偏微分方程中的保结构算法

$$d\alpha = 0 \iff \partial_\mu\left(d\frac{\partial L}{\partial u^i_\mu} \wedge du^i\right) =$$

$$\alpha = \left(\frac{\partial L}{\partial u^i} - \partial_\mu\left(\frac{\partial L}{\partial u^i_\mu}\right)\right)du^i$$

Structure-Preserving Algorithm for Partial Differential Equation

秦孟兆　王雨顺　著

浙江出版联合集团
浙江科学技术出版社

偏微分方程中的保结构算法

秦孟兆 王雨顺 著

团
社

图书在版编目(CIP)数据

偏微分方程中的保结构算法 / 秦孟兆,王雨顺著.
— 杭州:浙江科学技术出版社,2011. 12
ISBN 978-7-5341-4398-4

Ⅰ. ①偏… Ⅱ. ①秦…②王… Ⅲ. ①偏微分方程 - 算法 - 研究 Ⅳ. ①0175.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 017296 号

书　名	**偏微分方程中的保结构算法**
著　者	秦孟兆　王雨顺
出版发行	浙江科学技术出版社 杭州市体育场路 347 号　邮政编码:310006 联系电话:0571-85164982 E-mail:msm@zkpress.com
印　刷	浙江新华数码印务有限公司

开　本	787 × 1092　1/16	**印　张**	48.75
字　数	885 000		
版　次	2011 年 12 月第 1 版		2011 年 12 月第 1 次印刷
书　号	ISBN 978-7-5341-4398-4	**定　价**	188.00 元

责任编辑　莫沈茗　卢晓梅　　**责任美编**　孙　菁
责任校对　张　宁　　**责任印务**　田　文

谨将此书献给保结构算法的
开拓者冯康院士

当代计算方法研究的一条不成文的基本法则是，问题原型的基本特征在离散后应该尽可能地得到保持．而为了达到这一效果，则离散化应尽可能在问题原型的同一个形式框架中进行．

这些不同的数学形式是陈述同一个物理规律．由于形式不同，它们对实践上“解题”而言，自然会提供完全不同的技术途径．因此，等价的数学形式，实践上可以是不等效的．

冯　康

摘自：《自然科学进展》，1991，2:102-112．

前言

随着计算机技术的飞速发展，科学计算越来越显示出其优越性和旺盛的生命力. 科学计算已经和理论研究、实验研究共同构成科学研究的三大支柱. 在一些具体应用领域，如分子化学、天气预报、生物计算等，系统往往非常复杂，计算量非常庞大，积分时间也很长，不仅需要多个学科共同参与，需要机器性能不断提高，更需要好的数值方法作为基础.

在“问题原型的基本特征在离散后应该尽可能地得到保持”的原则指导下，冯康首先提出“保结构算法”的思想. 他和他的研究小组在哈密尔顿系统的辛几何算法(辛算法)的构造算法和理论分析方面取得了一系列成果并且引起了国内外学者的极大兴趣，产生了许多重要的后继成果.

事实上，除了几何结构(辛结构、酉结构、接触结构等)外，冯康提出的保结构算法的概念还涵盖了保守系统的其他保守性质. 由于求解系统的形式不同，有时构造保持其他结构的数值算法显得更为方便. 例如，在数值天气预报中，曾庆存提出并研究发展了平方守恒格式，并将它成功应用于许多研究模式中. 这里的平方守恒是指保持保守系统的能量. 另外，还有大量的文献讨论了保守系统的数值格式.

