arXiv:2303.15883v1 [math.NA] 28 Mar 2023

泊松几何中的数值方法及其在力学中的应用

OSCAR COSSERAT、CAMILLE LAURENT-GENGOUX 和 VLADIMIR SALNIKOV

摘要。我们回顾了泊松几何背景下几何积分器的问题，并解释其构造方法。这些泊松积分器在一些力学示例中进行了测试。通过数值计算展示了它们的性质，并将其与传统方法进行了比较。

目录

引言 2
1. 引言示例 2. 泊松哈密顿系统的几何积分器。2.1. 泊松结构：定义 2.2. 泊松结构的底层几何 2.3. 哈密顿方程示例——积分器的初步候选方案。2.4. 泊松哈密顿积分器。3. 泊松流形的双实现 3.1. 双实现 I：定义与存在性。3.2 双实现 II：显式构造。3.3. 示例 4. 泊松哈密顿积分器的显式构造 5. 数值测试 5.1. 刚体 5.2. 洛特卡-沃尔泰拉系统 结论／展望 参考文献
3 5 5 6 8 9 11 12 13 15 17 20 20 23 24 25

日期：2023年3月29日。

引言

泊松几何可以描述力学中一大类守恒系统，既适用于离散介质，也适用于连续介质。这些系统可以通过约化过程得到，也可以作为某些自然系统演化的专门模型。仅举几个非标准示例：化学（聚合物动力学， [8]）、塑性（弹塑性，[18]）、种群动力学（[16]）、液晶理论（[9]）、热力学（GENERIC形式体系， [12]）、控制理论（主动约束与运动学约束， [21]）。此外，泊松结构的几何对于表达动力系统的对称性、守恒律和定性行为也至关重要。

除了泊松结构纯粹的数学意义之外，对于哈密顿微分方程而言，它们还提供了在数值模拟中应予保持的适当几何结构，从而有可能产生一大类几何积分器。目前，这一领域的研究现状主要涉及辛积分器，它们如今已为人所知数十年（[26]），对应于辛结构，即定义在正则相空间上的系统所具有的非退化泊松结构；从几何上说，也就是定义在余切丛上的系统。据我们所知，研究更一般泊松结构的工作非常少。其中大多数依赖于Weinstein分裂定理（例如参见 [30]），该定理指出，泊松流形可以按辛叶进行分叶。由此自然产生的想法是：“限制在包含该轨迹的叶上，然后在其上应用辛积分”。

这种“朴素”方法在构造泊松积分器时面临两个概念上的困难：上述叶状结构极少能被明确地获知，而且在一般情形下它是奇异的，这意味着上述策略成功应用的情况其实只是一些相当特殊的例子。 [1], 提出了一种解决办法：它基于将泊松流形积分到（局部）辛群胚；从几何角度看，这一过程可视为一种去奇异化。

本文旨在阐明这一积分过程中出现的微妙之处，使其变得明确，同时介绍由此得到的泊松积分器的特点。我们不会深入数学证明（有兴趣的读者可参阅 [1] 了解详情），而是着重讨论所构造数值方法的精确行为。不过，我们会提供所有必要的构件，使本文内容自成一体。

我们可以在这里先说明一个重要细节：在泊松几何的语境下，究竟什么才是恰当的保结构数值方法，这一定义本身就值得讨论。对于辛情形，通常的策略是认为，保持辛形式就能保证能量守恒。事实上，情况要比这稍微微妙一些：离散的辛流确实保持某个哈密顿量的等值面（假设其全局存在不存在拓扑障碍），但这个哈密顿量未必就是与系统能量相对应、并决定其演化的那个哈密顿量。不过，这种差异是可以估计的：它会在零附近振荡，其振幅可以在指数长的时间内保持很小。对于泊松情形，这种微妙性甚至更加

明显：仅仅保持泊松结构并不能保证能量守恒，粗略地说，这是由于“退化”方向的存在所导致的。

因此，我们引入泊松哈密顿积分器（PHI）这一更强的概念：它是一种数值方法，对哈密顿系统的轨迹进行离散化时，既能保持泊松结构，又能与某个时变哈密顿量所对应的轨迹完全一致；该时变哈密顿量在方法阶数范围内与初始哈密顿量相等。后一条件看起来要求很高，但实际上并非如此：泊松哈密顿积分器只要求存在这样一个时变哈密顿量，而不要求以构造性方式给出。事实上，只需在理论上证明其存在即可；通常我们并不需要计算它。这种未具体指定的存在性保证（再见 [1]），离散化能够保持相空间的几何不变量（辛叶、叶上的辛结构），并保留系统的定性物理性质——我们将在不同情形下对此加以说明。

本文结构如下：首先，我们通过一个简单的洛特卡-沃尔泰拉系统演示 PHI 技术，并观察到，与标准龙格-库塔方法相比，数值解的表现更好。第2节回顾泊松几何的基本知识，以便准确表述定义，并给出泊松哈密顿积分器的构造策略。随后，第3节介绍构造所需的更高级几何概念，并在第4节明确给出构造过程。最后，第5节通过数值结果，将构造出的泊松哈密顿积分器与标准方法在各种典型情形下进行比较。

1. 一个引导性示例

我们来看一个特定的洛特卡－沃尔泰拉型方程组

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= x_1(x_2 + x_3)\\ \dot{x}_2 &= x_2(-x_1 + x_3)\\ \dot{x}_3 &= -x_3(x_1 + x_2).\end{aligned}$$

这个微分方程组作为种群动力学模型出现在 [27]（第97页，方程（16））中，此后类似的系统一直受到广泛研究。对于这个特定的方程组， [16]中求得了一个显式解：对于任意初始点和给定时间，它都可以将数值模拟与精确解 $x^{\text{exact}}(t) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t))$进行比较。有些积分曲线 $x^{\text{exact}}(t)$ 会趋于无穷大，在接近某个特定时间时以指数速度爆发。例如，使用 [16], 中给出的精确公式，可以观察到，对于初始值

$$\begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \\ x_3(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 5 \\ 10^{-3} \end{pmatrix},$$

轨迹 $x^{\text{exact}}(t)$ 在 $T_{sing} \simeq 0.23$ 附近开始爆炸。我们利用这一奇点来测试两种性质不同的数值方法。

第一种是标准的显式二阶龙格–库塔方法（RK-2）；第二种是数值格式（PHI-1），其中 $x^{\mathrm{PHI}}{}_{n+1}$ 通过以下两步过程，根据 $x^{\mathrm{PHI}}{}_{n}$ 隐式计算得到：

$$\begin{cases} x_{1,n+1} &= e^{(\frac{\Delta t}{2}(y_{2,n}+y_{3,n}))}y_{1,n} \\ x_{2,n+1} &= e^{(\frac{\Delta t}{2}(-y_{1,n}+y_{3,n}))}y_{2,n} \\ x_{3,n+1} &= e^{(\frac{-\Delta t}{2}(y_{1,n}+y_{2,n}))}y_{3,n} \end{cases}$$

其中间点 $\mathbf{y}_n = (y1,_n,y2,_n,y3,_n)$ 满足以下关系：

$$\begin{cases} e^{(\frac{-\Delta t}{2}(y_{2,n}+y_{3,n}))}y_{1,n} &= x_{1,n} \\ e^{(\frac{\Delta t}{2}(y_{1,n}-y_{3,n}))}y_{2,n} &= x_{2,n} \\ e^{(\frac{\Delta t}{2}(y_{1,n}+y_{2,n}))}y_{3,n} &= x_{3,n} \end{cases}$$

该数值格式只有一阶精度。尽管如此，在上述奇点 T^{sing}附近，它的表现远胜于二阶龙格-库塔方法（见图 1）：

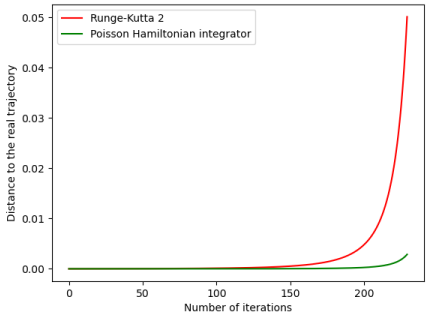


图 1. RK-2 与 PHI-1 的误差比较

我们观察到，PHI-1 方法对解的近似远优于 RK-2。事实上，比较各变量的值可以发现，RK-2 完全错过了奇点：也就是说，在解趋于无穷之前，它就早早偏离了精确解。因此，单独使用 RK-2，甚至无法察觉解存在奇点；而 PHI-1 方法则能将解推进到触及奇点前的最后一步，此时解达到所谓的“数值无穷大”。

一阶积分器的表现优于二阶积分器，这实际上相当出人意料。当T取较大值时，将 PHI-1 与四阶 Runge-Kutta 方案进行比较，也会出现同样的情况。正如这类行为通常发生时一样，其原因在于：我们比较的是一个不保持微分方程底层几何结构的积分器与一个保持该结构的积分器。我们将在下文看到，后一种方法是一种泊松哈密顿积分器，因此能够确切理解它保持了什么，以及为什么这能保证得到适当的轨迹。以下各节旨在说明这类积分器是什么、它们满足哪些性质，以及如何在一大类示例中构造和实现它们。

2. 泊松哈密顿系统的几何积分器。

2.1. 泊松结构：定义。让我们简要回顾一下[1]什么是泊松双向量场和哈密顿微分方程，以及它们为何重要。在力学中，许多支配$x(t)$ 在开子集 $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$ 中的运动的微分方程都具有如下形式：

