

Hamiltonian

Feng Kang Qin Mengzhao
冯康 秦孟兆 著

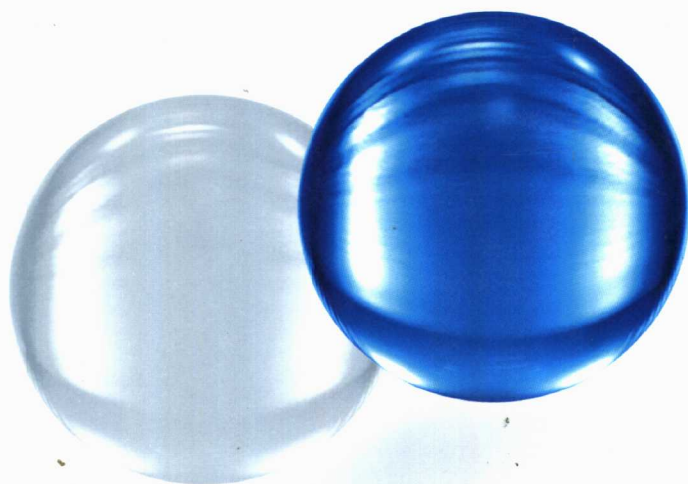
浙江科学技术出版社

哈密顿系统的 辛几何算法

$$f^* \omega = \omega$$

$$\omega = \sum dp_i \wedge dq^i$$

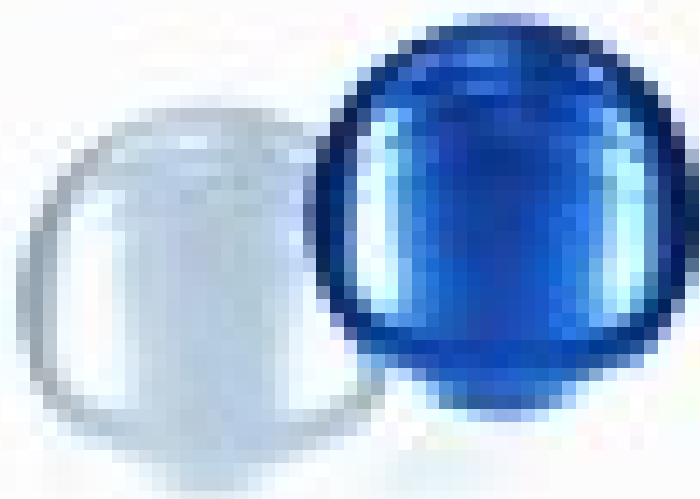
Symplectic Geometric
Algorithms for
Hamiltonian Systems



John
W. Edwards

辛几何与量子力学

辛几何算法



哈密尔顿系统 的辛几何算法

冯 康 秦孟兆 著

浙江科学技术出版社

Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems

Feng Kang Qin Mengzhao

Zhejiang Science & Technology Press

图书在版编目(CIP)数据

哈密尔顿系统的辛几何算法 / 冯康, 秦孟兆著. — 杭州: 浙江科学技术出版社, 2003.12
ISBN 7-5341-1659-7

I . 哈… II . ①冯… ②秦… III . 计算数学
IV . O24

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 062440 号

哈密尔顿系统的辛几何算法

著 者: 冯康 秦孟兆
出 版: 浙江科学技术出版社
印 刷: 杭州富春印务有限公司
发 行: 浙江省新华书店
开 本: 787×1092 1/18
印 张: 32.67
插 页: 4
字 数: 670 000
版 次: 2003 年 12 月第 1 版
印 次: 2003 年 12 月第 1 次印刷
书 号: ISBN 7-5341-1659-7/O · 52
定 价: 68.00 元
责任编辑: 周伟元
装帧设计: 孙 菁

Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems

Zhejiang Science & Technology Press
347 Tiyyuchang Road, Hangzhou, China
©2003 by Feng Kang and Qin Mengzhao
First Published in 2003
Printed in Zhejiang Printing Co., Ltd
ISBN 7-5341-1659-7 / O · 52

在20世纪80年代后期,冯康提出并发展了被称为辛算法的方法,来求解哈密尔顿形式的演化方程.运用理论分析结合数值实验,他证明了这种方法在长时间计算方面远优于传统的方法.直至生命的最后一刻,他已经把这种思想方法推广到其他的结构.

