有限时间Lyapunov指数的高精度计算新方法*

曹小群[1)2)†] 宋君强[1)2)] 任开军[1)] 冷洪泽[1)] 银福康[1)]

1) (国防科学技术大学计算机学院, 长沙 410073)

2) (国防科学技术大学, 计算机学院并行与分布处理重点实验室, 长沙 410073)

(2014 年 2 月 13 日收到; 2014 年 5 月 16 日收到修改稿)

针对目前有限时间Lyapunov指数(FTLE)计算方法准确度不高和无法获得边界值的问题, 基于对偶数理论提出了一种新的高精度计算方法. 首先描述了基于有限空间差分方法计算FTLE 的缺点和问题; 其次介绍了基于对偶数理论的高精度导数计算方法及其显著优点, 并将动力系统的柯西-格林形变张量计算问题转化为对偶数空间中非线性微分方程数值求解问题; 最后对单摆和非线性Duffing振子两个典型物理动力系统进行了数值实验. 结果表明: 基于对偶数理论的新方法能有效、方便和高精度地计算出有限时间Lyapunov指数场, 并成功识别出所包含的拉格朗日相关结构.

关键词: 有限时间Lyapunov指数, 对偶数, 动力系统, 拉格朗日相关结构

PACS: 05.45.–a, 47.10.Fg, 47.27.De, 11.25.Tq, 45.20.Jj **DOI:** 10.7498/aps.63.180504

1 引 言

Lyapunov指数是定量描述混沌现象的一个重要物理量, 揭示了非线性动力系统在相空间中相邻轨道之间收敛或发散的平均指数值[1−3]. 如果一个系统的最大Lyapunov 指数大于零, 则相空间中初始距离无限小的两条轨迹将随时间不断分离, 两者的间距将呈指数增长, 即呈现混沌现象[1−3]. 针对常用Lyapunov指数的缺点, Chen等[4] 以及Ding和Li[5] 提出了非线性局部Lyapunov 指数(NLLE), 它反映了非线性误差的平均增长率, 可用来估计系统的可预报期限. 为了度量系统状态对初始值的敏感性, Lorenz[6] 首次提出了有限时间Lyapunov指数(FTLE)的概念, 并应用到简单大气模型的研究中, FTLE是经典Lyapunov指数的一种变形. 在Haller[7,8] 提出将拉格朗日相关结构(LCS)定义为有限时间Lyapunov指数场的脊线后, 许多学者将FTLE引入到非线性动力系统和流体动力学研究中, 利用流场计算流体质点的FTLE 场来识别流体结构, 并应用到众多科学领域中[9−24]. Shadden等[17−19] 证明了正向和逆向时间FTLE最大值脊线可以用于确定射流启动涡环的边界, 而且能清楚地刻画流体被卷吸到涡环的过程. 潘翀等[20] 利用时间连续二维粒子成像测速(PIV)技术测量充分发展的湍流边界层, 通过FTLE方法对测量的平面速度场分析后揭示出湍流边界层中的典型LCS是广义马蹄涡结构. 杨岸龙等[21] 利用PIV技术测量了圆盘启动涡环流场的速度和涡量分布, 在计算出涡环流场的FTLE和LCS后, 分析了涡环形成过程中流体的输运和非定常边界. 雷鹏飞等[22] 从Lagrangian角度数值分析了圆柱瞬时起动过程中的非定常瞬态流动现象, 通过所提取的LCS研究了流动分离和旋涡演化过程中的物质输运作用. 近年来, Gawlik等[23] 将FTLE引入到天文动力学的研究中, 估计出一些非线性动力系统的LCS. 祁瑞和徐世杰[24] 利用FTLE定义的LCS, 研究了椭圆限制性三体问题中的时间周期不变流形的性质. Ali和Shah[25] 将FTLE应用到监控视频和图像群体运动的分割中, 把群体目标作为流动粒子群后计算出

* 国家自然科学基金 (批准号: 41475094, 41105063, 41375105) 和高分青年创新基金项目 (批准号: GFZX04060103-5-19) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: caoxiaoqun@nudt.edu.cn

FTLE场, 然后利用识别的LCS把人群运动流场分割成不同区域和检测其动态特性变化.