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dot{x}_1(t) & = & \sum_{j=1}^{n} \pi_{1j}(x(t)) \dfrac{\partial H(x(t))}{\partial x_j} \\ & \vdots & \\ \dot{x}_n(t) & = & \sum_{j=1}^{n} \pi_{nj}(x(t)) \dfrac{\partial H(x(t))}{\partial x_j} \end{array}\right. \tag{1}$$

其中 $H\colon \ \mathcal{U} \longrightarrow \mathbb{R}$ 是一个光滑函数，在此语境下通常称为哈密顿量 ，而(π_{ij})、i、$j \in \{1, ...n\}$ 是一组满足以下条件的光滑函数

$$\pi_{ji} = -\pi_{ij} \ \text{ and } \ \sum_{a=1}^{n} \frac{\partial \pi_{ij}}{\partial x_a} \pi_{ak} + \circlearrowleft = 0, \tag{2}$$

其中所有指标i、j、$k \in \{1, ...n\}$，而 $\circlearrowleft$ 表示它们的循环置换。

我们先来解释这些条件：有一个定理（见[23]第1章）指出，一组(π_{ij})、i、$j \in \{1, ...n\}$ 上的光滑函数满足（2），当且仅当双线性映射：

$$\begin{array}{rccl} \{\cdot,\cdot\}\colon & \mathcal{C}^\infty(\mathcal{U}) \times \mathcal{C}^\infty(\mathcal{U}) & \longrightarrow & \mathcal{C}^\infty(\mathcal{U}) \\ & f, g & \mapsto & \sum_{i,j=1}^{n} \frac{1}{2} \pi_{ij}(x) \left(\dfrac{\partial f}{\partial x_i} \dfrac{\partial g}{\partial x_j} - \dfrac{\partial g}{\partial x_i} \dfrac{\partial f}{\partial x_j} \right) \end{array}$$

是一个李括号，即它是反对称的，并满足雅可比恒等式：

$$\{f, g\} = -\{g, f\} \text{ and } \{\{f, g\}, h\} + \{\{g, h\}, f\} + \{\{h, f\}, g\} = 0 \tag{3}$$

对于所有的f、g、$h \in \mathcal{C}^\infty(M)$。等价地，上述函数 $\pi_{ij}(x)$ 可以视为一个张量 （即从 $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$ 到 $\mathfrak{gl}_n(\mathbb{R})$ 的映射），看作依赖于x的$n \times n$ 矩阵：

$$\begin{array}{rccl} \pi\colon & \mathcal{U} & \longrightarrow & \mathfrak{gl}_n(\mathbb{R}) \\ & x & \mapsto & (\pi_{ij}(x)_{i,j=1}^n) \end{array}$$

定义 2.1。 开子集 $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$ 上的一个泊松结构 是 $\mathcal{U}$ 上的一个张量 π，满足由下式定义的双线性映射 $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{U}) \times \mathcal{C}^\infty(\mathcal{U}) \to \mathcal{C}^\infty(\mathcal{U})$

$$\{f, g\}(x) = {}^t\nabla_x f . \pi(x) . \nabla_x g$$

满足斜对称性和雅可比恒等式（3）。等价地，泊松结构可以看作其系数（$\pi_{ij}(x)$）、i、$j \in \{1, ...、n\}$满足方程（2）的张量。

这一概念由来已久，因此形成了一套有时令人困惑的术语：人们通常将双线性映射 $\{\cdot,\cdot\}$ 称为泊松括号。此外， $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{U})$ 中的函数——视语境而定

[1]熟悉泊松几何的读者可以放心跳过本节，直到第 2.3 节。

——有时都称为哈密顿函数，或简称哈密顿量。最后，容易验证的关系：

$$\{f, gh\} = \{f, g\}h + g\{f, h\}$$

称为莱布尼茨恒等式。有关力学中出现的泊松结构示例，请参见第3.3节。

我们已经看到，泊松结构将两个 哈密顿函数f、$g \in \mathcal{C}^\infty(\mathcal{U})$ 关联到另一个哈密顿函数 $\{f, g\}$。但它还允许将一个 哈密顿函数 $H \in \mathcal{C}^\infty(\mathcal{U})$ 关联到一个一阶自治微分方程，如式（1）所示。更抽象地说，式（1）意味着，对于一个哈密顿函数H，我们关联如下（向量）微分方程：

$$\dot{x}(t) = \pi(x(t)) \cdot \nabla_{x(t)} H. \tag{4}$$

我们称上述形式（4）的一阶自治微分方程为关于 (π, H)的哈密顿微分方程。

注2.2。 在微分几何中， $\mathbb{R}^n$ 的一个开子集U 上的一阶微分方程，带有一个其含义为时间的独立参数

$$\dot{x} = F(x) \tag{5}$$

通常称为U上的向量场。此外，与其只考虑 $\mathbb{R}^n$的开子集，相空间通常被假设为一个微分流形。

2.2. **泊松结构的底层几何**。 自然会有人问：为什么自治的一阶微分方程背后存在泊松结构和哈密顿函数这件事很重要？知道某个给定的微分方程是(π, H)的哈密顿微分方程，有什么益处？经典的回答是，与 π 或H 相关的许多“量”在微分方程的流下保持不变。

更确切地说，微分方程(π, H) 的任意解$x(t)$ （数学中常称为“积分曲线”）都会保持若干函数不变：

(1) H 是一个运动常数，即$H(x(t)) = H(x(0))$。换言之，这意味着(π, H) 的哈密顿微分方程的流保持哈密顿函数H的等值集不变。**(2)** 更一般地，任何满足 $\{G, H\} = 0$ 的函数G 都是运动常数。**(3)** 更一般而言，对于任意函数$G \in \mathcal{C}^\infty(\mathcal{U})$，都有

$$\frac{\mathrm{d}G(x(t))}{\mathrm{d}t} = \{G, H\}(x(t)).$$

现在，我们回顾一下关于 t 时间流的一些性质，该流对应于关于 (π, H) 的哈密顿量微分方程，即映射 $\phi_t \colon x(0) \mapsto x(t)$。当 t 充分小时，该映射在任意 $m \in \mathcal{U}$ 的某个邻域内都有定义：

(1) ϕ_t 保持 π： $\pi(\phi_t(x)) = {}^t\nabla_x \phi_t(x) \cdot \pi(x) \cdot \nabla_x \phi_t(x)$。换言之，对于$(\pi, H)$，哈密顿微分方程的流保持泊松结构 π。

(2) 上述条件也可以表述为：回拉映射$f \mapsto \phi_t^* f$，即将一个光滑哈密顿函数f 映射为哈密顿函数$f \circ \phi_t$的映射，是一个李代数同态，即

$$\phi_t^* \{f, g\} = \{\phi_t^* f, \phi_t^* g\}$$

对于所有函数f、g。

(3) 上述第1项尤其意味着，π 的几何结构得以保持。例如，如果在初始点$x(0)$处，矩阵 $\pi(x(0))$具有某个给定的秩，那么沿积分曲线$x(t)$的每一点处都具有相同的秩。下面我们将利用辛叶的概念给出一个更强的结论。

$\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$ 上的一个辛奇异叶状结构是由子流形构成的划分 $\mathcal{U} = \sqcup_{c \in I} \mathcal{F}_c$，其中每个 $\mathcal{F}_c$ 都赋有辛结构ω_c)。二元组($\mathcal{F}_c$、 ω_c) 称为一个辛叶。

定理2.3 ([23, 30])。 $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$ 上的任意泊松结构都会诱导出一个自然的辛叶叶状结构，其特征由以下两个性质给出：

(1) 两个点属于同一个辛叶，当且仅当它们可以通过一系列哈密顿轨迹相连，即对于某些哈密顿函数，通过积分4 中的方程得到。*(2)* 对于每个 $c \in I$，包含映射 i: $\mathcal{F}_c \hookrightarrow M$ 是一个泊松态射。

此外，点 m 处辛叶 $\mathcal{F}_c$ 的切空间与矩阵 π（m） 的像重合。

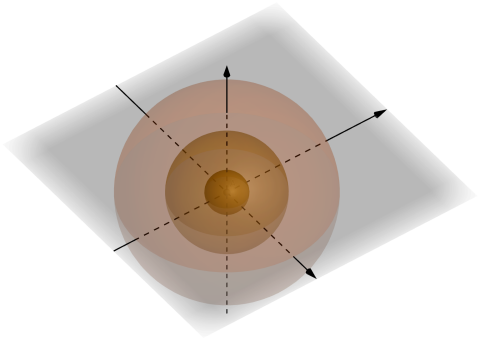


图2。由 $\mathbb{R}^3$ 同心球面和原点构成的叶状结构。

正如以下一些例子所示，叶状结构通常是奇异的。相邻的两片叶不一定具有相同的维数，从拓扑角度看也可能有所不同。因此，对它的研究是一个活跃的研究领域，也促使我们将此处介绍的数值工具应用于一项长期目标。

说明了解一个微分方程对于(π,H)是哈密顿量的重要性的最后一个原因如下：对于(π, H)而言，微分方程的解$x(t)$不会从一片辛叶“跳”到另一片。也就是说，如果$x(0)$属于一片叶$\mathcal{F}_c$，那么对于每个t，解$x(t)$都属于同一片叶。

注 2.4。与前述约束相比，这最后一个“约束”在数值方法中的研究可能较少，因为当泊松结构是辛结构时，它根本不是约束：叶状结构只包含一个叶，即整个空间。但对于非辛泊松结构，这是一个需要考虑的重要特征。

