arXiv:2304.01766v1 [math.NA] 4 Apr 2023

端口哈密顿系统的算子分裂

Andreas Frommer、Michael G¨unther、Bj¨orn
Liljegren-Sailer 和 Nicole Marheineke

摘要 端口哈密顿方法为动力系统提供了一种基于能量的建模方式，其中包含能量守恒部分和能量耗散部分，并通过所谓的端口相互连接。本文采用算子分裂方法，分别处理能量守恒部分和能量耗散部分。这使线性方程求解器能够利用迭代矩阵各自的特殊结构，以及不同右端项所具有的多速率潜力。我们通过耦合多体系统动力学中的测试示例来说明这一方法。

1 引言

算子分裂 [8] 是数值求解常微分方程初值问题的有效工具

$$\dot{x} = f(x,t) = f_1(x,t) + f_2(x,t), \qquad x(t_0) = x_0, \tag{1}$$

使右端项 $f(x,t)$ 能够拆分为两部分 $f_1(x,t)$ 和 $f_2(x,t)$，且两者的行为存在显著差异，例如在刚性、计算成本、动力学等方面。将该系统改写为齐次形式

Andreas Frommer 和 Michael G¨unther Bergische Universität Wuppertal，IMACM，Gaußstraße 20，D-42119 Wuppertal，电子邮件：[frommer,guenther]@uni-wuppertal.de Bj¨orn Liljegren-Sailer 和 Nicole Marheineke 特里尔大学，第四系—数学，Universitätsring 15，D-54296 Trier，电子邮件：[bjoern.sailer,marheineke]@uni-trier.de

$$\begin{pmatrix}\dot{x}\\ \dot{s}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}f(x,s)\\ 1\end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix}f_1(x,s)\\ 1\end{pmatrix}}_{\tilde{f}_1(x,s):=} + \underbrace{\begin{pmatrix}f_2(x,s)\\ 0\end{pmatrix}}_{\tilde{f}_2(x,s):=}, \quad \begin{pmatrix}x(t_0)\\ s(t_0)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}x_0\\ 0\end{pmatrix}, \tag{2}$$

˜ ˜其思想是交替求解分别由 f_1 和 f_2, 驱动的动力系统。

Strang 分裂 [13] 分别以步长 $h/2$、h 和 $h/2$，针对第一个、第二个以及再次第一个分裂右端项求解常微分方程系统，其中初始值由相应的最终值给出，即:

$$\begin{pmatrix}\dot{x}_{1/3}\\ \dot{s}_{1/3}\end{pmatrix} = \tilde{f}_1(x_{1/3}, s_{1/3}), \qquad \begin{pmatrix}x_{1/3}(t_0)\\ s_{1/3}(t_0)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}x_0\\ 0\end{pmatrix}, \tag{3}$$

$$\begin{pmatrix}\dot{x}_{2/3}\\ \dot{s}_{2/3}\end{pmatrix} = \tilde{f}_2(x_{2/3}, s_{2/3}) \qquad \begin{pmatrix}x_{2/3}(t_0)\\ s_{2/3}(t_0)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}x_{1/3}(h/2)\\ h/2\end{pmatrix}, \tag{4}$$

$$\begin{pmatrix}\dot{x}_1\\ \dot{s}_1\end{pmatrix} = \tilde{f}_1(x_1, s_1) \qquad \begin{pmatrix}x_1(t_0)\\ s_1(t_0)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}x_{2/3}(h)\\ h\end{pmatrix}. \tag{5}$$

该数值格式从时间点 t_0 的初始值 x_0 出发，在时间点 t_0+h，为式（1）的精确解$\varphi(h)\circ\begin{pmatrix}x_0^0\\ 0\end{pmatrix}$ 提供二阶数值近似 $x_1(h/2)$。简写为:

$$\begin{pmatrix}x_1(h/2)\\ s_1(h/2)\end{pmatrix} = \varphi_{\tilde{f}_1}(\frac{h}{2})\circ\varphi_{\tilde{f}_2}(h)\circ\varphi_{\tilde{f}_1}(\frac{h}{2})\circ\begin{pmatrix}x_0\\ 0\end{pmatrix} = \varphi(h)\circ\begin{pmatrix}x_0\\ 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\mathcal{O}(h^3)\\ 0\end{pmatrix} \tag{6}$$