这些能保持原问题(精确解)的某些结构的数值算法都可以广义地称为保结构算法. 由于守恒性质(如质量守恒、能量守恒)是科学的基本规律，所以保结构算法的应用非常广泛. 有关保结构算法的基本理论以及阶段性的主要成果大都收录在《哈密尔顿系统的辛几何算法》一书中. 保结构算法一直是世界范围内的研究热点，所以保结构算法无论是在基本理论方面还是在应用领域中都发展得特别快. 尽管辛算法在求解哈密尔顿常微分方程组时有许多优点，但在处理偏微分方程时却存在不足. 传统的线方法是一个可以选择的处理手段，即首先进行空间离散，使离散得到的常微分方程组是哈密尔顿方程组，然后再应用辛算法求积. 该方法的一个缺点是无法保证离散后的方程组仍然保持哈密尔顿特性. 另一个处理手段是把偏微分方程看成是Banach空间上的哈密尔顿系统，直接应用辛算法, 但是目前该方法只能处理非常特殊的方程. 为了解决这一问题，J. E. Marsden, G. P. Patrick, S. Shkoller和 T. J. Bridges, S. Reich分别从拉格朗日力学和哈密尔顿力学的角度对保守偏微分方程提出了多辛结构及多辛算法的概念. 多辛算法可以看成是辛算法的直接推广，是冯康思想的一个体现. 它同等对待偏微分方程的时间方向和空间方向，从而把整个时间层上的辛结构推广到局部区域甚至每个点, 把无穷维哈密尔顿系统变成有穷维哈密尔顿系统, 把定义在整个时间层上的哈密尔顿函数变成定义在整个区域上的哈密尔顿函数. 这样可以方便地把辛算法应用于偏微分方程，从而使多辛算法可以应用到更广泛的领域. 在多辛算法基础上, 我们引进了局部保结构算法, 其基本思想就是把原来各种保结构算法所保的整个时间层上的结构推广到局部，使得数值算法能在每个局部领域和每个点上保结构，从而不必关心系统

是否具有合适的边界条件. 局部守恒算法的概念能够从一个侧面解释某些保结构算法性能的差异.

由微分复形所揭示的微分几何结构是偏微分方程的一个本质要素，它对正确离散原始微分复形有着重要意义，这一新的几何观点为最近几十年发展起来的各种数值方法作出了统一解释.

李群算法是保结构算法中的一个重要研究方向, 由于辛群是李群, 所以辛几何算法可以看成是李群算法的一个特例. 近十多年来, 李群算法的研究已取得了丰硕的成果, 在许多领域得到广泛的应用. 特别是在单程波李代数积分中的应用已在石油勘探中得到应用. 同时辛几何算法为Maslov渐近理论提供了克服地震层析成像中的焦散问题的算法.

本书还研究了一类带耗散项的系统或者有外力作用的系统的保结构算法.

因此，非常有必要在《哈密尔顿系统的辛几何算法》的基础上编写本书，把保结构算法的新理论和新算法进行系统总结，让大家更全面地了解保结构算法. 作者也希望本书能够成为一块基石，帮助更多的人对保结构算法产生兴趣，从而使这一领域产生更多突破性的成果.

本书的内容涵盖了中国科学院计算数学与工程计算研究所辛几何算法课题组近几年来的研究工作, 先后参加这个课题组的有赵平福、王雨顺、孙雅娟、陈景波、刘亭亭、孙建强、苏红玲、田益民. 本书的出版同样得到尚在久、唐贻发、洪佳林研究员的关心和支持.

特别要提出的是, 本书的出版得到了中国科学院地理与地球物理研究所的李幼铭和刘洪的支持.

最后,作者还要感谢中国科学院数学与系统科学研究院、南京师范大学数学科学院的支持.

本书先后得到国家自然科学基金(10871099, 11071251, 11161017), 国家重点基础研究发展计划(973)(2007CB209603)和国家高科技研究发展计划(863)(2010AA012304, 2006AA09A102-08)的资助.

本书可作为高等院校理工类专业研究生的教材, 也可作为从事计算数学、计算物理、计算力学、计算化学、天气预报、天体物理、地球物理等专业, 特别是从事偏微分方程数值计算科技工作者的参考书.

本书在写作过程中参考了大量文献，其中有些并未在文中标注，但也列在了参考文献中. 此外，书中一些向量和矩阵符号沿袭了常用的写法，存在粗体和非粗体共用的情况.

由于作者水平有限，书中一定会有不当和错误之处，敬请读者批评指正.

作者
2011 年 12 月 于 北京

目 录

第一章　一般辛结构下的生成函数法

§1.1　生成函数的几何意义

由于生成函数在构造辛算法方面具有重要作用[AM78],[Arn89],[MW83],[MW01], 故在这一节首先介绍生成函数的几何意义.

定义 1.1.1 如果$\forall q \in Q$, $(T_q i)(T_q Q)$ 是$T_{i(q)}P$ 的子空间, 或者$i_{*_q}: T_q Q \to T_{i(q)}P$ 是单射, 则称i为$Q \to P$ 的浸入.