总之, 基于FTLE的LCS识别方法已经广泛应用于大气环流[10,11]、生物运动[12]、环境污染扩散[13,16]、湍流[14,15,20]、洋流运动[16,19]、非线性动力系统分析[17,22,23]和图像分割[24]等方面的科学研究和工程应用中. 但是, 较好地利用该方法的一个前提条件是能高精度地计算出FTLE场. 目前计算FTLE的常用数值方法是有限空间差分法, 而差分方法只是空间微分的一种近似. 因为存在截断误差, 所以在数值模拟数据或实验测量分辨率不高的情况下计算精度较低. 为了使空间差分方法达到一定的精度, 必须要求数值模拟网格距足够小或测量点足够密. 一方面在利用观测数据计算FTLE时, 受实际条件的限制不可能获得高密度的观测数据, 例如, 大气和海洋运动矢量观测在有些区域是稀少的, 而且分布非常不规则. 因为观测数据是散乱分布的, 所以不适合利用有限空间差分方法计算FTLE, 甚至在观测点附近如果不存在其他观测数据就无法计算出FTLE. 另一方面, 因为在计算FTLE的过程中对每个格点都需要在时间域上数值求解一个常微分方程, 所以随着数值模拟网格分辨率增加, 二维/三维FTLE场的计算代价将呈几何级数增长. 最后, 空间差分方法所固有的一个缺点是无法计算区域边界上的FTLE值[10]. 针对上述有限空间差分方法计算FTLE中的问题, 本文提出了一种基于对偶数理论[26,27]的FTLE高精度数值计算新方法, 主要思想是将空间导数的计算过程转化为对偶数空间中常微分方程数值求解过程, 然后形成柯西-格林形变张量, 从而准确地计算出F-TLE数值. 通过对单摆和强迫Duffing振子两个非线性动力系统的数值模拟实验, 结果表明新方法能有效、方便和高精度地计算有限时间Lyapunov指数场, 并成功识别出所包含的拉格朗日相关结构.

2 问题描述

非线性动力系统或流体粒子运动学方程的一般表示形式为

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{x}}(t) &= \boldsymbol{V}(\boldsymbol{x}(t), t),\\ \boldsymbol{x}|_{t=t_0} &= \boldsymbol{x}_0,\end{aligned}\tag{1}$$

其中t表示时间, $\boldsymbol{x}$代表系统质心或流体粒子的空间位置, $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{x}, t)$ 是定义在有限空间区域上与时间相关的速度矢量场. 方程(1)描述的动力系统的解可以视作一个流形映射$\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})$, 表示粒子轨迹从时刻$t_0$的初始位置$\boldsymbol{x}_0$一直运动到$t_0+T$时刻的位置$\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})$[7,8]. Lyapunov指数表示初始无穷接近的粒子在无限大时间上的分离性. 因为在实际问题中时间域不可能无限, 所以引入有限时间Lyapunov指数$\sigma_{t_0}^T(\boldsymbol{x})$来表示相邻粒子之间的混合度或分离性. 如果将FTLE运用到流体计算中, 它表征的是在t_0到t_0+T时间段里$\boldsymbol{x}$处的流体质点和周围流体质点运动轨迹之间的平均分离程度. 有限时间Lyapunov指数计算公式[7,8]定义如下:

$$\sigma_{t_0}^T(x) = \frac{1}{|T|}\ln\sqrt{\lambda_{\max}(\boldsymbol{\Delta})},\tag{2}$$

式中$\lambda_{\max}(\boldsymbol{\Delta})$表示对称矩阵$\boldsymbol{\Delta}$的最大特征值. 而柯西-格林形变张量$\boldsymbol{\Delta}$的定义如下[7,8]:

$$\boldsymbol{\Delta} = \left(\frac{\mathrm{d}\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}\right)^* \times \frac{\mathrm{d}\phi_{t_0}^T(x)}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}},\tag{3}$$