其中，$\varphi_{\tilde{f}_1}(h)$ 和 $\varphi_{\tilde{f}_2}(h)$ 分别表示流 ˜f_1 和 ˜f_2, 的解，该解从 t_0 出发，在时间点 t_0+h 求得。

如果采用一致的数值近似格式 $\Phi_{\tilde{f}_1}(h/2)$、$\Phi_{\tilde{f}_2}(h)$ 和 $\Phi_{\tilde{f}_1}(h/2)$，分别以步长 $h/2$、h 和 $h/2$ 求解这三个初值问题（3）至（5），则相应的数值近似为

$$\tilde{\Phi}(h)\circ\begin{pmatrix}x_0\\ 0\end{pmatrix} := \Phi_{\tilde{f}_1}(h/2)\circ\Phi_{\tilde{f}_2}(h)\circ\Phi_{\tilde{f}_1}(h/2)\circ\begin{pmatrix}x_0\\ 0\end{pmatrix}$$

由于该方法具有对称性，因此具有二阶精度。我们将把这一算子分裂思想应用于端口哈密顿常微分方程系统这一特殊情形。

本文结构安排如下：第 2 节简要介绍端口哈密顿常微分方程系统。接下来的章节展示如何将算子分裂方法应用于端口哈密顿系统，其中离散梯度格式是首选方法。第 5 节和第 6 节说明，该方法如何在嵌套积分和线性求解器层面利用多速率行为与系统结构。第 7 节讨论耦合多体系统测试示例的数值结果。最后，我们总结全文并展望未来工作。

2 端口哈密顿常微分方程系统

具有端口哈密顿结构的常微分方程初值问题 [15] 表示为

$$\dot{x} = (J(x) - R(x))\nabla H(x) + B(x)u(t), \tag{7}$$

$$y = B(x)^\top \nabla H(x) \tag{8}$$

具有状态变量 x： $[t_0, t_{end}] \to \mathbb{R}^n$，二阶连续可微的哈密顿量$H$： $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$，$n \times n$ 阶矩阵 $J(x) = -J(x)^\top$ 为反对称矩阵，且$R(x) \geq 0$ 为半正定矩阵；输入信号 u： $[t_0, t_{end}] \to \mathbb{R}^d$，输出$y$： $[t_0, t_{end}] \to \mathbb{R}^d$，以及一个$n \times d$维端口矩阵$B(x)$。

端口哈密顿系统解$x(t)$的一个基本性质是耗散性不等式

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}H(x(t)) &= \nabla H(x(t))^\top \dot{x}(t) = -\nabla H(x(t))^\top R(x(t))\nabla H(x(t)) + y(t)^\top u(t) \\ &\leq y(t)^\top u(t).\end{aligned}$$

这也可以写成积分形式

$$\begin{aligned}H(x(t_0+h)) - H(x(t_0)) &= \\ &= -\int_{t_0}^{t_0+h} \nabla H(x(s))^\top R(x(s))\nabla H(x(s))\,ds + \int_{t_0}^{t_0+h} y(s)^\top u(s)\,ds \\ &\leq \int_{t_0}^{t_0+h} y(s)^\top u(s)\,ds\end{aligned} \tag{9}$$

在没有输入和耗散$R \equiv 0$的情况下，哈密顿量是端口哈密顿常微分方程（7）的一个不变量。

对端口哈密顿系统进行数值求解时，目标不仅是提高效率，还要实现结构保持。我们希望数值格式在离散层面保持耗散性不等式（9）。

3 端口哈密顿系统的算子分裂

将端口哈密顿常微分方程（7）的右端项分解为能量保持部分 $f_1(x,t) := J(x)\nabla H(x)$ 和耗散能量耦合部分$f_2(x,t) := -R(x)\nabla H(x) + B(x)u(t)$，是一种自然的选择。