定义 1.1.2 设$(\mathbf{R}^{2n},\omega)$ 为辛流形, L 为 $\mathbf{R}^{2n}$ 的子流形, $i:\ L \to \mathbf{R}^{2n}$ 为浸入, 如果$(T_x i)(T_x L)$ 为$T_{i(x)}\mathbf{R}^{2n}$ 中某一 Lagrange 子空间, 则称L 为$(\mathbf{R}^{2n},\omega)$ 的 Lagrange 子流形, 如果局部有

$$i_L^*\omega = -\mathrm{d}i_L^*\theta = 0.$$

定义 1.1.3 若存在某一函数ϕ: $L \to \mathbf{R}$ (局部定义), 有

$$i_L^*\theta = \mathrm{d}\phi,$$

则称ϕ 为Lagrange 子流形L 的生成函数.

考虑辛流形$(\mathbf{R}^{2n},\omega)$ 及$\mathbf{R}^{2n}$ 到$\mathbf{R}^{2n}$ 上的投影$\pi_i: \mathbf{R}^{2n}\times\mathbf{R}^{2n}$ $(i=1,2)$,

$$\pi_i\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = z_i,$$

其中$z_1, z_2 \in \mathbf{R}^{2n}$.

如果θ_1 和θ_2 分别是辛流形P_1和P_2的两个正则1-形式, 满足$\Omega_1 = -\mathrm{d}\theta_1$, $\Omega_2 = -\mathrm{d}\theta_2$, 就可构造$\mathbf{R}^{4n}$ 上的微分2-形式

$$\Omega = \pi_1^*\Omega_1 - \pi_2^*\Omega_2,$$

使$(\mathbf{R}^{4n},\Omega)$ 为辛流形.

引理 1.1.1 给定辛流形$(\mathbf{R}^{2n},\omega)$, 于是映射$f: \mathbf{R}^{2n} \to \mathbf{R}^{2n}$ 为辛变换当且仅当

$$i_f^*\Omega = 0,$$

其中i_f: $\mathrm{gr}(f) \to \mathbf{R}^{2n}\times\mathbf{R}^{2n}$ 为浸入, $\mathrm{gr}\,(f)$ 为f 的图像.

证明:投影π_i $(i=1,2)$ 在$\mathrm{gr}\,(f)$ 上的限制可表示为$\pi_i \circ i_f = \pi_i|_{\mathrm{gr}\,(f)}$, 容易验证在$\mathrm{gr}\,(f)$ 上 $\pi_2 = f \circ \pi_1$, 即$\pi_2 \circ i_f = f \circ \pi_1 \circ i_f$,

$$i_f^*\Omega = i_f^*(\pi_1^*\Omega_1 - \pi_2^*\Omega_2) = (\pi_1 \circ i_f)^*(\Omega_1 - f^*\Omega_2).$$

辛映射的图像$\mathrm{gr}\,(f)$ 构成辛流形$(\mathbf{R}^{2n}\times\mathbf{R}^{2n},\Omega)$ 中的Lagrange 子流形, 且由$i_f^*\Omega = 0$ 及Poincaré 引理, 存在生成函数ϕ, 使得

$$i_f^*\Omega = -\mathrm{d}i_f^*\theta = 0, \quad i_f^*\theta = \mathrm{d}\phi,$$

其中$\theta = -\pi_1^*\theta + \pi_2^*\theta$, $\phi : \mathrm{gr}\,(f) \to \mathbf{R}$. 引理中的函数$\phi$ 被称为正则变换f 的生成函数. 辛映射f 的图像如下:

$$\mathrm{gr}\,(f) = \left\{ \begin{bmatrix} fz \\ z \end{bmatrix} z \in T^*\mathbf{R}^n = \mathbf{R}^{2n},\ f : \mathbf{R}^{2n} \to \mathbf{R}^{2n} \right\}.$$

从引理1.1.1 可以得到下面的定理.

定理 1.1.1 映射$f : P_1 \to P_2$ 是辛映射当且仅当存在一个函数$\phi : \mathrm{gr}\,(f) \to \mathbf{R}$, 使得$i_f^*\theta = \mathrm{d}\phi$.

注 1.1.1 设$L \in \mathbf{R}^{4n}$ 是$\mathbf{R}^{4n}$ 上的$2n$ 维子流形. 记$i_L : L \to \mathbf{R}^{4n}$ 是浸入, i_L^* 表示i_L 的拉回映射, 如果$i_L^*\Omega = 0$, 即Ω 在L 的限制为零, 则称L 为J_{4n}-Lagrange 的子流形; 如果$i_L^*\widetilde{\Omega} = 0$, 即$\widetilde{\Omega}$ 在L 的限制为零, 则称L 为$\widetilde{J}_{4n}$-Lagrange 的子流形.