式中$\dfrac{\mathrm{d}\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}$是流形映射的空间梯度张量, $(\ )^*$表示矩阵转置. 若FTLE的值$\sigma_{t_0}^T \leqslant 0$, 则表示相邻点最终靠拢为一点, 对应于不动点和周期运动; 若$\sigma_{t_0}^T > 0$, 则表示相邻点最终将分离, 对应于轨迹的局部不稳定性, 如果同时还存在整体的稳定因素, 则在此作用下轨迹反复折叠形成混沌吸引子[7,8]. 另外, 在(2)式中末端时间T既可为正数也可为负数. 如果$T>0$, 记为"正向时间Lyapunov指数场", $\sigma_{t_0}^T$的数值越大, 表明流体质点分离或排斥程度越大; 反之, 如果$T<0$, 记为"逆向时间Lyapunov指数场", $\sigma_{t_0}^T$的数值越大, 表明流体质点汇聚或吸引程度越大[24]. 如果设置一定的阈值, 就可以提取出由FTLE场中极值构成的脊线, 一般把带有脊线Lyapunov特征的流场结构称为LCS[7,8,20−23]. 正向时间LCS对应于有限时间稳定流形, 逆向时间LCS对应于有限时间不稳定流形[22−24].

在目前的理论研究和实际应用计算中几乎都使用有限空间差分方法对(3)式中的梯度公式进行离散[8−25]. 为了讨论问题的方便, 这里暂时只考虑二维空间运动的情形. 如果t_0时刻坐标为$\boldsymbol{x}_{i,j}(t_0) = (x_{i,j}(t_0), y_{i,j}(t_0))$的流体粒子, 经过$T$时间后运动到位置$\boldsymbol{x}_{i,j}(T) = (x_{i,j}(T), y_{i,j}(T))$, 则该流体粒子运动轨迹的空间导数矩阵采用差分方法离散后可近似表示为[7,8,20−23]

$$\left.\frac{\mathrm{d}\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}\right|_{x_{i,j}}=\begin{pmatrix}\dfrac{x_{i+1,j}(T)-x_{i-1,j}(T)}{x_{i+1,j}(t_0)-x_{i-1,j}(t_0)} & \dfrac{x_{i,j+1}(T)-x_{i,j-1}(T)}{y_{i,j+1}(t_0)-y_{i,j-1}(t_0)}\\ \dfrac{y_{i+1,j}(T)-y_{i-1,j}(T)}{x_{i+1,j}(t_0)-x_{i-1,j}(t_0)} & \dfrac{y_{i,j+1}(T)-y_{i,j-1}(T)}{y_{i,j+1}(t_0)-y_{i,j-1}(t_0)}\end{pmatrix}, \tag{4}$$

其中(i,j)分别表示二维空间离散网格点编号, 每个终端位置矢量$\boldsymbol{x}_{i,j}(T)$的确定都需要采用一定的差分格式逐点求解常微分方程(1). 相应地, (2)式和(3)式经过离散以后可以写为

$$\sigma_{t_0}^T(\boldsymbol{x}_{i,j})=\frac{1}{|T|}\ln\sqrt{\lambda_{\max}(\boldsymbol{\Delta}_{i,j})}, \tag{5}$$

$$\boldsymbol{\Delta}_{i,j}=\left(\left.\frac{\mathrm{d}\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}\right|_{x_{i,j}}\right)^*\times\left.\frac{\mathrm{d}\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}\right|_{x_{i,j}}. \tag{6}$$

利用(5)式和(6)式对t_0时刻排列整齐的流体粒子逐个分别计算FTLE值, 就获得了FTLE场[7,8,20–23]. 分析上面FTLE的计算过程易知存在两个主要误差源: 首先数值求解常微分方程(1)时会引入误差, 随着数值积分时间长度T的增加而增长; 其次利用有限空间差分方法计算轨迹空间导数时会引入截断误差. 前者很难避免, 且当积分时间T较短时引入的误差较小; 后者在空间差分步长较大时误差显著, 因此空间梯度张量$\dfrac{\mathrm{d}\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}$的计算方法对FTLE值准确度影响较大. 基于有限差分的FTLE计算方法虽然直观且容易执行, 适合数值模拟生成的规则格点数据; 但不适合从散乱分布的大气风矢量和海洋流运动等实际观测数据中导出FTLE. 另外还存在如下缺点: 数据分辨率低时准确度不高、无法获得有限区域边界上的FTLE值[10]等. 本文提出用基于对偶数理论的新方法取代常用的有限空间差分法, 以准确计算空间梯度张量, 目标是克服上述缺点后实现FTLE场的精确计算.