总之，对于任意泊松结构π：

♢ 对于任何关于(π,H)的哈密顿一阶自治微分方程，哈密顿量H沿任意积分曲线保持恒定；♡ 每条积分曲线都留在由π定义的叶状结构中的同一辛叶上；♠ 该微分方程的流保持π，即它是一个泊松态射；♣ 反过来未必成立：保持π并不能保证该流是哈密顿流。

2.3. **哈密顿方程示例——积分器的初步候选**。接下来，我们旨在阐明构造数值格式的思路，这些格式会考虑上述几何特征。我们将通过一些简单但有启发性的例子来说明。

泊松结构的重要例子是典范形式下的辛结构，例如$\pi = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}$。对于这类结构，文献中已有大量辛积分器的例子。一种构造此类积分器的方法采用辛龙格–库塔格式（[29]）的原理：

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \Delta t \sum_{i=1}^{s} b_i k_i \\ k_i &= \pi(x_n + \Delta t \sum_{j=1}^{n} a_{ij} k_j).\nabla H(x_n + \Delta t \sum_{j=1}^{n} a_{ij} k_j) \end{aligned} \tag{6}$$

其中斜率k_i由隐式方程定义，系数b_i和a^{ij}的选取使离散流保持π。对于这个特定的π，任何保持它的轨迹都必然是时变哈密顿量轨迹，至少在局部如此。

当π退化时，同样的原理也可以应用（[14]），并得到一个保持泊松张量不变的离散流。然而，这将导致非物理模拟，例如非哈密顿模拟。由于外部泊松自同构的存在，它不再保证离散轨迹具有哈密顿性质，下面的例子对此进行了说明。

例 2.5。 考虑 $\mathcal{U} = \mathbb{R}^3$。微分方程组

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dot{x} &=& -\frac{(x+y-z)}{8}\left((-x-y+z)^2+(x+y-z)^2\right) \\ \dot{y} &=& \frac{(-y+z)}{4}\left((x-y+z)^2+(x+y-z)^2\right) \\ \dot{z} &=& \frac{(x-y+z)}{8}\left((x-y+z)^2+(x+y-z)^2\right) \end{array}\right. \tag{7}$$

相对于该泊松结构是哈密顿的

$$\pi(x,y,z) = \frac{(x-y+z)^2+(x+y-z)^2}{4}\begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

以及哈密顿量 H: $(x、y、z) \mapsto \frac{(x-y+z)^2+(x+y-z)^2}{8}$。对于任意 $\Delta t > 0$，方程组:

$$\left\{\begin{array}{rl} x_{n+1} = & x_n \cos\left(\Delta t \frac{x_n^2+y_n^2-2y_nz_n+z_n^2}{2}\right) + y_n \sin\left(\Delta t \frac{x_n^2+y_n^2-2y_nz_n+z_n^2}{2}\right) \\ & -z_n \sin\left(\Delta t \frac{x_n^2+y_n^2-2y_nz_n+z_n^2}{2}\right) \\ y_{n+1} = & \frac{-x_n+y_n-z_n}{2} \sin\left(\Delta t \frac{(x_n-y_n+z_n)^2+(x_n+y_n-z_n)^2}{4}\right) + \frac{-x_n+y_n+z_n}{2} \exp\left(\Delta t^k\right) \\ & + \frac{x_n+y_n-z_n}{2} \cos\left(\Delta t \frac{(x_n-y_n+z_n)^2+(x_n+y_n-z_n)^2}{4}\right) \\ z_{n+1} = & \frac{-x_n+y_n+z_n}{2} \exp\left(\Delta t^k\right) + \frac{x_n-y_n+z_n}{2} \cos\left(\Delta t \frac{(x_n-y_n+z_n)^2+(x_n+y_n-z_n)^2}{4}\right) \\ & + \frac{x_n+y_n-z_n}{2} \sin\left(\Delta t \frac{(x_n-y_n+z_n)^2+(x_n+y_n-z_n)^2}{4}\right) \end{array}\right. \tag{8}$$

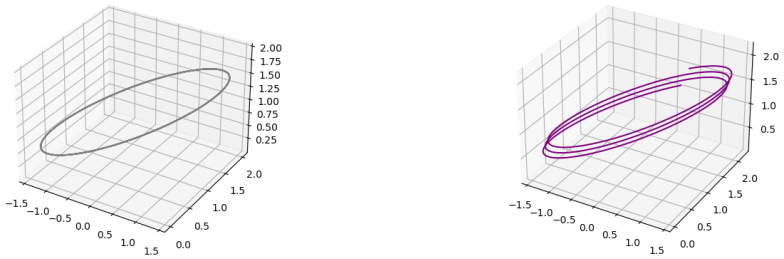
是微分方程（7）的 k 阶离散化。容易验证，它是一个泊松积分器，即 $(x_n、y_n) \mapsto (x_{n+1}、y_{n+1})$ 是一个泊松同构。然而，它不是泊松哈密顿积分器。证明如下：对于 $\mathbb{R}^3$ 上任意一个在 (0, 0, 0) 处至少二阶消失的向量场，其流在 (0, 0, 0) 处的微分是恒等映射。特别地，由于泊松结构的系数在 (0, 0, 0) 处至少二阶消失，任何哈密顿向量场也同样如此，因此，任何泊松哈密顿积分器都应由一个在 (0, 0, 0) 处的微分为恒等映射的局部微分同胚构成。由于映射 $(x_n、y_n、z_n) \mapsto (x_{n+1}、y_{n+1}、z_{n+1})$ 在 (0, 0, 0) 处的微分不等于恒等映射，后一个泊松积分器不是哈密顿的。

图 3.A、3.B 展示了方程 (7) 的实际流与阶数为 $k = 2$ 、初始点为 $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$、

时间步长为 $\Delta t = 10^{-4}$ 时泊松积分器 (8) 的前几次迭代之间的差异。该流应当是 4π-周期的，但其二阶近似会破坏曲线的拓扑结构，即使它保留了泊松张量。几何上的原因是，泊松积分器 (8) 不会始终位于泊松结构的辛叶上，也就是说，不会始终位于满足方程 $\{x - y + z = 常数\}$ 的超平面上。

2.4. **泊松哈密顿积分器**。与经典数值分析一样，对于微分方程，我们称其为 k 阶积分器

$$\dot{x}(t) = F(x(t))$$



(A) (7) 的流 (B) 泊松积分器 (8)

图 3. 泊松积分器 (8) 产生的偏差

一族微分同胚[2]

$$\phi_h : \mathcal{U} \longrightarrow \mathcal{U},$$

关于实参数 h 平滑依赖，使得该微分方程的精确解与 $\phi_h(x)$ 在 h 的 k 阶内一致，即$\|\phi_h(x) - x(h)\| = o\left(h^k\right)$。与积分器相关的时间步长为 Δt 的数值格式由以下递归序列构成

$$x_0 = x \text{ and } x_{n+1} = \phi_{\Delta t}(x_n).$$

注 2.6. 由于数值格式由其迭代定义，因此在本文中，积分器、数值方法 和 数值格式 这些术语都可以毫无歧义地视为同义词。

现在考虑 $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$ 上的微分方程 (4)，它关于泊松结构 π 和哈密顿量 $H \in C^\infty(\mathcal{U})$ 是哈密顿的。

定义 2.7. 哈密顿微分方程 (4) 的阶为 k 的积分器

$$\phi_h : \mathcal{U} \longrightarrow \mathcal{U},$$

若对于所有有定义的 h，ϕ_h 都是 $(\mathcal{U}, \pi)$ 的泊松微分同胚，则称其为 泊松积分器 [3]。

如例 2.5 中所述，泊松积分器可能具有流：轨迹可能从一个辛叶跳到另一个辛叶，因此会表现出非物理行为。因此，我们给出以下定义。

定义 2.8. (4) 的阶为 k 的泊松积分器

$$\phi_h : \mathcal{U} \longrightarrow \mathcal{U},$$

称为关于 (1) 的 k 阶泊松哈密顿积分器，如果存在一个时变哈密顿函数 $(H_t)_t$，它关于 t 光滑变化，并且与 H 相差至多 k 阶，即 $H_t - H = o\left(h^k\right)$，其积分曲线与曲线 $h \longrightarrow \phi_h(x)$ 重合。

[2]这里有一个微妙之处：我们不能假设对于所有足够小的 h，ϕ_h 都是从 $\mathcal{U}$ 到 $\mathcal{U}$ 的良定义微分同胚；但我们可以假设，对于所有足够小的 h，存在一个开子集 $\mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}$，在该子集上 ϕ_h 是到其像上的微分同胚。[3]更严谨地说，应当表述为 ϕ_h：$\mathcal{U}_h \to \phi_h(\mathcal{U}_h)$ 是一个泊松微分同胚

下面的命题表明，这第二个定义更为严格。

命题 2.9. 泊松哈密顿积分器是泊松积分器。

证明。 只要含时哈密顿微分方程的流定义良好，它就是一个泊松微分同胚。此外，如果 H_t 与H在k阶以内重合，那么它们的哈密顿流也如此。□

注 2.10. 如引言中所述，一般而言，我们不需要在定义 2.8 中明确描述族 (H_t)。此处重要的只是它存在。

3. 泊松流形的双实现

在前几节建立了预备知识和框架之后，我们现在可以探讨本文的核心内容：为一大类泊松结构以及其上的任意哈密顿微分方程构造泊松哈密顿积分器。这一过程中一个重要的“工具”是与泊松结构相关的局部辛群胚概念，该概念源于 [3]。关于这一主题的现代介绍，参见 [4] 。请注意，我们大多不需要完整的群胚结构，只需其单位元的一个邻域；后者可视为更接近 Karasev 的版本 [15]。已有若干作者 [10], [7] （仅举数例）研究并利用辛群胚[4] 构造数值积分器：它们之间的关系将在 [1]中解释。