P. 拉克斯 (Lax)

摘自 1993 年 11 月号的 SIAM NEWS

In the late 1980s, Feng Kang proposed and developed so called Symplectic algorithms for solving evolution equations in Hamiltonian form. Combining theoretical analysis and computer experimentation, he showed that such methods, over long times, are much superior to standard methods. At the time of his death, he was at work on extensions of this idea to other structures.

Peter Lax

Cited from SIAM NEWS November 1993.



1991年冯康在一次国际学术会议上作大会报告

冯康院士简介

冯康，浙江绍兴人，1920年9月9日生于江苏南京，1993年8月17日在北京病逝。生前为中国科学院院士，中国科学院计算中心(现名为中国科学院计算数学与科学工程计算研究所)名誉主任，《计算数学》、《数值计算与计算机应用》、《Journal of computational Mathematics》三刊主编，全国计算数学会名誉理事长，国家基础研究重大项目：大规模科学与工程计算的方法和理论(攀登计划)首席科学家。

冯康院士在科学研究的众多领域中作出了杰出贡献。1957年前他主要从事基础数学研究，在拓扑群和广义函数论方面取得了卓越的成就。1957年以后转向应用数学与计算数学研究，凭借其渊博的数学、物理和工程方面的学识，在有限元方法、自然边界元方法及哈密尔顿系统的辛几何算法等重要方向作出了开创性、历史性的贡献，在

MA154/01

国际学术界赢得了崇高威望，曾先后获得了全国科学大会重大成果奖、国家自然科学二等奖、国家科技进步二等奖及中国科学院自然科学一等奖。1997年，在他病逝4年以后，他生前最后10年的研究成果“哈密尔顿系统的辛几何算法”又获得国家自然科学一等奖。

从20世纪50年代末至20世纪60年代，冯康领导的研究集体解决了大量的有关工程设计应力分析的大型椭圆方程的计算问题，积累了丰富的经验。冯康对此加以总结、提高，独立于西方，系统地开创了有限元方法，并奠定了方法的数学基础。这一方法具有通用简便、适应灵活、基础牢靠等多方面的优点，特别适合于解决复杂的大型科学和工程计算问题，并便于在计算机上实现，因而得到了迅速、广泛的发展和世界规模的跨行业的应用，促成了工程计算的革新。有限元方法的提出是当代计算方法进展中的一个里程碑，意义重大，影响深远。中国学者在对外隔绝的环境下独立创造了有限元，在世界上属最早之列，今天这一贡献已为全人类所共享。这是国内外专家对有限元方法本身以及对冯康作为创始人之一的功绩的恰当评价。

冯康对于把椭圆方程归化为边界积分方程的问题也作出了创造性的贡献。20世纪70年代末他提出了自然边界归化的方法，完全不同于国际流行的经典方法。自然边界归化保证了归化了的边界积分方程与未归化的区域椭圆方程自然地兼容，同时也保证了在计算方法上边界有限元与区域有限元自然地兼容，由此形成一个有限元与边界元兼容并蓄而自然耦合的整体性系统，能够灵活适应于大型复杂科学和工程问题，便于分解计算。这是一项与并行计算相关而兴起的区域分解方法的先驱工作。

自1984年起冯康的兴趣转向动态问题，主要是哈密尔顿系统的计算方法。他于1984年首次提出基于辛几何计算哈密尔顿体系的方法，开创了这一富有活力及发展前景的新领域。冯康带领他的研究



获奖证书

组投入了此领域的研究，取得了一系列优秀成果。新的算法解决了久悬未决的动力学长期预测计算方法问题，具有广阔的发展前景。关于哈密尔顿系统的辛几何算法的研究，冯康多次在国内外讲学和参加国际学术会议上作大会报告，受到普遍欢迎及高度评价，此后国际和国内都已兴起了许多后继研究。这一方法也已在科学和工程的很多领域得到成功的应用。哈密尔顿系统的辛几何算法的研究项目获得1997年国家自然科学一等奖。

冯康院士是世界著名数学家，是我国计算数学事业的主要奠基人和开拓者。他博学多才，高瞻远瞩，治学严谨。他在研究工作中积极倡导理论联系实际，身体力行，成功地开创了一个又一个研究新方向、新领域，带领一批又一批科学工作者在新的方向、新的领域做出新成绩。他从不满足，具有强烈的进取心和为国争光的使命感，这使他一直站在世界计算数学队伍的前列。他几十年如一日在数学的前沿阵地拼搏，为人类的科学事业和祖国的繁荣昌盛无私奉献，奋斗到了生命的最后一刻。

序 言

自 20 世纪 80 年代初以来, 哈密尔顿系统的辛几何算法便一直是我所(包括前身中国科学院计算中心)的重点研究方向. 计算中心的首任主任、国际著名数学家、我国计算数学和科学计算事业的奠基人冯康院士(1920 - 1993)则是这一新的研究方向的开拓者和带头人.