3 基于对偶数理论的FTLE计算

3.1 对偶数的定义

首先介绍一下对偶数的定义和基本性质. 对偶数最早由Clifford[26]提出, 并由Study[27]进一步拓展. 其定义如下:

$$\hat{a}=a+\varepsilon a', \tag{7}$$

其中a和a'均为实数, 分别称为基本部分和对偶部分. 对偶标记ε不表示任何具体数值, 而且具有性质$\varepsilon\neq 0$和$\varepsilon^n=0$ ($n>1$, 即ε对所有大于1的幂运算都为零)[28,29]. 为了表示方便, (7)式可改写成二元对形式$\hat{a}=\langle a,a'\rangle$. 两个对偶数相等的条件是实部与对偶部分别相等; 零对偶数要求实部与对偶部都为0. 对偶数的模定义为$|\hat{a}|=a$, 其既可以为正数, 也可以为负数; 对偶数$\hat{a}$的共扼数为$\hat{a}^*=a-\varepsilon a'$, 因此有$\hat{a}\hat{a}^*=a^2$. 如果将$a$和$a'$都扩展为向量, 则相应地可以将对偶数$\hat{a}$扩展为对偶向量. 虽然对偶数概念及其理论的提出已有一百多年历史, 但直到20世纪80年代, 对偶数才被应用于机器人运动学、捷联式惯性导航和空间结构等多个领域的运动学和动力学问题中[30,31]. 近年来, 对偶数为高效和精确计算复杂问题的导数信息开辟了一条新途径[32,33].

3.2 对偶数运算法则

利用对偶数的性质, 可以将实数域中的代数运算法则扩展到对偶数空间中. 首先考虑任意两个对偶数$\langle x,x'\rangle$和$\langle y,y'\rangle$的加减法和乘法, 显然有

$$\begin{aligned}&(x+x'\varepsilon)\pm(y+y'\varepsilon)\\&=(x\pm y)+(x'\pm y')\varepsilon,\end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned}&(x+x'\varepsilon)\times(y+y'\varepsilon)\\&=xy+xy'\varepsilon+yx'\varepsilon+x'y'\varepsilon^2\\&=xy+(xy'+yx')\varepsilon.\end{aligned} \tag{9}$$

在(9)式中$x'y'\varepsilon^2$项被略去不是因为x'和y'太小, 而是因为ε的二次幂运算为零[33], 所以(9)式是严格相等的, 不存在截断误差. 同理, 下面所有关于对偶数的运算法则都是严格正确的, 不存在任何近似和假设. 接着考虑对偶数的多项式运算, 首先给出实数域空间中的多项式表达式

$$P(x)=p_0+p_1x+p_2x^2+\cdots+p_nx^n, \tag{10}$$

其中多项式系数$p_0,p_1,p_2,\cdots,p_n$均为实数值. 将对偶数$\langle x,x'\rangle$代替实数x代入(10)式后, 利用对偶数加法和乘法法则(8)和(9)式, 则容易证明:

$$\begin{aligned}&P(x+x'\varepsilon)\\&=p_0+p_1(x+x'\varepsilon)+p_2(x+x'\varepsilon)^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&+\cdots+p_n(x+x'\varepsilon)^n\\&=p_0+p_1x+p_2x^2+\cdots+p_nx^n+p_1x'\varepsilon\\&\quad+2p_2xx'\varepsilon+\cdots+np_nx^{n-1}x'\varepsilon\\&=P(x)+P^{(1)}(x)x'\varepsilon\\&=\langle P(x),P^{(1)}(x)x'\rangle,\end{aligned}\tag{11}$$

其中 $P^{(1)}$ 表示实数多项式 $P(x)$ 关于实变量 x 的一阶导数; 而 x' 是种子数, 可以取任意值. 显然如果取 $x'=1$, 则对偶部分就是多项式函数 $P(x)$ 一阶导数 $\mathrm{d}P(x)/\mathrm{d}x$ 的精确值. 进一步, 利用多项式运算法则 (11) 式可以很容易地将对偶数运算扩展到常用解析函数和复合函数上, 从而获得基本代数运算和常用标准函数在对偶数空间中的新运算法则, 不完全地罗列如下 [33]:

$\langle x,x'\rangle/\langle y,y'\rangle=\langle x/y,(x'y-xy')/y^2\rangle\quad(y\neq0)$,
$\sin\langle x,x'\rangle=\langle\sin(x),x'\cos(x)\rangle$,
$\cos\langle x,x'\rangle=\langle\cos(x),-x'\sin(x)\rangle$,
$\mathrm{asin}\ \langle x,x'\rangle=\langle\mathrm{asin}(x),x'/\sqrt{1-x^2}\rangle\quad(x\neq\pm1)$,
$\mathrm{acos}\langle x,x'\rangle=\langle\mathrm{acos}(x),-x'/\sqrt{1-x^2}\rangle\quad(x\neq\pm1)$,
$\sinh\langle x,x'\rangle=\langle\sinh(x),x'\cosh(x)\rangle$,
$\cosh\langle x,x'\rangle=\langle\cosh(x),x'\sinh(x)\rangle$,
$|\langle x,x'\rangle|=\langle|x|,x'\mathrm{sign}x\rangle\quad(x\neq0)$,
$\langle x,x'\rangle^k=\langle x^k,kx^{k-1}x'\rangle\quad(x\neq0)$,
$\exp\langle x,x'\rangle=\langle\exp(x),x'\exp(x)\rangle$,
$\log\langle x,x'\rangle=\langle\log(x),x'/x\rangle\quad(x>0)$.

并且对于一般的双变量基本函数 f 有:

$$\begin{aligned}&f(\langle x,x'\rangle,\langle y,y'\rangle)\\&=\langle f(x,y),f_x(x,y)x'+f_y(x,y)y'\rangle,\end{aligned}\tag{12}$$

(12) 式中 f_x 和 f_y 是函数 f 分别关于自变量 x 和 y 的导数. (12) 式可以进一步扩展到自变量为对偶数向量 $\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{x}+\varepsilon\boldsymbol{x}'$ 的情形:

$$f(\boldsymbol{x}+\varepsilon\boldsymbol{x}')=\langle f(\boldsymbol{x}),\nabla f(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{x}'\rangle,\tag{13}$$

(13) 式中 $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{x}'\in\boldsymbol{R}^n$ 都是 n 维矢量. 当上述对偶数基本算术运算和函数作用于混合自变量时, 例如对偶数 $\langle x,x'\rangle$ 和实数 c, 首先需要将实数 c 改写成对偶数 $\langle c,0\rangle$, 然后依据上面的对偶数运算法则进行计算. 具有任意复杂度的函数 $f(x)$ 在 x_0 点上的导数可以通过使用上面的对偶数算法在 $\langle x_0,1\rangle$ 处直接计算 $f(\langle x_0,1\rangle)$ 而获得, 结果是 $\langle f(x_0),f'(x_0)\rangle$; 同理自变量为向量 $\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n$ 的函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}_0$ 点处方向 $\boldsymbol{x}'\in\boldsymbol{R}^n$ 上的方向导数可以在对偶数空间中直接计算函数 $f(\langle x_0,x'\rangle)$ 的值而获得, 结果是 $\langle f(\boldsymbol{x}_0),\nabla f(\boldsymbol{x}_0)\cdot\boldsymbol{x}'\rangle$.

综上所述, 基于对偶数理论, 实数空间中的复杂导数计算问题可以转化为对偶数空间中的函数直接计算过程. 在实数空间中利用有限差分方法计算函数关于多元自变量的导数值时, 需要对函数中每个输入量分别进行扰动, 然后利用扰动和未扰动函数值代入差分公式计算导数值. 如果扰动步长太大时, 则存在较大的截断误差; 而扰动步长太小时, 又会引入减消误差. 而在对偶数空间中, 直接计算函数值的同时可以获得函数关于自变量的导数值, 因为避免了差分运算, 所以不会引入截断误差和减消误差, 在计算机上实现时可以达到机器精度 [33].