泊松流形的辛群胚，无论作为一种概念还是作为一个对象，都不易理解或构造。虽然我们多少也沿着同一条路径，但我们的方法不使用李群胚结构（乘积、逆元），而只用源和目标，因此所需的只是我们称为双实现的对象，这样就不必在一般情形下完整定义这一概念。

在下文的前几个小节中，我们将说明，在什么条件下，可以显式构造这种双实现；其存在性已由理论论证保证。接着，我们将说明为什么ϵdH的图能够为微分方程 (4) 提供一个合适的泊松积分器。此外，只需将H 替换为 ϵ 的一个多项式，即可得到任意阶的精度更高的泊松积分器；该多项式的各项可通过简单的递归求得，这一递归用于求解所需阶数的哈密顿-雅可比方程。具体内容将在第 4 节开头展开。修正哈密顿量也通过递归计算。

虽然存在性和估计的依据由复杂的数学定理保证，但对于实现而言，本节内容已经足够，且不要求读者具备高深的微分几何知识；有关详情，我们再次请感兴趣的读者参阅 [1] 。因此，在本节接下来的

[4]粗略地说，流形上的李群胚是李群的一种“高阶”类似物，其中每个元素都与到该基流形的两个映射相关联：源 α 和目标 β。当一个元素的源与另一个元素的目标相匹配时，这两个元素便可复合，而对这些可复合的元素，标准群公理均成立。辛形式与这种复合相容。详情可参见 [30]。

论述中，我们将系统地说明哪些内容可以计算，以及计算精度如何。

3.1. 双实现 I：定义与存在性。 假设给定一个双满射，即以下数据：

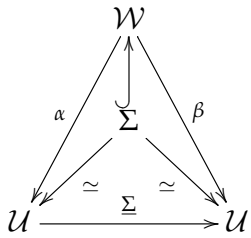
(1) 一个开子集 $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$ ——相空间；(2) 一个包含 $\mathcal{U} \times \{0\}$ 的子集 $\mathcal{W} \subset \mathcal{U} \times \mathbb{R}^n$，

(3) 两个满射浸没，分别称为源 和目标，α、β: $\mathcal{W} \to \mathcal{U}$，使得对所有$x \in \mathcal{U}$

$$\alpha(x,0) = \beta(x,0) = x.$$

我们用 $\mathcal{W} \rightrightarrows \mathcal{U}$ 表示一个双满射。

双满射使我们能够从任意双截面中恢复 $\mathcal{U}$ 的一个微分同胚；也就是说，任意维数为n 的子流形 $\Sigma \subset \mathcal{W}$，其上源 α 和目标 β 的限制均为到 $\mathcal{U}$ 的微分同胚。（有时，我们只要求 α 和 β 是到其像的微分同胚，而这些像是 $\mathcal{U}$ 的开子集。）双满射 $\mathcal{W} \rightrightarrows \mathcal{U}$ 的双截面 Σ 诱导出一个微分同胚 $\underline{\Sigma}$: $\mathcal{U} \longrightarrow \mathcal{U}$，其定义为 $\beta \circ (\alpha_{|\Sigma})^{-1}$:



关键之处在于，如果已明确知道 Σ 和 $\mathcal{W} \rightrightarrows \mathcal{U}$，那么计算 Σ 只需对一个微分同胚求逆。一般而言，这一操作可以通过数值方法以机器精度完成，且代价合理，因此可以轻松计算微分同胚 Σ。我们将构造的离散化是微分同胚族(Σ_h)，它们依赖于一个“小”的实参数h，并与双截面族 Σ_h相关联，使得 $\Sigma_0 = \mathcal{U} \times \{0\}$，因此 Σ_0 是恒等映射。

于是 $\mathcal{W} \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 配备了一个辛结构：

$$\omega_{can} := \sum_{i=1}^{n} dp_i \wedge dx_i \tag{9}$$

其中x_1,……、x_n、p_1,……、p_n 是 $\mathcal{U} \times \mathbb{R}^n$上的自然变量，并按此顺序标记。相应的泊松结构满足：

$$\{x_i, x_j\}_\omega = \{p_i, p_j\}_\omega = 0 \text{ and } \{x_i, p_j\}_\omega = \delta_i^j.$$

现在可以给出主要定义：

定义 3.1（双实现）。设 π 是开子集 $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$上的一个泊松结构。$(\mathcal{U}, \pi)$ 的双实现是一个双满射 $\mathcal{W} \rightrightarrows \mathcal{U}$，其源为$\alpha$、目标为 β，辅助维数与 $\mathcal{U}$的维数相同，并满足以下条件：

(1) α 是泊松映射，(2) β 是反泊松映射，

(3) α 和 β 的纤维彼此辛正交。

在上述三个项目中，$\mathcal{W}$ 均配备了与辛结构 (9) 相关联的泊松括号 $\{\cdot,\cdot\}_\omega$。

注记 3.2。定义 3.1 中的条件 1–3 意味着，对于所有函数F、$G \in C^\infty(\mathcal{U})$：

$$\alpha^*\{F,G\}_\pi = \{\alpha^*F,\alpha^*G\}_\omega, \quad \beta^*\{F,G\}_\pi = -\{\beta^*F,\beta^*G\}_\omega,$$

$$\{\alpha^*F,\beta^*G\}_\omega = 0.$$

为完整起见并供今后参考，我们将引用以下两个结果（不作证明）。

命题 3.3。设 $\mathcal{W} \rightrightarrows \mathcal{U}$ 是一个双实现。对于任意关于(9)为拉格朗日的双截面 $\Sigma \subset \mathcal{W}$，其诱导的微分同胚 $\Sigma\colon\ \mathcal{U} \longrightarrow \mathcal{U}$ 是一个泊松微分同胚。

此外，对于任何形如以下形式的拉格朗日子流形

$$\{(x_1,\dots,x_n,\partial_{x_1}F,\dots,\partial_{x_n}F),(x_1,\dots,x_n)\in\mathcal{U}\}\subset\mathcal{W}$$

对于足够小的光滑函数 $F \in C^\infty(\mathcal{U})$ [5]，这个泊松微分同胚是时变哈密顿向量场的流在时间1 时的取值。

定理 3.4（存在唯一性）：开子集 $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$ 上的任意泊松结构都存在双实现。此外，它在以下意义下是规范的：同一泊松结构之上的两个不同双实现，可通过唯一的辛同胚彼此对应，该辛同胚固定 $\mathcal{U}\times\{0\}$。

3.2. **双实现 II：显式构造**。定理 3.4 表明，双实现确实存在且唯一。下面我们说明如何构造它们。

余切路径。设 (M,π) 是一个泊松流形[6]。从一条取值于 T^*M 的路径 α 出发，可以构造出两条取值于 TM 的路径：

(1) 考虑 $\dot\gamma(t)$ $\gamma = \tau\circ\alpha$，其中 α 的基路径为 τ，它是定义 T^*M 的投影。(2) $\alpha(t) \in T^*_{\gamma(t)}M$，其中 $\pi_{\gamma(t)} \in \wedge^2 T_{\gamma(t)}M$：收缩 $\pi^\#(\alpha)$ 是一条取值于 TM 的路径。

当上方两个取值于TM的路径重合时，我们称该路径为余切路径。

当流形 T^*M 上给定一个仿射联络 ∇ 时，每个 $\xi \in T^*M$ 都是平行余切路径 $t \mapsto \xi(t)$ 的起点，并要求其满足以下附加条件：

$$\nabla_{\dot\gamma(t)}\xi = 0.$$

[5]更确切地说，在某点处导数的 ∞范数必须小于某个局部界。[6]我们的意思是：给定一组 $\mathcal{U}$ 开集，并以一致的方式为其赋予泊松双向量。由于该结果本质上是局部的，可以像之前一样只考虑一个开集；在应用中，我们也只会在一个坐标图中进行工作。

存在 T^*M 中 M 的一个邻域[7] $\mathcal{W}$，使得上述平行余切路径对所有 $t \in [-1,1]$ 都有定义。我们将映射称为测地流：

$$\Xi_{\nabla,\pi} : \xi \in \mathcal{W} \to \xi(t) \in \{\text{Cotangent Paths}\}.$$

*Karasev*构造。设(M,π)是一个泊松结构，其中M是$\mathbb{R}^n$的一个子集，从而T^*M可以与由$m \in M$和 $\xi \in \mathbb{R}^n$组成的对相对应。令 ∇ 为平凡仿射联络。对于每个 $\xi \in \mathbb{R}^n$、Ξ_{∇}、$pi(m,\xi)$ 定义一条路径$m(t)$，其为以下微分方程的解：

$$\dot{m_\xi}(t) = \pi^{\#}_{m_\xi(t)}\xi.$$

对于每个 ξ，考虑开子集$M^{\alpha}_{\xi} \subset M$（分别为$M^{\beta}_{\xi} \subset M$），在这些集合上，该路径$m^{\xi}$对所有$t \in [0,1]$（分别为所有$t \in [-1,0]$）均有定义。