Strang 分裂近似给出的近似 $z(h)$

$$\begin{pmatrix}\dot{v}\\ \dot{s}_v\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-R(v)\nabla H(v)+B(v)u(s_v)\\ 1\end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix}v(t_0)\\ s_v(t_0)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}x_0\\ 0\end{pmatrix}, \tag{10}$$

$$\begin{pmatrix}\dot{w}\\ \dot{s}_w\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}J(w)\nabla H(w)\\ 0\end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix}w(0)\\ s_w(t_0)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}v(h/2)\\ h/2\end{pmatrix}, \tag{11}$$

$$\begin{pmatrix}\dot{z}\\ \dot{s}_z\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-R(z)\nabla H(z)+B(z)u(s_z)\\ 1\end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix}z(t_0)\\ s_z(t_0)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}w(h)\\ h\end{pmatrix} \tag{12}$$

$$y_z = B(z)^\top \nabla H(z),$$

分别为式 (7) 在时间点 t_0+h 处精确解 $\varphi(h)\circ\begin{pmatrix}x_0\\0\end{pmatrix}$ 的二阶近似 $z(h/2)$ 和输出 y，其初始值为 x_0，对应于 t_0。简写为:

$$\begin{pmatrix}z(h/2)\\ s_z(h/2)\end{pmatrix} = \varphi_{\tilde{f}_1}(\frac{h}{2})\circ\varphi_{\tilde{f}_2}(h)\circ\varphi_{\tilde{f}_1}(\frac{h}{2})\circ\begin{pmatrix}x_0\\0\end{pmatrix} = \varphi(h)\circ\begin{pmatrix}x_0\\0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\mathcal{O}(h^3)\\0\end{pmatrix}$$
$$y_z(h/2) = y(h)+\mathcal{O}(h^3)$$

耗散性不等式在离散层面上精确成立，即

$$\begin{aligned}H(z(h/2))-H(x_0) &= (H(z(h/2))-H(z(0)))+(H(w(h))-H(w(0)))+\\ &\quad +(H(v(h/2))-H(x_0))\\ &\le \int_0^{h/2} y_v(\tau)^\top u(\tau)\,d\tau+\int_0^{h/2} y_z(\tau)^\top u(\tau+h/2)\,d\tau.\end{aligned}$$

4 离散梯度方法

将算子分裂应用于端口哈密顿系统 (7)、(8) 需要满足以下要求:

• (10) 和 (12) 的数值近似在离散层面上具有耗散性，且 $\mathrm{u}\equiv 0$ 为零，即在此情况下有

$$H(v(h/2))\le H(x_0) \qquad \text{and} \qquad H(z(h/2))\le H(w(h))$$

对于所有步长 $h>0$ 均成立。

• 式（11）的数值近似$w(h)$在离散层面上是能量保持的，即

$$H(w(h)) = H(v(h/2))$$

对所有步长$h>0$均成立。

尽管（11）在J 正则时定义了一个辛流，但辛格式仅在二次哈密顿量的情况下保持能量，一般情况下则不然。因此，

此处求解（7）–（8）的首选方法是离散梯度方法 [5], , 其定义如下:

$$\frac{x_1 - x_0}{h} = (\bar{J}(x_0,x_1,h) - \bar{R}(x_0,x_1,h))\bar{\nabla}H(x_0,x_1) + \bar{B}(x_0,x_1,h)\bar{u}(t_0,t_1,h), \quad (13)$$

$$y_1 = \bar{B}(x_0,x_1,h)^\top \bar{\nabla}H(x_0,x_1), \quad (14)$$

¯采用离散梯度 ∇H: $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, 其满足以下两个条件

$$i) \quad \bar{\nabla}H(x,y)^\top (y-x) = H(y) - H(x),$$
$$ii) \quad \bar{\nabla}H(x,x) = \nabla H(x)$$

对所有的 x、y $\in \mathbb{R}^n$, 以及斜对称矩阵 ¯J(x, y, h)、半正定矩阵 ¯R(x, y, h)、矩阵 ¯B(x,y, h) 和 ¯u(t_0,t_1, h), 满足相容性条件 ¯J(x,x, 0) =J(x) ¯R(x, x,0) =R(x) ¯B(x, x,h) =B(x) 以及 ¯u(t_0,t_0, 0) =u(t_0)。