冯康院士在数学的不同领域作出过许多重要贡献. 20 世纪 60 年代中期他独立于西方创始有限元方法及随后取得的一系列重要成就, 使他自 20 世纪 70 年代后期起驰名世界. 1980 年初, 他转向动力系统计算方法的研究, 提出了哈密尔顿系统的辛几何算法, 又开辟了一个有广阔应用前景的全新的研究领域. 他将生命的最后 10 年全部投入到了这一领域的研究中. 他组织研究队伍进行了系统、深入的理论研究和数值实验, 取得了极其丰硕的成果. 在他去世 4 年后, 这一重大研究果终于获得了国家自然科学一等奖. 这是自 1990 年以来我国仅有的 3 项国家自然科学一等奖之一.

冯康院士生前一直想总结哈密尔顿系统的辛几何算法方面的相关研究成果并出版一本专著. 他已接到了德国 Springer 出版社的约稿邀请, 并计划等到材料更充实、内容更丰富些时再完成这一工作. 他撰写了两章英文书稿, 并曾作为讲义在北京大学为研究生讲授. 可惜 1993 年 8 月冯康院士不幸病逝, 他没有来得及实现他的计划.

秦孟兆教授作为冯康教授的长期合作者和追随者, 从 20 世纪 80 年代初冯康课题组成立起就参加了哈密尔顿系统的辛几何算法的研究工作, 经历了辛算法创始及发展的全过程. 特别在冯康院士去世后, 他继续遵循冯康先生的学术思想, 带领冯康研究组的青年成员不断发展这一重要的数值计算方法, 又取得了许多新的重要的成果. 为实现

冯康院士的遗愿，秦教授费了5年心血，在课题组其他成员的协助下，在研究所的支持下，整理冯康先生的遗稿和一系列已发表过的论著，完成了本书的撰写工作。冯康院士生前计划撰写的主要内容经历了时间的考验，已被包括在本书中。

我们希望本书不仅能向读者系统介绍哈密尔顿系统的辛几何算法，而且能较全面地反映冯康院士的学术思想，从而进一步促进该领域的研究工作及相关成果的推广应用。

今年8月17日是冯康院士逝世10周年纪念日，本书的出版将是对他最好的纪念。

中国科学院计算数学与科学工程计算研究所

2003年8月10日

前言

经典力学有牛顿力学、拉格朗日力学、哈密尔顿力学三种形式表示, 这些不同数学形式陈述同一物理规律, 由于形式不同, 它们在实践中对解决问题会提供不同的途径, 因此等价的数学形式在实践中可能是不等效的.

首先还得从历史上来考察人们对哈密尔顿体系的评价. 哈密尔顿本人是从几何光学着手创建他的理论模式的, 而后才转向与光学相距甚远的力学. 1934 年哈密尔顿曾说: “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为一门独立的学问.” 这仅仅是他本人的期望. 19 世纪同代人对其反应则很冷淡, 认为这套理论 “漂亮而无用”, 著名数学家 Klein 在对哈密尔顿体系的理论给予很高的评价的同时, 对其实用价值亦持怀疑态度, 他说 “这套理论对于物理学家是难望有用的, 而对工程师则根本无用.” 这种怀疑, 至少就物理学的范畴而言, 是被随后的历史发展所完全否定了. 到了 20 世纪量子力学创始人之一 Schrödinger 曾说: “哈密尔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尔顿形式.”