Karasev 的思想是考察以下两个方程，其未知量 α、β 属于M；给定$(m, \xi) \in T^*M$：

$$\int_0^1 \Xi(\alpha,\xi)(t)dt = m \text{ and } \int_{-1}^0 \Xi(\beta,\xi)(t)dt = m.$$

由于对于 $\xi = 0$，唯一解为 $\alpha = \beta = m$，因此存在 M 在T^*M 中的一个邻域 $\mathcal{W}$，在该邻域上前述两个方程有唯一解，从而定义了两个映射 $\mathcal{W} \to M$，分别记为 α和 β。

命题3.5 (Karasev)。三元组$(\mathcal{W},\alpha,\beta)$是泊松结构$(M,\pi)$的一个双实现。

注3.6。只要能够计算测地流Ξ及其积分，这个双实现就是显式的。若测地流可通过求积计算，则该双实现也可通过求积计算；许多泊松结构都满足这一条件。

泊松喷流与 *Moser*技巧。上述构造还可以采用稍微更具学术性（公理化）、因而更具概念性的方式来阐述，即运用泊松喷流这一概念。

定义3.7。设$(M,\ \pi)$为一个泊松流形，$\tau : T^*M \to M$为余切投影；对于 $\lambda \in \mathbb{R}^*$，$m_\lambda : \xi \in T^*M \mapsto \lambda\xi \in T^*M$为由 λ 给出的纤维逐点乘法。若$X \in \mathfrak{X}(T^*M)$ 满足以下两个条件，则称其为泊松喷流：

(1) $\forall \xi \in T^*M$, $\mathrm{d}_\xi \tau.X(\xi) = \pi^{\#}(\xi)$,
(2) X is homogeneous of degree 1: $\forall \lambda \in \mathbb{R}^*$, $\mathrm{m}^*_\lambda X = \lambda X$,
i.e. $\mathrm{d}_{\alpha\xi} m_{\lambda^{-1}}.X(\alpha\xi) = \lambda X(\xi)$.

例 3.8。对于某些坐标选择 x_i，泊松张量具有如下形式

$$\pi(x) = \sum_{1\le i<j\le n} \pi_{ij}(x)\partial_{x_i} \wedge \partial_{x_j}.$$

记 （x、ξ）为诱导的余切坐标，

$$X = \sum_{1\le i<j\le n} \pi_{ij}(x)\xi_j\partial_{x_i}$$

[7]为便于记号起见，我们再次将其记为 $\mathcal{W}$，尽管它是前文所述的这类开集的集合。

这是一个泊松喷流。

其定义的第二点意味着X 在零截面0_{T^*M}上消失。因此，存在M的一个邻域 $\mathcal{W}0_{T^*}$，使得X Φ_X^1的时间一流$U \to \Phi_X^1(U)$ 是一个定义良好的全局微分同胚，且映射到其像上。

注 3.9. 对于给定的泊松结构，泊松喷流总是存在的（参见[5]）。然而，泊松喷流远非唯一。例如，可以在其中添加形如"$f(x)\xi_i\xi_j\partial_{\xi_j}$"的项——这一重要的自由度使得在许多重要情形下可以构造上述流的显式积分。

定理 3.10. 任意泊松喷流都以如下方式诱导出局部辛群胚在 0_{T^*M} 附近的目标、源和乘法形式:

(1) $\bar{\alpha} = \tau\colon\ T^*M \to M$, *(2)* $\bar{\beta} = \tau \circ \Phi_X^1$, *(3)*
$\Omega = \int_0^1 \Phi_X^{s\,*}\omega\, ds$，其中 ω 是典范辛形式。

注意，缩小 $\mathcal{W}$ 后， Ω 是辛的。

定理 3.11。 任意泊松喷流都会诱导一个双实现。

证明。 根据 Moser技巧， ω 和 Ω 在T^*M中零截面的一个邻域内辛同构: $\omega = \psi^*\Omega$。此外， ψ 是$M \subset T^*M$上的恒等映射，因此它在M任意一点处的微分也是如此。于是，在这个邻域上的一个双实现由以下给出: $\alpha = \psi^*\bar{\alpha}$, $\beta = \psi^*\beta$。□

然而，对于一般的泊松结构，泊松喷流及其流 ψ 可能无法显式计算。

3.3. **示例**。 下面我们将使用包括泊松喷流在内的各种技术，为几类泊松结构构造辛双实现。我们首先从由规范（Darboux）坐标中的辛形式给出的最简单泊松结构开始，以得到一些辛积分器。然后继续介绍几个将在数值测试中使用的构造。

辛情形。
设$M = \mathbb{R}^n \stackrel{2}{=} \{(q、p)\}$，则 $\pi = \partial_p \wedge \partial_q$。设$(q、p、\xi_q、\xi_p)$为$R^{4n}$上的余切坐标。泊松喷流为$X(q、p、\xi_q、\xi_p) = \xi_p\partial_q - \xi_q\partial_p$。
定理 3.10 中的对象为:

(1) $\bar{\alpha}\colon T^*M \to M\colon q, p, \xi_q, \xi_p \mapsto (q, p)$,
(2) $\bar{\beta}\colon T^*M \to M\colon q, p, \xi_q, \xi_p \mapsto (q + \xi_p, p - \xi_q)$,
(3) $\Omega = \omega + \frac{1}{2}\mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}\xi_p - \frac{1}{2}\mathrm{d}\xi_q \wedge \mathrm{d}q - \frac{1}{3}\mathrm{d}\xi_q \wedge \mathrm{d}\xi_p$.

Ω 与 ω 之间的辛同胚为

$$\Psi\colon \begin{pmatrix} q \\ p \\ \xi_q \\ \xi_p \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} q - \frac{\xi_p}{2} \\ p + \frac{\xi_q}{2} \\ \xi_q \\ \xi_p \end{pmatrix},$$

由此得到的双实现为

$$\begin{cases} \alpha : (q,p,\xi_q,\xi_p) \mapsto (q-\frac{1}{2}\xi_p, p+\frac{1}{2}\xi_q) \\ \beta : (q,p,\xi_q,\xi_p) \mapsto (q+\frac{1}{2}\xi_p, p-\frac{1}{2}\xi_q) \end{cases}.$$

二次泊松结构。
以下例子对于 Lotka-Volterra 系统十分重要。考虑 $M = \mathbb{R}^n$ 和一个二次泊松结构：

$$\pi = \sum_{1\leq i,j\leq n} a_{ij}x_ix_j\partial_{x_i}\wedge\partial_{x_j} \tag{10}$$

利用 [17] 的（自然）泊松喷流：

$$X = \sum_{1\leq i,j\leq n} a_{ij}x_ix_j\xi_i\partial_{x_j} - \sum_{1\leq i,j\leq n} a_{ij}x_i\xi_i\xi_j\partial_{\xi_j},$$

以及辛同胚：

$$\Psi\colon \begin{pmatrix} x_j \\ p_j \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}\sum_i a_{ij}x_ip_i}x_j \\ e^{\frac{1}{2}\sum_i a_{ij}x_ip_i}p_j \end{pmatrix},$$

可以构造出如下全局双实现：

$$\begin{cases} \alpha : (x,p) \mapsto \left(e^{-\frac{1}{2}\sum_i a_{ij}x_ip_i}.x_j\right)_{j=1,\dots,n} \\ \beta : (x,p) \mapsto \left(e^{\frac{1}{2}\sum_i a_{ij}x_ip_i}.x_j\right)_{j=1,\dots,n} \end{cases}.$$

李代数的对偶：余切提升。
对于李代数对偶上的线性泊松结构，还有另一种构造双实现的方法。

命题 3.12. 设 $\mathfrak{g}$ 是李群 G 的李代数，且 $\varphi\colon G\to\mathfrak{g}$ 是 1_G 上的一个局部微分同胚，在包含单位元 1_G 的开子集 $\mathcal{V}$ 上为双射，并满足：

(1) $\varphi(1_G) = 0$
(2) $T_{1_G}\varphi = Id$。
我们将 φ 的逆元记作 ψ，并记 $\bar{\mathcal{V}} = \varphi(\mathcal{V})$。
于是，$\mathfrak{g}^*$ 上的 *Lie-Poisson* 结构有如下双实现：

$$\begin{cases} \alpha\colon \bar{\mathcal{V}}\times\mathfrak{g}^*\to\mathfrak{g}^* : (\eta,\xi) \mapsto R^*_{\psi(\eta)}\left(T^*_{\psi(\eta)}\varphi\right).\xi \\ \beta\colon \bar{\mathcal{V}}\times\mathfrak{g}^*\to\mathfrak{g}^* : (\eta,\xi) \mapsto L^*_{\psi(\eta)}\left(T^*_{\psi(\eta)}\varphi\right).\xi = Ad^*_{\psi(\eta)}.\alpha(\eta,\xi) \end{cases}.$$

让我们更精确地描述这些源映射和目标映射。它们是所谓的右对数导数和左对数导数¯ ¯的逆元的对偶，其中 ψ。由于 φ 将 $\mathcal{V}\subset G$ 映射到 $\mathcal{V}\subset\mathfrak{g}$，其微分 $T\varphi$ 将 $T\mathcal{V}$ 映射到 $T\mathcal{V}\simeq\mathcal{V}\times\mathfrak{g}$。将此映射与$T\mathcal{V}$与 $\mathcal{V}\times\mathfrak{g}$ 之间的右平凡化和左平凡化复合，并使用微分同胚 ψ，即可得到由 $\eta\in\mathcal{V}$ 索引的¯族 $\mathfrak{g}$的线性可逆自同态。这些源映射和目标映射就是上述这些映射的对偶。[8]