3.3 FTLE的新数值算法

常微分方程 (1) 的解可以用流形映射 $\boldsymbol{x}(t_0+T)=\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x}_0)$ 表示, 对于每个不同初始点 $\boldsymbol{x}_0=(x_0,y_0)$ 可以惟一地确定时间终端位置向量 $\boldsymbol{x}(t_0+T)=(x_T,y_T)$ 的值. 流形映射 $\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x}_0)$ 在本质上与函数 $f(\boldsymbol{x})$ 是完全相同的, 惟一特殊之处在于 $\boldsymbol{x}(t_0+T)$ 与 $\boldsymbol{x}_0$ 之间是通过常微分方程组 (1) 相联系. 显然, 如果是在对偶数空间中数值求解常微分方程 (1), 则由上面的叙述可知: 在获得 $\boldsymbol{x}_0$ 点处的流形映射函数 $\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})$ 值的同时, 还能够高精度地计算出 $\boldsymbol{x}_0$ 点处空间梯度张量 $\dfrac{\mathrm{d}\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}$ 的值; 然后将空间梯度张量 $\dfrac{\mathrm{d}\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}$ 值代入 (5) 和 (6) 式, 就可以计算出 $\boldsymbol{x}_0$ 点的有限时间Lyapunov指数值. 本文将这种新方法称为基于对偶数理论的FTLE计算方法. 针对所分析空间区域中每个离散格点的坐标 $\boldsymbol{x}_{i,j}(t_0)$, 采用上述新方法可以逐点计算出FTLE值, 最终形成FTLE场. 新方法和有限差分方法在计算上存在明显差别. 有限差分方法在计算FTLE场时, 首先以分析区域每个离散格点坐标为初始值, 依次数值求解常微分方程 (1), 得到所有格点上的时间终端位置后, 再利用差分公式 (4) 计算出FTLE场. 而新方法是在对偶数空间中对离散网格逐点求解常微分方程 (1) 后, 组合成空间梯度张量计算FTLE值, 对所有网格点循环后形成FTLE场. 从并行计算上分析, 差分方法依赖于附近网格点的坐标值; 而新方法计算每个网格点FTLE的过程是完全独立的, 不依赖于周围网格点, 因此具有较大的自然并行性. 从计算误差上分析, 新方法主要是

在数值求解常微分方程(1)时会引入误差; 而有限空间差分方法在此误差源之外, 在利用差分公式(4)计算时还会产生截断误差. 因此新方法具有显著的优越性.

基于对偶数理论的FTLE场计算流程具体如图1所示, 详细说明如下.

第一步: 对所分析的二维或三维空间区域进行离散, 获得一定分辨率的网格点坐标集 $\boldsymbol{x}_{i,j}=(x_{i,j},y_{i,j}),\ i=1,2,\cdots,N;\ j=1,2,\cdots,M$.

第二步: 采用一定的差分格式(如: 四阶龙格-库塔算法)实现数值求解微分方程(1)的程序, 然后利用对偶数空间中的代数运算和标准函数计算法则对数值计算程序进行修改, 使其适合于对偶数空间中的运算.

第三步: 从第一个网格点开始, 依次将网格点实数坐标改写成对偶数形式 $(\langle x_{i,j},1\rangle,\ \langle y_{i,j}1\rangle)$, 并作为常微分方程(1)的初始条件, 然后利用第二步中实现的程序在对偶数空间对微分方程进行数值积分, 同时获得格点上的时间终端位置向量 $\phi_{t_0}^T(x)$ 和空间梯度张量 $\dfrac{\mathrm{d}\phi_{t_0}^T(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}x}$.

第四步: 将所计算的空间梯度张量值代入(5)式计算出格点上的柯西-格林形变张量 $\boldsymbol{\Delta}_{i,j}$ 值, 再利用(6)式计算出FTLE值.

第五步: 按照网格点下标顺序重复上面的第三步和第四步, 遍历所有网格点后形成FTLE场, 并终止程序.

4 数值试验结果与分析

4.1 基于对偶数理论的导数计算

为了说明基于对偶数理论计算导数信息新方法的优势, 首先以一个强非线性微分方程在不同时刻的状态量对初始值敏感度分析(sensitivity analysis)为例进行数值试验. 强非线性微分方程[28,34—37]表示如下:

$$\begin{aligned}\dot{u}&=tu^2,\\ u|_{t=0}&=u_0.\end{aligned}\tag{14}$$

(14)式表示的是在无其他因素影响情况下系统状态在时间段 $t\in(0,T]$ 内变化的数学模型, $\dot{u}$ 表示状态量的变化速度, u_0 表示初始条件, 末端时间设置为 $T=1.5$. 为了计算状态量 $u(t)$ 对于初始状态 u_0 的敏感度, 即 $s(t)=\mathrm{d}u(t)/\mathrm{d}u_0$, 拟采用两种方法进行对比试验: 一种是有限差分方法, 另外一种是基于对偶数理论的敏感度计算方法.

