对低阶、低维的弱非线性系统，对于高阶、高维强非线性系统的多辛算法研究较少；同时还有许多经典的无限维动力学系统，它们不可能写成标准的多辛偏微分方程组的形式，如 Burgers 方程系统及其组合 Burgers 方程系统等，有待借鉴多辛算法思想研究其保结构几何积分算法。

本书正是基于以上背景，在总结前人在无限维动力学系统数值计算方法研究成果的基础上，全面阐述近年来我们在无限维动力学系统保结构计算方法方面的系列工作，供相关研究人员参考。

1.2 无限维动力学系统的数值分析方法

1.2.1 无限维动力学系统

前面已经提到，辛算法的优势在于能够长时间地保持有限维哈密顿系统的整体几何性质，而多辛算法能够长时间地保持无限维哈密顿系统的局部几何性质。在此，首先需要区分两个概念：有限维与无限维。

这里所讲的“维”实际上指的是自由度的概念。有限维，即有限自由度，涉及理想质点力学、天体与人造天体力学、刚体力学与多刚体力学、波动方程射线近似方法、量子力学的 WKB 方程、等离子体约束等物理力学模型。无限维，即无限自由度，涉及理想流体力学、弹性力学、电动力学、量子力学与量子场论、广义相对论、孤子与非线性波等[2]物理力学模型。

客观物质世界究其本质而言是非线性的，线性世界只是对非线性世界的一种近似。对于线性无限维系统，一般可以通过数学物理方法得到其解析解，同时，其数值方法研究比较完善，因此，本书主要关注非线性无限维动力学系统。

谈到非线性无限维动力学系统研究的起源，得追溯到 1834 年夏天。英国科学家 John Scott Russel 沿着爱丁堡附近的一条运河岸道骑马旅行时，偶然发现在狭窄的河床中行走的船突然停止前进，被船体带动的水团积聚在船头周围并剧烈地翻动着。不久，一个圆形且轮廓分明的巨大孤立波峰开始形成，并以12～14 km/h 的速度急速离开船头向前运动。在行进中，波的形状和速度并无明显变化。在骑马追出了 2～3 km 后，这个水波终于消失在蜿蜒的河道上。他把这种水波称为孤

立波,并在题为 Report on Waves 的报告中描述了他所观察到的这种奇妙现象[39],这是学术界公认的有关孤立波的首次报道。限于当时的数学理论和科学水平,John Scott Russel 无法从理论上给予这种现象以圆满的解释。此后,许多数学物理学家和力学家都尝试通过建立数学模型从理论上来解释这种现象,但一直未能获得成功。直到 1895 年,荷兰阿姆斯特丹大学的著名教授 Korteweg 和他的学生 de Vries [40] 仔细研究了浅水波运动,在长波近似和小振幅假定下建立了单向运动的浅水波运动方程,才解决了这个问题。这个方程就是著名的 Korteweg-de-Vries 方程(以下简称 KdV 方程),它是最早被提出的关于非线性无限维动力学系统的模型方程。

1.2.2 无限维动力学系统数值方法的起源与发展

非线性无限维动力学系统数值求解方法的核心内容,是对描述无限维动力学系统的非线性偏微分方程模型的求解。

1965 年,美国科学家 Kruskal 和 Zabusky 利用先进的计算机,通过数值计算详细研究了 KdV 方程两波相互作用的全过程[41-42]。自此,一个研究非线性偏微分方程的热潮在学术界蓬勃地开展起来,大批描述非线性无限维动力学系统的非线性偏微分方程在物理力学的各个领域不断地被揭示出来,其中包括等离子体中的非线性 Schrödinger 方程、超导现象中的 Ginzburg - Landau 方程、振子运动的 Toda 链与二维流体流动的 KP 方程等。

数学理论的发展再次带来了力学领域的一次大变革,许多非线性动力学问题的控制方程都以各式各样的非线性偏微分方程(组)的形式表达出来,使得非线性动力学得到了长足发展。许多非线性偏微分方程(组)的精确解在理论和应用上具有重要的价值,它们可以很好地解释许多自然现象,例如振动、波传播以及孤立子等。然而,正如郭本瑜在《偏微分方程的差分解法》一书[43]中的描述:“许多物理运动或其他运动过程都可以用一个偏微分方程的定解问题来描述,但是绝大多数的偏微分方程定解问题的解并不能用明显的数学公式来表示。”这意味着非线性偏微分方程(组)数值解的研究在理论和应用上同样具有重要的价值,因为数值解可以定量地描述众多难以找到解析解的非线性偏微分方程(组)的许多重要性质,能比较满意地解释过去很多不能解释的现象。基于这两点,非线性偏微分方程(组)的数值求解及其解法研究,一直是近几十年来非线性力学研究中极为重要和最为活跃的前沿课题和热点问题之一。