[8]熟悉对数导数概念的读者会注意到，这些映射是在对TG进行右平凡化和左平凡化之后，ψ 的对数导数的对偶的逆元。

备注 3.13。 注意，我们并不假设 φ 是对数映射，即指数映射的逆元。它可以是任意局部微分同胚。事实上，对数映射可能并不是一个好的选择，因为其微分可能过于复杂，难以计算。

注 3.14。 如果可以显式计算 φ 及其逆元，那么 α和 β也可以显式计算。

例 3.15。 我们以反对称矩阵代数$so(n)$为例，详细说明这一构造。标量积 $<.,.>: (X,Y) \in so(n) \mapsto \mathrm{Tr}(X^T.Y) \in \mathbb{R}$ 诱导出$so(n)$ 与其对偶之间的同构。我们使用的局部微分同胚为

$$\varphi\colon SO(n)_+ \to so(n) : Q \mapsto 4\frac{Q-I}{Q+I}$$

其逆元为

$$\psi\colon so(n) \to SO(n)_+ : A \mapsto \frac{4+A}{4-A}.$$

其导数为

$$T_Q\varphi\colon so(n) \to so(n) : H \mapsto 4(I+Q^{-1})^{-1}.H.(I+Q)^{-1}$$

而根据 $<.,.>$，其转置是它的余切提升：

$$\begin{array}{rccc} T^*\varphi\colon & so(n)\times so(n)^* & \to & SO(n)\times so(n) \\ & (H,x) & \mapsto & (\psi(H),(I+\frac{A}{4}).x.(I-\frac{A}{4}). \end{array}$$

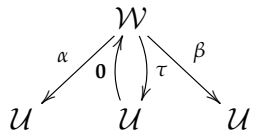
由于度量是 Ad-不变的，$\mathrm{Ad}^*_Q x = Q^{-1}。x。Q$。源和目标为：

$$\begin{cases} \alpha\colon so(n)\times so(n) \to so(n) : (A,x) \mapsto (1+\frac{A}{4}).x.(1-\frac{A}{4}) \\ \beta\colon so(n)\times so(n) \to so(n) : (A,x) \mapsto (1-\frac{A}{4}).x.(1+\frac{A}{4}) \end{cases}.$$

4. 泊松哈密顿积分器的显式构造

现在，我们已准备好汇总前两节中关于泊松几何的所有讨论，并迈出最后一步，构造恰当的保结构积分器。总而言之，我们从定义在开子集 $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$上的泊松结构 π 出发。唯一的假设是，它具有一个显式双实现 $\mathcal{W} \rightrightarrows \mathcal{U}$。

回顾一下， $\mathcal{W}$ 是包含 $\mathcal{U}\times\{0\}$的 $\mathcal{U}\times\mathbb{R}^n$ 的一个开子集。我们将其源记为 α，目标记为 β，底映射记为 τ。我们用$\mathbf{0}: \mathcal{U} \to \mathcal{W}$ 表示映射$\mathbf{0}(x) = (x,0)$。



注 4.1. 回顾一下，对于任意$(x,p) \in \mathcal{W}$、 $\alpha(x,p)$ 以及 $\beta(x,p)$ ，它们都位于 π的同一个辛叶上。此叶与包含 $\tau(x,p) = x$的辛叶不同。

再次考虑哈密顿微分方程

$$\dot{x}(t) = \pi(x(t))(\nabla H(x(t))) \tag{11}$$

对于某个哈密顿量 $H \in C^\infty(\mathcal{U})$。

我们声称，可以为（11）构造一个显式的泊松哈密顿量阶 k 积分。下面将分几个步骤介绍具体过程。

步骤 1。首先，需要计算 *Hamilton- Jacobi transform*的前 k 项，其中 H是定义在 $\mathcal{U}$ 上的光滑函数形式级数，其形式为

$$\mathcal{S}_h(H)(x) = hS_1(x) + \frac{h^2}{2}S_2(x) + \frac{h^3}{6}S_3(x) + \dots,$$

其系数通过以下递归方式计算：

（a）令$S_1(x) = H(x)$。（特别地，对于 $k = 1$，$H(x)$ 的生成变换截断式就是$hH(x)$。）

(b) 光滑函数 $S_{k+1}(x)$ 由以下递归公式给出：

$$S_{i+1}(m) = \left.\frac{d^i}{dt^i}\right|_{t=0} H\left(\alpha\left(d_m S_t^{(i)}\right)\right)$$

其中，我们记 $S^{(i)}{}_t = \sum_{j=1}^{i} t^j j! \underline{S}_j$。

由于双实现被假定为已明确给出，因此这些项也可以显式构造。

步骤2。现在开始构造泊松哈密顿积分器本身。选择一个时间步长，即取一个较小的正实数 h。我们通过构造序列 (x_n)，按照以下递推关系来定义一个数值格式，以近似初始值为 x_0 的方程 (11) 的积分曲线：

(a) 假设对于每个 $n \in \mathbb{N}$，方程

$$\alpha\left(y_n, \sum_{i=1}^{k} h^i \nabla S_i(y_n))\right) = x_n$$

有唯一解 y_n（否则，说明时间步长过大）。

(b) 集合

$$x_{n+1} := \beta\left(y_n, \sum_{i=1}^{k} h^i \nabla S_i(y_n)\right).$$

注 4.2. 步骤 1 中与形式幂级数相关的计算，可以借助计算机代数工具高效完成。步骤 2 中隐式关系的求解采用近似方法（例如不动点技术），但最终可以达到机器精度。

例 4.3. 对于 $k = 1$，该数值格式通过映射 x_n 到$\beta(y_n, h\nabla H(y_n))$，其中 y_n 是 $\alpha(y_n, \nabla H(y_n)) = x_n$ 的唯一解。

例 4.4. 对于李代数 $\mathfrak{g}$ 上的 Lie-Poisson 结构，若其配备局部微分同胚 $\varphi\colon G \to \mathfrak{g}$ 及其逆元 $\psi\colon \mathfrak{g} \to G$，对于$k = 1$，我们的哈密顿泊松积分器由以下步骤构成：

(1) 计算$a \mapsto (\psi(\eta))^{-1} T_\eta \psi(a)^{9}$, , 它是一个依赖于$\eta \in \mathcal{V}$的微分同胚族 $\mathfrak{g} \simeq \mathfrak{g}$。然后考虑其逆元的对偶，这现在是一个映射族$D\eta$: $\mathfrak{g}^* \simeq \mathfrak{g}^*$, 当$\eta = 0$时为恒等映射。接着求解$D_{\Delta t \nabla H(y_n)}(y^n) = x_n$。(2) 考虑

$$x_{n+1} = \mathrm{Ad}^*_{\psi(\Delta t \nabla_{y_n} H)} x_n$$

注 4.5. 根据构造，x_n 和x_{n+1} 属于同一个辛叶。但是，从x_n 到x_{n+1} 的过程需要经过一点y_n ，而该点通常不在这个共同的辛叶上。这极其违背直觉。

注 4.6. 下面给出哈密顿-雅可比变换的前几项:

(1) $S_1 = H$
(2) $S_2 = \mathbf{0}^* \left(\frac{1}{2}\{\alpha^* H, \tau^* S_1\}\right)$
(3) $S_3 = \mathbf{0}^* \left(\frac{1}{3}\{\alpha^* H, \tau^* S_2\} + \frac{1}{6}\{\{\alpha^* H, \tau^* S_1\}, \tau^* S_1\}\right)$
(4) $S_4 = \mathbf{0}^* \left(\frac{1}{4}\{\alpha^* H, \tau^* S_3\} + \frac{1}{3!}\{\{\alpha^* H, \tau^* S_2\}, \tau^* S_1\} + \right.$
$\left. + \frac{1}{4!}\{\{\{\alpha^* H, \tau^* S_1\}, \tau^* S_1\}, \tau^* S_1\}\right)$

上文中， $\mathbf{0}^*$ 表示将 $\mathcal{W}$ 上的函数限制到 $\mathcal{U} \times \{0\}$上，因此将其视为 $\mathcal{U}$上的函数。

定理 4.7. 上述数值格式为哈密顿微分方程(11)定义了一个 k 阶哈密顿泊松积分器。

证明. （见 [1]）下面简要概述该定理的证明，同时说明如何构造时变哈密顿量H_t ，使其在时间h 的流恰好将x_n 映射到x_{n+1} 。

首先，回顾一下我们在第3节中关于集合$Gr(dS) := \{(x, d_x S), x \in \mathcal{U}\}$当 $S \in C^\infty(\mathcal{U})$的两点:

(1) 它是 $\mathcal{U} \times \mathbb{R}^n$ 的一个拉格朗日子集。(2) 如果函数S 的微分足够小，它就是 $\mathcal{W} \rightrightarrows \mathcal{U}$ 的一个双截面[10] 。