注 1.1.2 使用生成函数构造格式的思路是: 首先截断生成函数展开的幂级数, 从而得到生成函数某精度的近似, 然后通过生成函数和辛映射之间的关系, 达到获取原辛映射的某种近似, 也即构造了计算原辛映射的一种近似方法, 即差分格式.

§1.2 简要叙述生成函数法

《哈密尔顿系统的辛几何算法》一书[冯康等03],[FQ10]的第五章详细叙述了如何用生成函数法来构造Hamilton 系统的辛几何算法. 这一节将简要叙述生成函数法的要点. 从上一节知道,辛映射是和一个函数相联系的, 这个函数被称作生成函数, 生成函数在Hamilton-Jacobi 理论、经典力学和量子力学等诸多领域都起着重要的作用.

记:

$$gl\,(m)=\{A\mid \text{任意 } m\times m \text{ 矩阵}\},$$

$$GL(m)=\{A\mid A\in gl\,(m),\ |A|\neq 0\}.$$

定义:

$$Sp(2m)=\{M\in GL(2m)\mid M^{\mathrm{T}}J_{2m}M=J_{2m}\},$$

$$CSp(2m)=\{\alpha\in GL(4m)\mid \alpha^{\mathrm{T}}J_{4m}\alpha=\mu J_{4m},\ \mu\neq 0\},$$

$$CSp(\tilde{J}_{4m},J_{4m})=\{\alpha\in GL(4m)\mid \alpha^{\mathrm{T}}J_{4m}\alpha=\mu \tilde{J}_{4m},\ \mu\neq 0\},$$

其中

$$J_{4m}=\begin{bmatrix} O & I_{2m}\\ -I_{2m} & O\end{bmatrix}$$

是$\mathbf{R}^{4n}$ 空间中的标准辛结构, 也即乘积空间余切丛$T^*(\mathbf{R}^n\times\mathbf{R}^n)=T^*\mathbf{R}^{2n}\cong\mathbf{R}^{4n}$ 的标准辛结构, I_{2m} 是标准的$2m\times 2m$ 单位矩阵, 而

$$\tilde{J}_{4m}=\begin{bmatrix} J_{2m} & O\\ O & -J_{2m}\end{bmatrix}$$

是余切丛乘积空间$T^*\mathbf{R}\times T^*\mathbf{R}=\mathbf{R}^{4n}$ 的乘积辛结构[Ge90],[Ge91],[FWQW89],[Fen86].

令$\alpha=\begin{bmatrix} A_\alpha & B_\alpha\\ C_\alpha & D_\alpha\end{bmatrix}\in GL\,(4m)$, 其中$A_\alpha,B_\alpha,C_\alpha,D_\alpha$ 是$2m\times 2m$ 矩阵, 在条件$|C_\alpha M+D_\alpha|\neq 0$ 下, 可定义线性分式变换:

$$\sigma_\alpha: gl\,(2m)\longrightarrow gl\,(2m),$$

$$N=\sigma_\alpha(M)=(A_\alpha M+B_\alpha)(C_\alpha M+D_\alpha)^{-1}.$$

引理 1.2.1 设$\alpha\in GL\,(4m),\alpha^{-1}=\begin{bmatrix} A^\alpha & B^\alpha\\ C^\alpha & D^\alpha\end{bmatrix}$, 则下面四个横截条件等价[FWQW89]:

$$|C_\alpha M+D_\alpha|\neq 0, \tag{1.2.1}$$

$$|MC^\alpha-A^\alpha|\neq 0, \tag{1.2.2}$$

$$|C_\alpha N+D^\alpha|\neq 0, \tag{1.2.3}$$

$$|NC_\alpha-A_\alpha|\neq 0. \tag{1.2.4}$$

定理 1.2.1[FWQW89],[Fen86] 设$\alpha\in CSp(\tilde{J}_{4m},J_{4m}),g:\mathbf{R}^{2m}\to\mathbf{R}^{2m}$, $\widehat{z}=g(z)$ 是辛映射, 其中$M(z)=\dfrac{\partial g(z)}{\partial z}$是$\mathbf{R}^{2m}$ 的某个邻域, 且满足条件(1.2.1). 在$\mathbf{R}^{2m}$ 的某个邻域存