目前常用的非线性偏微分方程(组)的数值解法主要有经典的差分方法、有限元方法、谱方法以及本专著将要研究的保结构方法。以下仅简要介绍上述几种经

典数值方法的基本思想。

差分方法，又称网格法，是求解偏微分方程定解问题的常用近似方法之一。早在 1928 年，Courant，Friedrichs，Lewy [44]就首次对偏微分方程的差分方法作了完整的论述，其基本思想是利用差商等数学工具替代偏微分方程中的偏微商，从而达到离散偏微分方程的目的。差分方法从总体上分为两类：迎风格式与中心格式。迎风格式的原形是一阶 Godunov 格式[45]，后来逐步发展为二阶的 MUCSCL (Monotone Upstream Centred Scheme for Conservation Laws）格式[46]，三阶 PPM（Piecewise Parabolic Method）格式[47]以及更高阶的 ENO（Essentially Non-Oscillatory scheme）格式[48]。迎风格式是在网格中点估计数值通量的值，这就要求估计数值通量在网格交界面处的值，因此迎风格式必须考虑沿网格边界的特征速度，这就致使迎风算法计算过程非常复杂，使得它很难推广到更复杂的系统中。中心格式可以看作是一阶 Lax－Friedrichs（LxF）格式的高阶推广，它是由 t^n 时刻的单元均值求出 t^{n+1} 时刻的交错单元均值。在恰当的 CFL 条件数的前提下，在光滑区域内引入数值通量并使之逼近通量函数，从而避免了迎风格式中通量函数的分解。这一优点在方程组和高维问题的计算中显得尤为明显，因而中心格式在求解偏微分方程数值解方面的应用更为广泛。也正是基于这一点，本书在利用多辛算法求解高阶、高维非线性偏微分方程（组）时，更倾向于采用中心差分离散方法构造多辛格式。1990 年，H. Nessyahu 和 E. Tadmor 将中心格式发展到二阶（即 NT 格式[49]）。1998 年，Liu 和 E. Tadmor 将中心格式推广到三阶[50]。

有限元方法，从数学上讲，其实质就是 Ritz－Galerkin 方法，它与传统的 Ritz－Galerkin 法的主要区别在于它为应用样条函数方法提供了一种选取“局部基函数”或“分片多项式空间”的新技巧，从而成功地克服了传统 Ritz－Galerkin 方法选取基函数的固有困难。也正因为如此，有限元方法才得以和差分方法并列，成为求解偏微分方程定解问题的一种有效的数值方法。而今，有限元方法已经发展成为一个大家族，包括混合有限元[51]、高阶有限元[52-53]、拟协调元[55]、样条有限元[56]和各向异性有限元[57]等，他们在不同的工程领域都有广泛的应用。

谱方法是 20 世纪 70 年代基于 Fourier 方法发展起来的一种数值求解偏微分方程的方法，其实质上是标准的分离变量技术的一种推广。它具有“无穷阶”收敛性，可采用快速算法，提出之初只是用于求解周期问题，随后将其推广到非周期问题的求解中，即选择非周期的基函数——Chebyshev 或 Legendre 多项式来展开近似解。谱方法的要点是把解近似地展开成光滑函数（周期的或者非周期的）的有限级数展开式，即所谓解的近似谱展开式，再根据此展开式和原方程求出展开式系数的方程组。而今，谱方法已被广泛用于气象、物理、力学等诸多领域，成为继差分法

和有限元法之后又一种重要的数值方法[58-59]。

上述提到的经典数值方法都是求解非线性无限维动力学问题的有效途径,其计算精度均能够满足科学计算的需要,但是在反映系统几何性质方面却不令人满意。

1.3 研究背景与意义

科学计算在各门自然科学(物理学、气象学、地质学和生命科学等)和技术科学与工程科学(核技术、石油勘探、航空与航天和大型土木工程等)中起着越来越重要的作用,在很多重要领域中成为不可或缺的工具。而科学与工程计算中最重要的内容之一,就是解决在科学研究和工程技术中出现的各种各样的偏微分方程或方程组的高性能数值计算问题。