因此，正如我们在命题 3.3 中所见，映射 $\beta \circ \alpha^{-1}|_{Gr(dS)}$ 是一个泊松映射。

一个更微妙的结果是，如果函数S 的微分足够小，那么这个泊松态射就是一个时间依赖的哈密顿函数所生成的时间1流。例如，如果S 依赖于参数h，即$S = S_h$ ，其中S_t 是一个时间依赖函数，且$S_0 = 0$，那么这个时间依赖的哈密顿函数由下式给出:

$$\tilde{S}_t(x) := \frac{\partial S_t}{\partial t}(y)$$

其中，y 的选取满足$(y, \nabla S_t(y)) \in Gr(dS_t)$。之后，问题转化为寻找$S_t$ ，使得S_t 在时间h 的流与H 在时间h 的流在变量h上达到k 阶一致，如步骤2所示。□

注 4.8. 在辛情形（即非退化常值泊松结构）下，阶数为 $k = 1$ 时，很容易验证，对于谐振子 $H = {}^{p^2+q_2}{}^{2}$, , 可得到辛中点格式。对于

[9] $(\psi(\eta))^{-1}$ 是G[10]的群运算下(η) 的逆元。也就是说， α 和 β 在 $Gr(dS)$ 上的限制是可逆的。

一般的哈密顿量 H，本文的构造表明，时间步长为 Δt 2 的隐式欧拉格式与时间步长为 Δt 2 的显式欧拉格式复合后，是一个阶数为 1、时间步长为 Δt 的辛积分器。更一般地，对于更高阶情形，所构造的适用于辛结构的泊松哈密顿积分器将是辛积分器，但原则上不同于标准的辛龙格–库塔方法。

注 4.9. 我们在引言中提到过，想要在全局上恢复泊松结构，直觉上可以“限制到叶上，使其在叶上成为辛结构”，但这种做法行不通，因为它几乎从来都不是构造性的。反过来做却确实有效：现在我们已经构造出一个泊松哈密顿积分器，使轨迹保持在正确的叶上，便可以运用后向分析技术（限制在叶上）来进行误差估计。

注 4.10. 回想命题 3.12 中线性泊松结构的情形，双实现的构造相当于计算 G 在 $\mathfrak{g}$ 上的余伴随作用，并构造一个局部微分同胚：$\phi\colon G \to \mathfrak{g}$，其在 1 处的微分为恒等映射。

所得到的一阶哈密顿泊松积分器形式如下：

$$x_{n+1} = \mathrm{Ad}^*_{\phi^{-1}(\Delta t \nabla y_n H)} x_n$$

这当然并不令人意外：任何这样的数值格式都会保持在初始所在的辛叶上。关于点 y_n位于该辛叶之外的情形，同样的评论也适用。

ϕ 的一个显而易见的选择是指数映射的逆元，但对此仍有一定自由度：任何这样的局部微分同胚都可用于计算最高达 k 阶的哈密顿泊松积分器。不过，能够轻松计算其微分和逆元非常重要。

5. 数值测试

在最后这一节中，我们通过几个示例说明泊松哈密顿积分器的优势。

5.1. 刚体。 首先考虑线性泊松结构——刚体绕周期轨道的动力系统可以提供一个很好的示例。

描述该系统的方程为：

$$\dot{x} = -x \wedge J.x,$$

其中：$\wedge$ 表示 $\mathbb{R}^3$中的向量积，而对称正定矩阵J 是该物体的惯性张量。这是关于 $\pi(x) = \begin{pmatrix} 0 & - & \\ & x_3 & 2 \\ 2 & & \\ & 1 & 0 \end{pmatrix} xx_3 \quad 0 \quad -x- \quad {}^{1}xx$的哈密顿微分方程，且 $H(x) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(j(x)^T.J.j(x)\right)$，其中 $j\colon \mathbb{R}^3 \xrightarrow{\sim} so(3)$ 由下式给出：

$$x \longmapsto \begin{pmatrix} 0 & -x_3 & x_2 \\ x_3 & 0 & x_1 \\ -x_2 & -x_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

我们考虑惯性张量 $J = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pi & 0 \\ 0 & 0 & 100 \end{pmatrix}$ 和 $x_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$，其轨迹如图4所示。

数值模拟的时间步长为

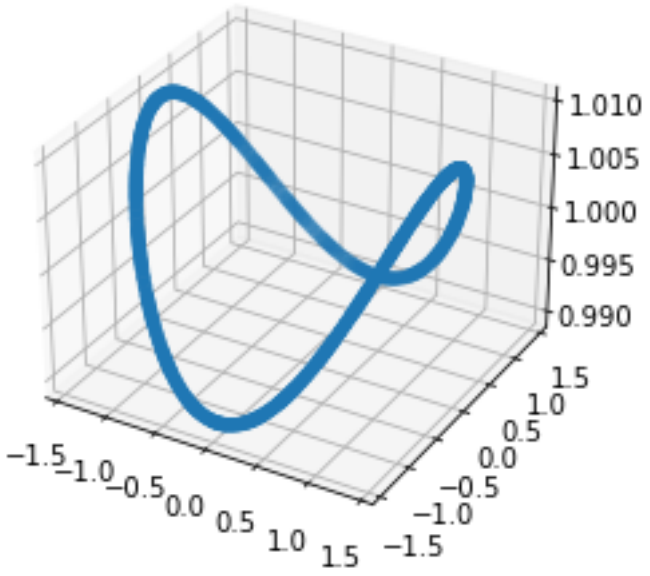
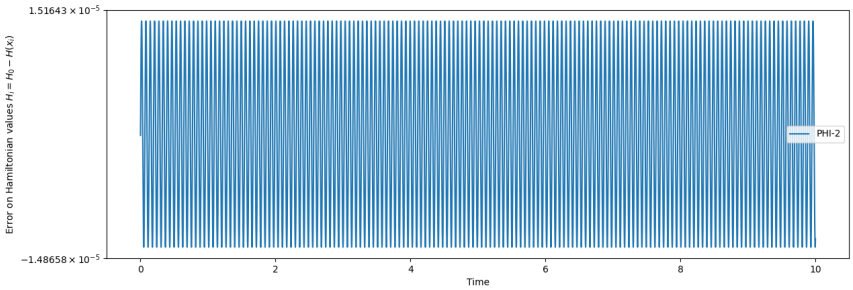


图4。刚体角速度在 $\mathbb{R}^3$中的轨迹。

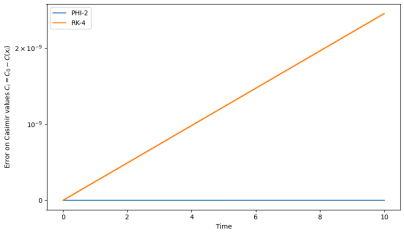
$\Delta t = 10^{-4}$。二阶泊松哈密顿积分器在同时保持卡西米尔量和哈密顿量水平方面，表现远优于四阶龙格-库塔方法（图5）。

细节稍微复杂一些。传统方法的误差随迭代次数线性增长，因此会偏离连续（闭合）轨迹。泊松哈密顿积分器能够以机器精度保持卡西米尔量水平，并围绕某一哈密顿量值振荡，其振幅取决于 Δt^k，其中k 为方法的阶数
我们强调，这一距离并不取决于迭代次数。这体现了辛积分器典型的稳定性现象，该现象已在 [11]中被发现并解释。图5a放大展示了哈密顿量误差。对于泊松哈密顿积分器，理论解释依托于 [1]中引入的泊松结构马格努斯公式。这些现象在轨迹的示意截面中得到展示——见图6。

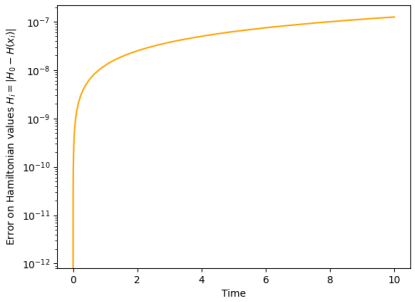
注5.1。卡西米尔量是范数的平方。因此，图5b表明，四阶龙格–库塔法的迭代将在 $\mathbb{R}^3$中收敛至0，而 $\mathbb{R}^3$既是动力系统的不动点，也是全空间叶状结构的奇异叶。这会导致长时间模拟出现病态行为。反过来，这凸显了数值方法保持奇异叶状结构的叶片的重要性，例如泊松结构中出现的这类叶状结构。



（A）PHI-2 的哈密顿量值误差

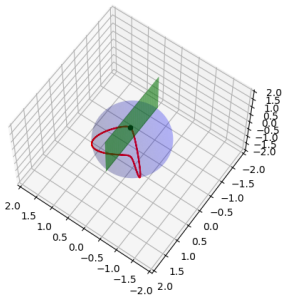


（B）卡西米尔量值误差

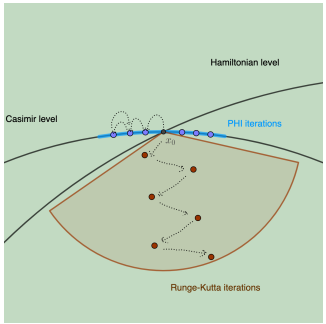


（C）哈密顿量值误差 RK-4

图5. 四阶龙格–库塔法与我们二阶泊松哈密顿积分器在刚体动力学中的比较



（A）轨迹的一个庞加莱截面（绿色平面）



（B）……之间的交点（插值）离散轨迹与庞加莱截面

图6. 两种数值方法在哈密顿量和卡西米尔水平集方面表现差异的示意图

5.2. **洛特卡-沃尔泰拉系统**。 回顾第 1 节中 PHI 和 RK-2 的表现——现在我们有了正确的语言来解释这一现象，尤其是研究该系统的卡西米尔函数。