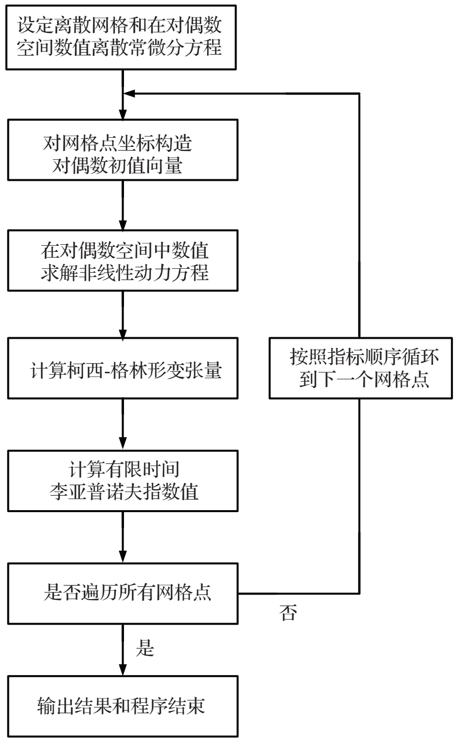

图1 基于对偶数理论的FTLE场计算流程

数值模拟试验中初始值设置为 $u_0=0.5$, 采用四阶龙格-库塔算法数值求解非线性微分方程(14), 积分步长设置为 $\tau=0.005$, 积分步数为300. 有限差分方法计算敏感度的过程是分别以初值 u_0 和扰动初值 u_0+h 积分求解(14)式得到数值解 u_i 和 u_i', $i=1,2,3,\cdots,N$, 然后计算不同时刻的敏感度值 $s_i=(u_i'-u_i)/h$. 基于对偶数理论的敏感度计算过程是利用对偶数运算法则修改非线性微分方程(14)在实数空间的四阶龙格-库塔算法程序, 然后以对偶数 $\langle u_0,1\rangle$ 为初值在对偶数空间中积分到末端时间 T, 同时获得不同时刻的状态变量值 u_i 及其对初始值的敏感度值 s_i^d, $i=1,2,3,\cdots,N$. 为了比较和验证两种方法的准确性, 利用何吉欢提出的变分迭代方法(VIM)[28,29,36,37]求得(14)式的近似解序列, 然后取迭代次数趋于无穷大时近似解序列的极限作为解析解. (15)式给出了在时间定义域 $t\in(0,T]$ 内状态量及其敏感度的解析解表达式:

$$\begin{aligned}u(t)&=2u_0/(2-u_0t^2),\\ s(t)&=4/(2-u_0t^2)^2.\end{aligned}\tag{15}$$

将(15)中第一式代入(14)式后可验证解析解的正确性, 从而说明变分迭代方法[29,36—40]是一种非常

有效的非线性微分方程求解方法.

首先利用初值 u_0 和以不同扰动量 $h = 0.10$, 0.05 和 0.02 形成的扰动初值分别积分非线性微分方程 (14), 然后利用差分方法求得三组敏感度值, 分别如图 2 中点虚线、实线和虚线所示. 而在图 2 中所显示的对偶数新方法值和 VIM 方法解析解则分别表示的是利用基于对偶数理论方法和解析表达式 (15) 计算的敏感度值. 从图 2 中易知, 基于对偶数理论的方法能够非常精确地计算出非线性微分方程 (14) 中状态敏感度随时间的变化, 与解析值是完全重叠的. 而差分方法所计算的敏感度值只在数值积分初期才与敏感度真实值具有一致性, 随着初始扰动值的增大和积分时间的延长, 计算的敏感度值越来越偏离敏感度解析值. 原因是差分方法会引入截断误差, 而且初值扰动量 h 越大, 所计算的敏感度值中截断误差也就越大. 另外, 为了计算一组敏感度信息, 差分方法需要分别以不同初值对非线性微分方程 (14) 进行两次数值积分; 而对偶数方法只需要在对偶数空间对 (14) 式积分一次, 就能同时计算出不同时刻的状态量和敏感度值.