根据构造, 离散梯度法满足耗散不等式 [9] 的离散形式:

$$H(x_1) - H(x_0) = -h\bar{\nabla}H(x_0,x_1,h)^\top \bar{R}(x_0,x_1,h)\bar{\nabla}H(x_0,x_1,h) + hy_1^\top \bar{u}(t_0,t_1,h).$$

需要指出的是, 当R不为零时, 离散梯度方法是隐式的, 且阶数不超过二阶; 而推导总体二阶算子分裂格式时, 一阶方法便已足够。

5 多速率势

一种典型情况是, 能量保持部分会产生高度振荡行为, 因此需要较小的步长; 而耗散部分的动力学可能非常缓慢, 因此可以采用较大的步长。

利用这种多速率行为的一种思路是, 对耗散部分采用低阶（2 阶）数值格式, 因为即使步长较大, 这些格式也足以获得准确结果; 而对能量保持部分采用高精度数值格式, 这样也可以使用较大的步长。

利用右端项不同部分所呈现的这种多速率行为的另一种方法是: 当时间常数比为 $m \in \mathbb{N}$ 时, 将算子分裂与嵌套积分相结合 [11],, 即将步长为h 的步骤 (4) 替换为m 个连续的、步长为h/m的步骤:

$$\dot{w}_1 = J(w_1)\nabla H(w_1), \quad w_1(0) = v(h/2)$$
$$\text{for } i = 2,\dots,m : \dot{w}_i = J(w)\nabla H(w), \qquad w_i(0) = w_{i-1}(h)$$
$$w(h) := w_m(h)$$

推导高阶方法的一种直接方式是采用复合方法。使用基于离散梯度法的算子分裂方法作为

二阶基方案，以三个不同步长复合三个基方案，可以得到四阶数值格式。然而，阶数高于二阶的复合格式要求使用负时间步 [14],，这与 $R \neq 0$ 情况下的离散耗散性条件相矛盾。

在格点量子色动力学中，规范作用量发挥快速且廉价部分的作用，而费米子作用量则是缓慢且昂贵的部分。这个问题可以通过以下思路规避：对慢作用量使用步长为 h 的二阶积分器，并用步长为 $h/(2m)$ 的二阶数值格式执行 m 步来近似快速作用量，则整体多速率格式的误差阶为 $\mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}((\frac{h}{m})^2) + \mathcal{O}(h^4)$。只在最慢层级使用力梯度 [10] 信息，就可以消去阶为 $\mathcal{O}(h^2)$ 的主导误差项。如果两种数值格式的时间尺度之比 m 足够大，那么即使步长 $h \leq \frac{1}{m}$ 相当小，整体误差阶也由阶为 $\mathcal{O}(h^4)$ 的主导误差项决定；也就是说，该格式具有四阶的有效阶数 [12]。这种方法能否应用于端口哈密顿系统框架，仍是一个开放问题。

另一种思路是对能量保持部分采用精度很高的数值格式，这样就可以使用更大的步长。

6 线性求解器

算子分裂还使我们能够利用求解能量保持子系统和耗散子系统时所获得的特殊结构。为简化讨论，我们假设矩阵J，R 和B 为常矩阵，且哈密顿量$H(x) = x^\top Qx$ 为二次型。注意，对于线性系统，离散梯度法等价于隐式中点法。

将标准平均向量场法作为经典的二阶离散梯度法应用后，可得到以下线性系统

$$\frac{x_1 - x_0}{h} = JQ\frac{x_1 + x_0}{2} \Rightarrow \left(I - \frac{h}{2}\tilde{J}\right)\tilde{x}_1 = \left(I + \frac{h}{2}\tilde{J}\right)\tilde{x}_0 \tag{15}$$

对于能量保持部分 (11)，这里我们对$Q^{1/2}$进行了合同变换，其中 $\tilde{x}_1 = Q^{1/2}x1$, $\tilde{x}_0 = Q^{1/2}x_0$ 且 $\tilde{J} = Q^{1/2}JQ^{1/2}$。