一般洛特卡-沃尔泰拉系统的泊松结构与公式 (10) 中的二次泊松结构一致，并完全由一个 $n \times n$ 矩阵 A 编码。动力系统由线性哈密顿量 $H = \sum_{i=1}^{n} x_i$ 控制。

命题 5.2。设 $u \in KerA$。

$$\begin{aligned} f\colon \mathbb{R}^n &\to \mathbb{R} \\ x &\mapsto \prod_{1\le i\le n} x_i^{u_i} \end{aligned}$$

是由矩阵 A。给出的二次泊松结构的一个局部卡西米尔函数。

在数值测试中，我们取 $n = 3$，并取 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ so 局部卡西米尔函数为 $C\colon x \mapsto x_1 x_3 \overline{x_2}_{\circ}$ 一般的辛叶是超双曲面，将其与H 的等值面相交，便可得到实轨迹的几何形状（除时间参数化外）。龙格-库塔方法不会保持C，而构造出的泊松哈密顿积分器可以以机器精度保持卡西米尔量，并使哈密顿量的误差达到时间步长的任意给定阶数。显然，只有在这些守恒律得到满足时，才能观察到轨迹的奇异行为。图7展示了第1节所观察到的奇点邻域中泊松哈密顿积分器的稳定性：它不仅保持泊松结构，而且在迭代过程中始终处于同一辛叶上。

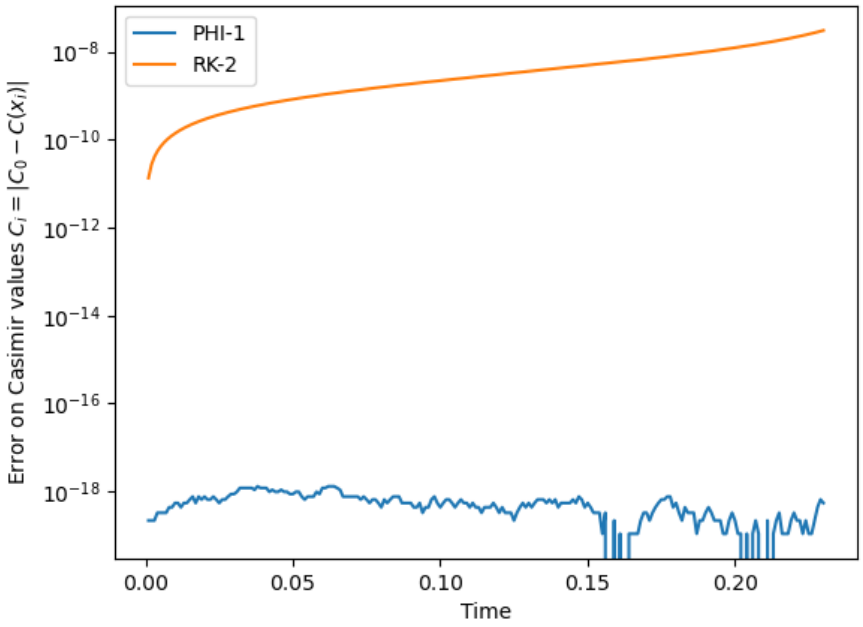


图7. PHI-1 与 RK-2 的 Casimir值比较

结论 / 展望

本文阐述了如何将 [1] 提出的群胚构造思想用于设计泊松积分器。我们再次强调，我们引入的术语泊松哈密顿积分器 十分重要——它阐明了这种方法与文献中直接构造方法在概念上的区别。

我们已经看到，即使对于在简单学术示例中针对一般情形构造的泊松哈密顿积分器，其精度也被证明高于甚至更高阶的经典方法，尤其是在长时间运行的模拟中。不过，对于更复杂的常微分方程系统，也可以不作任何改动地实施类似策略——我们正在开发一个用于自动生成该类模拟源代码的符号软件包（[2]）。此外，甚至可以为泊松哈密顿偏微分方程设计类似的方法，这类方程常出现在流体动力学和波模拟中。这里的关键思想是利用空间离散化的局部性来明确写出群胚结构映射——我们计划在后续工作中进一步探索这一方向。

致谢。 我们感谢几何与力学工作组（拉罗谢尔，M2N团队）以及几何、力学与控制研讨会（ICMAT – IMAULL）的参与者所提出的宝贵意见。最后一节得益于法国国家科学研究中心研究联合体“微分几何与力学”所给予的富有成效的评议。我们感谢 Pol Vanhaecke、Dina Razafindralandy 和 Aziz Hamdouni 在本项工作不同阶段提出的启发性讨论。同时，我们也感谢 Antoine Falaize 协助实现备注4.2中提到的符号计算。

参考文献

[1]O. Cosserat, 《用于泊松积分器的辛群胚》, 《几何与物理学杂志》, 2022年。[2] O. Cosserat、A. Falaize、V. Salnikov, 《高阶泊松数值方法的自动生成》, 准备中。[3] A. Coste、P. Dazord、A. Weinstein, 《辛群胚》, 里昂数学系出版物, 1987年。[4] M. Crainic、R. Fernandes、I. M˘arcu˛t, 《泊松几何讲义》, 美国数学学会。[5] M. Crainic、I. M˘arcu˛t, 《关于辛实现的存在性》, 《辛几何杂志》, 2010年。[6] J.-P. Dufour、N. Tien Zung, 《泊松结构及其标准形》, Birkhäuser出版社, 2005年。[7] S. Ferraro、M. de Leon、J. C. Marrero、D. Martın de Diego、M. Vaquero, 《哈密顿–雅可比方程与生成函数的几何》, 《力学与分析档案》, 2017年。[8] F. Gay-Balmaz、D. D. Holm、V. Putkaradze、T. S. Ratiu, 《树枝化聚合物动力学的精确几何理论》, 《应用数学进展》, 2011年。[9] F. Gay-Balmaz、T. S. Ratiu、C. Tronci, 《液晶动力学的等价理论》, 《力学与分析档案》, 2013年。[10] Z. Ge, 《泊松流形上的生成函数、哈密顿-雅可比方程与辛群胚》, 《印第安纳大学数学杂志》, 1990年。[11] G. Benettin、A. Giorgilli, 《近恒等辛映射的哈密顿插值及其在辛积分算法中的应用》, 《统计物理学杂志》, 1994年。[12] M. Grmela, 《多尺度动力学与热力学的 GENERIC 指南》, 《物理学通讯杂志》, 2018年。[13] E. Hairer、C. Lubich、G. Wanner, 《几何数值积分》, 施普林格计算数学丛书, 2002年。[14] L.O. Jay, 《微分方程数值积分中泊松结构与正交性的保持》, 《计算机与应用数学》, 2004年。[15] M. V. Karasev, 《非线性泊松括号的李群理论对象的类比》, 《苏联数学学报》, 1987年。[16] T. E. Kouloukas、G. R. W. Quispel 和 P. Vanhaecke, 《广义洛特卡–沃尔泰拉系统及其 Kahan 离散化的刘维尔可积性与超可积性》, 《物理学杂志A：数学与理论》, 第49卷, 第22期, 2016年。[17] S. Li 和 D. Rupel, 《簇流形的辛群胚》, 《几何与物理学杂志》, 2018年。[18] C. Liu, 《塑性的李–泊松括号表述及基于李群SO(n)的计算》, 《国际固体与结构杂志》, 2013年。[19] P. Libermann、C.-M. Marle, 《辛几何与分析力学》, Kluwer学术出版社, 1987年。[20] K. Mackenzie, 《微分几何中的李群胚与李代数丛》, 剑桥大学出版社, 1987年。

[21] C.-M. Marle，具有主动约束的机械系统几何，法国科学院报告，1990年。[22] R. I. McLachlan，显式李-泊松积分与欧拉方程，《物理评论快报》，1993年。[23] A. Pichereau、C. Laurent-Gengoux、P. Vanhaecke，泊松结构，施普林格出版社，2012年。[24] D. Razafindralandy、A. Hamdouni，若干几何积分器综述，《工程科学高级建模与仿真》，5:16，2018年。[25] V. Salnikov、A. Hamdouni、D. Loziienko，力学的广义分次几何：全面引言，《复杂系统数学与力学》，第9卷，第1期，2021年。[26] Loup Verlet，经典流体的计算机“实验”。*I.* 伦纳德-琼斯分子的热力学性质，《物理评论》159，98，1967年。[27] V. Volterra，《生命斗争数学理论讲义》，Gauthier-Villars et Cie，1931年。[28]P. Xu，泊松流形的莫里田等价，《数学物理通讯》，1991年。[29] H. Yoshida，高阶辛积分器的构造，《物理快报A》150 (5–7): 262，1990年。[30] A. Cannas da Silva、A. Weinstein，《非交换代数的几何模型》，伯克利数学讲义，10，AMS，1999年 O. COSSERAT：LASIE – 法国国家科学研究中心与拉罗谢尔大学，米歇尔·克雷波大道，17042 拉罗谢尔 CEDEX 1，法国电子邮箱：oscar.cosserat@univ-lr.fr C. LAURENT-GENGOUX：洛林埃利·嘉当研究所（IECL），UMR 7502 – 奥古斯丁·弗雷斯内尔街3号，57000 梅斯科技园，法国电子邮箱：camille.laurent-gengoux@univ-lorraine.fr V. SALNIKOV：LASIE – 法国国家科学研究中心与拉罗谢尔大学，米歇尔·克雷波大道，17042 拉罗谢尔 CEDEX 1，法国电子邮箱：vladimir.salnikov@univ-lr.fr