哈密尔顿体系的基础是辛几何, 哈密尔顿为了研究牛顿力学, 引进广义坐标和广义动量来表示系统的能量, 现在通称为哈密尔顿函数; 对于自由度为 n 的系统, n 个广义坐标和 n 个广义动量张成 $2n$ 维相空间, 这样, 牛顿力学成为相空间中的几何学, 用现代观点来看, 这是一种辛几何学. 随后, Jacobi, Darboux, Poincaré, Catan, Weyl 从不同角度 (代数与几何的) 对它进行了研究, 但是现代辛几何的兴起, 应该说是从 KAM (Kolmogorov-Arnold-Moser) 定理的建立开始的. 在 20 世纪 70 年代, 由于研究 Fourier 积分算子、几何量子化与群表示论、临界点分类、李代数对偶空间上的哈密尔顿系统的需要, 人们对辛几何进行了大量的研究 (Arnold, Douisttermatt, Guillermin, Weinstein, Marsden), 从而推动了这些研究领域的发展. 进入 20 世纪 80 年代后, 整体辛几何的研究相继出现, 如硬辛几何的研究、辛映射对不动点的研究 (Contey, Zehnder 的 Arnold 猜测,)、矩映射凸性的研究 (Atiyah, Gullemin-Sternberg) 等, 看来, 不仅辛几何本身的研究是极其丰富而有生命力的, 而且它的应用领域极其广泛, 如天体力学、几何光学、等离子体物理、分子物理、高能加速器的设计、流体力学、弹性力学、最优控制等.

哈密尔顿体系是动力系统的重要体系, 一切真实的、耗散可忽略不计的物理过程都可表示成哈密尔顿体系, 它的应用范围很广, 包括结构生物

学、药理学、半导体、超导、等离子体、天体力学、材料和偏微分方程,其中前 5 个方面应用已列为美国研究计划重点“Grand Challenges”。

哈密尔顿体系是如此重要,它所包括的有限或无限维的都是特定形式常微分方程和偏微分方程。对于微分方程计算方法的研究从 18 世纪起,至今已有异常丰富的积累,专著、论文卷帙浩繁,无论是通用的、普适的方法,还是针对特定类型的方法都是这样,但是我们发现针对哈密尔顿类型方程的计算方法都基本阙如。这一空白贫乏的现状与哈密尔顿体系的重要性和普适性形成了尖锐的对比是令人费解的。

冯康和他的课题组抓住这个问题进行深入、系统的研究,终于在计算方法这个领域开辟了一个新的分支——辛几何算法。

冯康于 20 世纪 80 年代初就开始研究针对哈密尔顿体系的计算方法,并于 1984 年在国际微分几何与微分方程北京讨论会上作了题为《差分格式与辛几何》的大会报告,首次系统地提出了哈密尔顿系统的辛几何算法。他组织了一支精干的研究队伍,经过 10 多年努力,取得了重要成果,主要包括:

1. 提出了哈密尔顿系统的辛几何算法的完整的理论框架。
2. 推广了分析力学中生成函数与 Hamilton-Jacobi 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。现在这一理论被广泛地称为常微分方程的后误差分析 (backward analysis)。
5. 把哈密尔顿系统的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,对无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。

冯康及其课题组开辟了一个理应受到重视但却长期被忽视的研究领域。由于传统的算法除少数例外,都不是辛算法,不可避免地带有耗散性等歪曲体系特征的缺陷,而冯康提出的为数众多的非传统的算法却有保持体系结构的优点,在空间结构对称性和守恒性方面优于传统算法,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。

出版这本书的目的,在于系统介绍辛几何算法理论及发展,从辛积分子到酉积分子进而到一般李群积分子、变分积分子,从保辛结构、保酉结构、保体积结构、保接触结构,到保泊松结构、保李—泊松结构;从保首

次积分格式来说,有保能量格式、保动量格式、保系统特征值(等谱流);从辛结构本身来说,从保单辛结构(主要是常微分方程)到多辛结构(偏微分方程).一句话,统称为保结构算法.

冯康院士生前一直想出版这方面专著,他已接到德国 Springer 出版社邀请,但他想等材料再充足一些,内容更丰富一些时出版此书.由于冯康院士不幸于 1993 年病逝,为了实现他生前的愿望,本书第二作者于 1998 年开始了本书的整理后撰写工作.作者作为课题组的一员历经了辛几何算法创始及发展的整个过程.

本书叙述哈密尔顿辛几何算法理论基础及一些相关的算法,包括冯康院士生前计划撰写的主要内容.这些内容已经历了时间的考验.第一章大部分内容及第二章就是冯康生前在北京大学讲学的讲稿,其他章节主要是根据冯康论文和手稿及他的课题组成员的论文编写而成的.冯康院士逝世后,秦孟兆教授与冯康研究组的当年成员在继续研究中取得的、涉及国际上沿着这一方向发展的最新研究成果将另外著作出版,其主要介绍辛几何发展的保结构算法新内容、多辛算法、李群算法、Birkhoff 系统, Maslov 渐近理论等.