通过对矩阵$I - \frac{h}{2}\tilde{J}$ 应用线性求解器，计算 (15) 中 $\tilde{x}_1$ 的近似值，并非一种利用结构特性的做法，因为计算得到的近似值通常无法体现能量保持；至少在出于效率考虑而不追求非常高精度解时是如此。若采用矩阵函数 方法，即考虑

$$\tilde{x}_1 = C(\tilde{J}, \tfrac{h}{2})\tilde{x}_0,$$

其中，$C(\tilde{J}, \frac{h}{2})$ 是 Cayley 变换的矩阵函数求值

$$C(z,a) = \frac{z+a}{z-a},\ z \in \mathbb{C} \setminus \{a\}.$$

现在可以使用 Arnoldi 方法 [4] 来求 $C(\tilde{J}, \hbar 2)$ 作用于向量 $\tilde{x}_0$ 的结果。该方法的每次迭代都需要与$\tilde{J}$进行一次矩阵向量乘法；不同于一般的 Arnoldi 方法，它依赖短递推，这是因为J 是斜厄米矩阵。这种方法具有结构保持性质，因为它生成的所有迭代向量都与 $\tilde{x}_0$ 具有相同的 2-范数。这是因为 Arnoldi 方法将其第k次迭代向量表示为 Cayley 变换作用于一个矩阵的结果，而该矩阵是$\tilde{}$将J 正交投影到第 k个 Krylov 子空间所得的矩阵。

我们可以用类似的方法处理原矩阵J，采用由Q定义的内积，而不是欧几里得内积；参见 [2,3,6]。

对于耗散能量耦合部分 (10)，可得到线性系统

$$\frac{x_1 - x_0}{h/2} = -RQ\frac{x_1 + x_0}{2} + B\frac{u(t_0 + h/2) + u(t_0)}{2} \Rightarrow$$
$$\left(I + \frac{h}{4}\tilde{R}\right)\tilde{x}_1 = \left(I - \frac{h}{4}\tilde{R}\right)\tilde{x}_0 + \tilde{B}\frac{u(t_0 + h/2) + u(t_0)}{2},$$

其中，我们再次通过$Q^{1/2}$ 进行了合同变换，其中 $\tilde{x}_1 = Q^{1/2}x1$, $\tilde{x}_0 = Q^{1/2}x_0$, 且 $\tilde{R} = Q^{1/2}RQ^{1/2}$, $\tilde{B} = Q^{1/2}B$。现在，迭代矩阵$I + \hbar_2\,\tilde{R}$是对称正定的。在耦合情形下，R 将由各个系统的耗散算子组成，我们可以为每个系统使用有针对性的预条件器，从而为组合系统获得特别高效的求解器，即使在较大的时间步长下也是如此。这里不再赘述。

7 数值算例

最后，我们讨论两个数值算例：一个双质量阻尼振子 [1]，用于测试不同的时间积分方法；以及一个单质量弹簧-阻尼器（MSD）链 [7]，该系统取自端口哈密顿基准系统[1]，用于验证矩阵 Arnoldi 方法的结构保持特性。

7.1 双质量阻尼振子

作为验证不同数值时间积分方法的示例，我们考虑两个系统（$i = 1,\ 2$），每个系统都由一个质量块$m_i > 0$组成，该质量块通过无质量弹簧K_i 连接到带阻尼$r_i > 0$的墙壁，而墙壁之间由弹簧K连接，见图 1。

[1] https://algopaul.github.io/PortHamiltonianBenchmarkSystems.jl

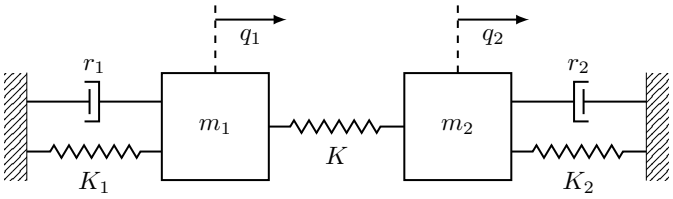


图 1 带阻尼的双质量振子常微分方程。坐标 q_1,q_2 表示质量块的位置，摘自 [1]。

为建立耦合系统，两个系统中的质量块m_1,m_2, 的位置分别为q_1,q_2，动量分别为p_1, p_2；此外，位置$q = q_2$作为两个系统之间的耦合变量。该耦合系统的端口哈密顿描述（耦合由反对称矩阵J的非对角元素描述）为

$$\dot{x} = (J - R)Qx, \qquad x(0) = x_0$$

对于未知量 $x := (q_1, q_1 - q, q_2, p_1, p_2)^\top$，其中

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad R = \mathrm{diag}(0,0,0,r_1,r_2), \quad Q = \mathrm{diag}(K_1.K, K_2, \frac{1}{m_1}, \frac{1}{m_2}),$$