2008 年 10 月上旬,由北京应用物理与计算数学研究所贺贤土院士,大连理工大学钟万勰院士,国家计算流体力学实验室张涵信研究员,中国航天空气动力技术研究院崔尔杰研究员等著名学者发起,以"我国高性能计算的发展与对策"为主题的第 329 次香山科学会议在北京举行。与会专家一致肯定了高性能计算的学术地位:在科学技术迅猛发展的今天,高性能计算已经成为科学技术发展和重大工程设计中具有战略意义的研究手段,它与传统的理论研究和实验室实验一起构成了现代科学技术和工程设计中互相补充、互相关联的研究方法,大大拓宽了科学研究的能力,促进和推动了现代科学与工程技术的发展。美国等发达国家在高性能计算方面发展很快,并一直把它作为国家战略并给予高度重视,在国家层面予以组织实施。同时,与会专家也注意到,我国的高性能计算,经过几十年的不懈努力,有了很大发展,通过有效地运用高性能计算,在一些重要科技领域已经取得十分重要的成果。但与发达国家相比还有很大差距,特别是具有自主知识产权的高水平的数值模拟应用软件的研制与开发,以及高性能算法的创新严重不足,因此制约了我国科学原始创新能力的提升,以及大型工程设计和国防高科技武器关键技术的发展。在这次会议上,与会专家共同探讨我国高性能计算的发展之路,进一步推动我国高性能计算的快速发展。

随后,在由大连理工大学程耿东院士、北京应用物理与计算数学研究所贺贤土院士、航空 608 研究所尹泽勇院士、中国载人航天工程办公室周建平教授组织的,以"发展 CAE 软件的战略对策"为主题的第 339 次香山科学会议上,与会代表共同呼吁各科技决策机构应重视并优先资助力学领域计算方法的研究工作。

其实,美国政府早就意识到高性能科学计算的重要性。2005 年 6 月,美国"总

统信息技术咨询委员会”的报告中明确提出:“计算科学已成为科学领导地位、经济竞争力和国家安全的关键”;2009 年 9 月,美国国会下属的“竞争力委员会”(Council on Competitiveness)发布白皮书《美国制造业—依靠建模和模拟保持全球领导地位》认为:“基于建模、模拟和分析的高性能计算是维系美国制造业竞争力战略优势的一张王牌”,提出“从竞争中胜出就是从计算中胜出(to out compete is to out compute)”这一战略性决策。

这一系列的重要会议及政府行为主要基于以下学术背景:随着社会的不断进步和科学技术的不断发展,非线性现象在社会科学、自然科学和工程技术领域的作用越来越重要,人们对于非线性问题的关注越来越多,物理、力学、化学、生物、工程技术、甚至社会经济问题中都存在着大量的、重要的非线性问题,这些问题的研究和解决最终都归结为求解非线性偏微分方程(组)的问题。非线性偏微分方程(组)的求解要远比线性偏微分方程(组)的求解困难得多,因为后者的一些基本性质如叠加原理等对前者不再成立,因而很难用统一的方法对前者加以处理。更重要的是,如前所述,无论线性还是非线性的偏微分方程(组),能找到解析解的情况极少,大部分需要通过数值解法求解。

虽然通过前面提到的三种经典的偏微分方程数值求解方法都能获得所需精度的数值解,但是,对于偏微分方程所描述的无限维动力学系统本身的一些几何特点,上述三种方法在求解过程中却难以保证,为此,不少科学家穷毕生之力,探求能够保持系统几何性质的数值算法。自从我国学者冯康在 1984 年于北京召开的国际双微会议上首次从辛几何的观点提出了计算哈密顿系统的辛算法[7],并系统地描述了从生成函数构造任意阶精度的辛差分格式的生成函数法以来,保结构的几何积分算法引起了国内外专家学者的广泛关注。

钟万勰院士团队将辛算法引入应用力学领域,提出了精细积分算法并完善了几何积分算法理论,取得了以下一系列研究成果[26,60-85]:

(1)鉴于结构力学与最优控制理论在数学表述上的一致性,提出了基于“状态空间法”的结构力学子结构法和能量法,并将这一思想应用于求解最优控制问题的黎卡提方程;

(2)将辛几何引入弹性力学的数学表述,建立了辛弹性力学和应用力学对偶体系等重要基础理论;

(3)基于 2^N 类算法理论,提出了计算精度和计算效率极高的精细积分方法;

(4)基于应用力学的对偶表述,建立了应用力学的辛数学方法;

(5)从力学角度,对辛代数进行了重新描述,创立了以“辛传递矩阵群”为基础的计算结构力学新领域,并开展了大量应用研究,等等。