我们在这里特别要提及冯康院士的学生汪道柳博士,他在出国前百忙之中为本书撰写了第五章.他一直是冯康先生得力助手,在此我们表示深切的感谢.

我们还要感谢冯康课题组每一个成员在辛几何算法方面作出的贡献.邬华谟研究员、汪道柳、尚在久、唐贻发、李旺尧、陈旻、洪佳林、陈景波、王雨顺、孙雅娟、李宏伟、孙建强、刘亭亭、苏红玲、田益民博士,还要感谢留美的博士们:葛忠、李春旺、吴裕华、张梅清、朱文杰、李胜台、蒋立新、舒海滨,他们都在各个不同时期为辛算法作出了贡献.

作者还要感谢国家自然科学基金会、国家攀登计划项目、国家重点基础研究资助项目,在各个时期对这项研究的大力支持.

最后作者还要感谢中国科学院数学与系统科学研究院、中国科学院计算数学与科学工程计算研究所,以及科学与工程计算国家重点实验室的支持.

这本书的出版还要感谢王雨顺博士的大力帮助,还对丁培柱教授、邬华谟研究员和金怡编审为本书所作的校对工作深表谢意.

我们特别感谢中国科学院院士冯端为本书撰写后记.

秦孟兆

2002 年 8 月 9 日

目 录

绪 论	1
第一章 微分流形的基本知识	34
1.1 微分流形	34
1.1.1 微分流形与可微映射	34
1.1.2 切空间与微分	37
1.1.3 子流形	40
1.1.4 淹没与横截	45
1.1.5 单位分解	49
1.2 切丛	56
1.2.1 切丛与定向	56
1.2.2 向量场和流	62
1.3 外积	64
1.3.1 外形式	65
1.3.2 外代数	68
1.4 微分形式的基础	75
1.4.1 微分形式	75
1.4.2 微分形式在映射下的性态	80
1.4.3 外微分	82
1.4.4 Poincaré 引理及其逆引理	84
1.4.5 3 维空间中的微分形式	86
1.4.6 Hodge 对偶与星算子	88
1.4.7 余微分算子 δ	89
1.4.8 Laplace-Beltrami 算子	89
1.5 流形上的积分	90
1.5.1 几何预备知识	90
1.5.2 积分和 Stokes 定理	93
1.5.3 经典的向量分析定理	96
1.6 上同调和同调	98
1.7 李导数	99
1.7.1 微分算子的向量场	99
1.7.2 向量场的流	101

1.7.3	李导数和缩并	103
第二章	辛代数和辛几何的基本知识	110
2.1	辛代数和正交代数	110
2.1.1	双线性型	110
2.1.2	半双线性型	113
2.1.3	标量积和 Hermitian 积	114
2.1.4	标量积的不变群	116
2.1.5	复向量空间的实表示	118
2.1.6	实向量空间和实线性变换的复化	120
2.1.7	$GL(n, F)$ 上的李代数	122
2.2	双线性型的典型约化	125
2.2.1	合同约化	125
2.2.2	保形对称矩阵和 Hermitian 矩阵的合同标准形	127
2.2.3	正交变换下标准形的相似约化	132
2.3	辛空间和欧氏空间	135
2.3.1	辛空间及其子空间	135
2.3.2	辛群	142
2.3.3	有关 Lagrangian 子空间的一些定理	145
2.3.4	$Sp(2n)$ 的几种特殊类型	147
2.3.5	$Sp(2n)$ 的生成子	154
2.3.6	辛矩阵和无穷小辛矩阵的特征值	157
2.3.7	Lagrangian 子空间的生成函数	159
2.3.8	广义的 Lagrangian 子空间	161
2.3.9	线性分式矩阵变换	163
第三章	哈密顿力学与辛几何	166
3.1	辛流形	166
3.1.1	辛流形的构造	166
3.1.2	余切丛上的标准辛结构	167
3.1.3	哈密顿向量场	167
3.1.4	Darboux 定理	168
3.2	$\mathbf{R}^{2n}$ 中的哈密顿力学	169
3.2.1	$\mathbf{R}^{2n}$ 中的相空间和正则系统	169