哈密顿量定义为 $H(x) = x^\top Qx$。取 $\tilde{x} := Q^{1/2}x$，可得

$$\dot{\tilde{x}} = (\tilde{J} - \tilde{R})\tilde{x} \tag{16}$$

with

$$\tilde{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{K_1}{m_1}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{K}{m_1}} & -\sqrt{\frac{K}{m_2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{K_2}{m_2}} \\ -\sqrt{\frac{K_1}{m_1}} & -\sqrt{\frac{K}{m_1}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{K}{m_2}} & -\sqrt{\frac{K_2}{m_2}} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad R = \mathrm{diag}\left(0,0,0,\frac{r_1}{m_1},\frac{r_2}{m_2}\right),$$

x_1,x_2 和 x_3 的波形如图 2 所示。

图 3 展示了将不同算子分裂方法应用于双质量振子时的误差图。所有数值格式都呈现出良好的二阶行为，它们的区别仅在于误差常数。尽管二者均为二阶，精确的算子分裂

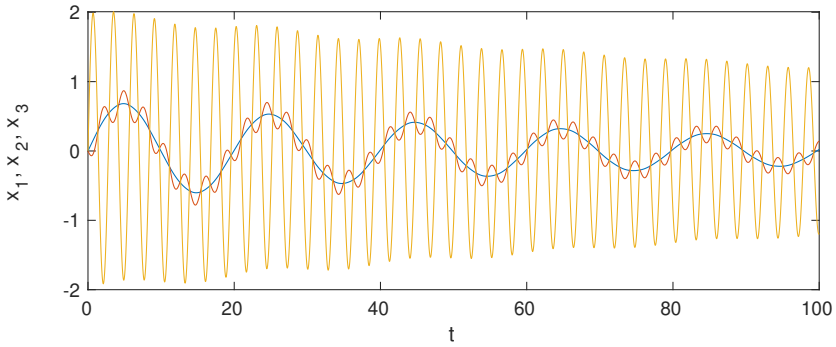


图 2 参数为 x 时前三个分量的精确解$_1$ $=m_2=200$，K $=K_1=10$，$K_2=1000$，$r_1=5$，$r_2=2$

比基于离散梯度方法的算子分裂精确约 10^4 倍。对于多速率方法，情况也相同（较大步长配合高精度数值格式，以及针对能量保持部分采用小时间步长进行嵌套积分）。

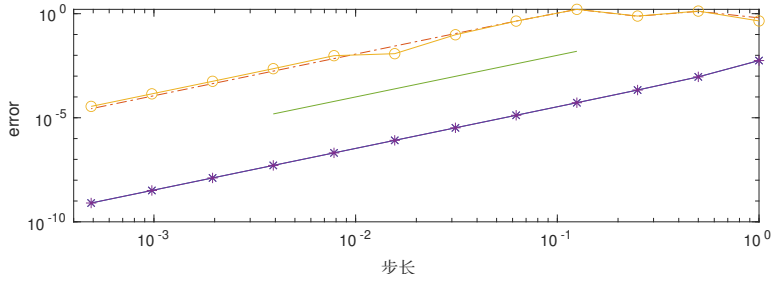


图 3 精确算子分裂解（10）-（12）的最终误差（欧几里得范数）（x）、采用离散梯度法的算子分裂解（13）-（14）（·）、采用嵌套积分的多速率方法（o）以及采用高阶格式的多速率积分（∗）。

7.2 单条质量-弹簧-阻尼器链

为突出系统（15）的矩阵 Arnoldi方法所具有的结构保持特性，我们采用端口哈密顿基准

系统[2]，其输入为零；我们选择尺寸参数，使系统维数达到$N = 10,000$。对于此示例，J 的最大特征值为 $10i$，因此我们选择$h = 0.05 \cdot \frac{1}{10}$ 作为步长，以便充分采样所有频率的周期。结果见图 4

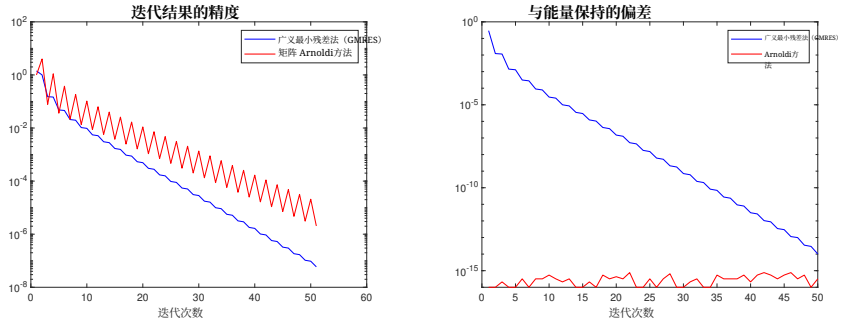


图 4 GMRES 与矩阵 Arnoldi 方法的比较。左：残差的 2-范数随迭代次数的变化。右：$|1 - \|x^{(k)}\|/\|\tilde{}x_0\|\|$ 作为能量保持偏差的度量。

图 4 左侧展示了解方程 (15) 的两种方法的收敛历史。第一种方法直接对矩阵 $I - h_2\,\tilde{}J$使用 GMRES 方法，第二种方法则采用矩阵 Arnoldi 函数方法。我们报告两种方法在迭代值 $x^{(k)}$ 处的残差大小 $(I - h_2\,\tilde{}J)\,x^{(k)} - (I + h_2\,\tilde{}J)\tilde{}x_0$。可以看到，若以残差衡量精度，GMRES 方法比矩阵 Arnoldi 方法快约 25%。两种方法每次迭代都需要进行一次与 J 的矩阵向量乘法，因此计算成本相近。Arnoldi 方法的效果每隔一次迭代就会下降。这可能是因为当 k 为奇数时，投影矩阵无法很好地反映J 的谱关于实轴的对称性。

图 4 右侧显示，矩阵 Arnoldi 方法在能量保持方面表现完美，因为其所有迭代结果的 2-范数与$\tilde{}x_0$,的 2-范数相比，仅相差机器精度。对于广义最小残差法（GMRES）的近似解，早期迭代中能量保持的破坏相当明显，随着迭代推进，这种破坏逐渐减轻。

作为对矩阵 Arnoldi 方法固有结构保持效果的进一步说明，图 5 展示了多速率设置下出现的一种情况，详见第 5 节。现在我们连续进行 20 步数值积分，并在每一步中，当残差大小小于 h^2 时停止对式（15）解的数值近似计算。这一选择是因为积分格式本身的阶数为 2。图中再次以计算所得近似值 $x(t_0 + ih)$，$i = 1, \ldots, 20$ 的 2-范数与初始值的 2-范数之间的相对差异，展示能量保持的质量。我们看到，

[2] https://algopaul.github.io/PortHamiltonianBenchmarkSystems.jl

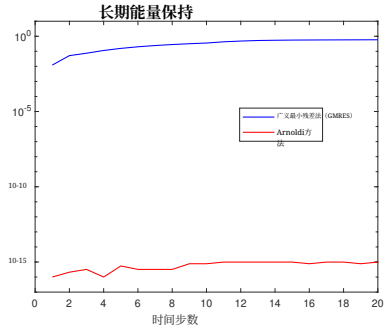


图 5 经过若干个时间步后，能量守恒性能有所退化。我们绘制 $|1 - \|x_i\|/\|\tilde{}x_0\||$，$x_i$ 数值近似$x(t_0 + ih)$，以此衡量能量保持方面的偏差。

广义最小残差法（GMRES）在较晚的时间点出现了非常严重的能量保持违背，而矩阵 Arnoldi 方法再次将能量保持到了机器精度。需要注意的是，我们要求两种方法具有相同的残差精度，这意味着矩阵 Arnoldi 方法所需的矩阵-向量乘积次数比 GMRES 多约 25%。

8 总结

本文讨论了如何在不同层次上使用算子分裂方法，对端口哈密顿系统进行数值模拟，从而获得高效且保结构的方法：基于 Strang 分裂的精确算子分裂、采用离散梯度格式、利用保结构部分与耗散部分分裂中的多速率行为，以及通过矩阵 Arnoldi方法 对相应线性系统进行保结构数值求解。

未来研究中尚待解决的问题包括但不限于：更高阶的数值格式、针对耗散部分的定制线性求解器，以及向端口哈密顿微分-代数方程系统的推广。

参考文献

1. A. BARTEL, M. G ¨UNTHER, B. JACOB, AND T. REIS, 基于算子分裂的线性端口哈密顿系统动态迭代, arXiv:2302.01195, (2022). 2. P. CONCUS AND G. H. GOLUB, 非对称线性方程组的广义共轭梯度法. Comput. Meth. appl. Sci. Eng., 第 2 届国际研讨会，凡尔赛，1975，Lect. Notes Econ. math. Syst. 134, 56-65 (1976)., 1976。

3. M. DIAB, A. FROMMER, AND K. KAHL, 一种灵活的短递推 *Krylov* 子空间方法, 适用于时间积分端口哈密顿系统以及具有耗散哈密顿量的常微分方程/微分代数方程中产生的矩阵, arXiv:2205.13842, (2022). 4. A. FROMMER AND V. SIMONCINI, 矩阵函数, 收录于《模型降阶：理论、研究方面与应用》，W. H. A. Schilders、H. A. van der Vorst 和 J. Rommes 编，Mathematics in Industry，Springer，海德堡，2008，pp. 275–304。5. O. GONZALEZ, 时间积分与离散哈密顿系统, J. Nonlinear Sci., 6 (1996), pp. 449–467. 6. C. G ¨UD ¨UC¨U, J. LIESEN, V. MEHRMANN, AND D. B. SZYLD, 耗散哈密顿微分代数方程中产生的非厄米正（半）定线性代数系统, SIAM J. Sci. Comput., 44 (2022), pp. a2871–a2894. 7. S. GUGERCIN, R. V. POLYUGA, C. BEATTIE, AND A. VAN DER SCHAFT, 用于端口哈密顿系统模型降阶的保结构切向插值, Automatica J. IFAC, 48 (2012), pp. 1963–1974. 8. R. I. MCLACHLAN AND G. R. W. QUISPEL, 分裂方法, Acta Numerica, 11 (2002), p. 341–434. 9. R. I. MCLACHLAN, G. R. W. QUISPEL, AND N. ROBIDOUX, 利用离散梯度进行几何积分, Philos. Trans. R. Soc. Lond., B, Biol. Sci., 357 (1999), pp. 1021–1045. 10. I. OMELYAN, I. MRYGLOD, AND R. FOLK, 辛解析可积分解算法：分类、推导及其在分子动力学、量子力学和天体力学模拟中的应用, Computer Physics Communications, 151 (2003), pp. 272–314. 11. J. SEXTON AND D. WEINGARTEN, 混合蒙特卡罗算法的哈密顿演化, Nuclear Physics B, 380 (1992), pp. 665–677. 12. D. SHCHERBAKOV, M. EHRHARDT, J. FINKENRATH, M. G¨ UNTHER, F. KNECHTLI, AND M. PEARDON, 改进的嵌套力梯度积分器：施温格模型案例, Communications in Computational Physics, 21 (2017), p. 1141–1153. 13. G. STRANG, 差分格式的构造与比较, SIAM Journal on Numerical Analysis, 5 (1968), pp. 506–517. 14. M. SUZUKI, 分形路径积分的一般理论及其在多体理论和统计物理中的应用, Journal of Mathematical Physics, 32 (1991), pp. 400–407. 15. A. VAN DER SCHAFT, 端口哈密顿系统：入门综述, 收录于《国际数学家大会论文集》第 III 卷，M. Sanz-Sole、J. Soria、J. Varona 和 J. Verdera 编，增刊 2，European Mathematical Society Publishing House (EMS Ph)，2006，pp. 1339–1365。null；会议日期：22-08-2006 至 30-08-2006。