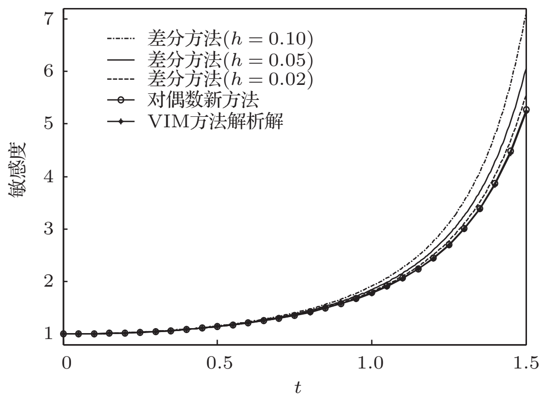

图 2 利用不同方法计算的强非线性微分方程 (14) 状态量敏感度值

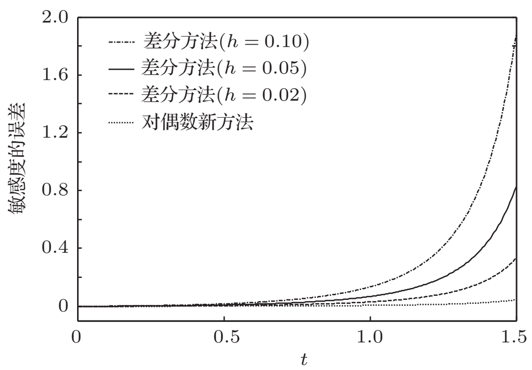

图 3 利用不同方法计算的强非线性微分方程 (14) 敏感度误差值

为了进一步说明基于对偶数理论新方法的优越性, 分别计算了不同扰动值差分方法、新方法所计算的敏感度值与真实敏感度值之间的差值, 如图 3 显示. 在图 3 中点虚线表示差分方法扰动量取 $h = 0.10$ 时的敏感度误差值, 它的误差值最大, 而且随时间增长最快; 实线和虚线分别表示扰动量取 $h = 0.05$ 和 0.02 时的敏感度误差值. 两者对比可知, 随着初始扰动量的减小, 由差分方法所计算的敏感度误差具有减小趋势, 但是仍然随时间较快增长; 点线表示的是基于对偶数理论新方法所计算的敏感度误差值, 虽然误差随积分时间延长也具有细微的增长趋势, 但在所研究的时间段内误差曲线基本上是平坦的, 且远远小于差分方法所计算的敏感度误差值. 新方法的惟一误差源是四阶龙格-库塔算法数值求解非线性微分方程 (14) 时所引入的误差.

4.2 单摆 LCS 的识别

为了验证基于对偶数理论的有限时间 Lyapunov 指数计算新方法的有效性, 首先以典型的单摆系统[23] 为例进行考查. 单摆运动由常微分方程组描述如下:

$$\begin{aligned}
&\dot{x} = y,\\
&\dot{y} = -\sin(x),\\
&(x, y)|_{t=t_0} = (x_0, y_0).
\end{aligned} \tag{16}$$

在经典的动力系统理论中, 已经得到了系统 (16) 的相图, $(\pm\pi, 0)$ 是两个鞍点, 而 $(0, 0)$ 是中心[23]. 首先在定义域 $D = \{(x, y) \in (-4 \leqslant x \leqslant 4, -4 \leqslant y \leqslant 4)\}$ 内设置网格距 $h = 0.01$, 则可以划分得到一个规模为 801×801 的高分辨率离散网格点集合, 每个网格点坐标对都可作为微分方程数值积分的一组初始值 (x_0, y_0). 在数值模拟试验中, 终端时间设置为 $T = 10$, 采用四阶龙格-库塔算法对不同初值点 (x_0, y_0) 分别在实数和对偶数空间中求解单摆运动微分方程 (16), 积分步长设置为 $\tau = 0.05$, 积分步数为 200. 然后分别利用有限差分方法和基于对偶数理论的新方法计算出单摆系统在每个格点上的有限时间 Lyapunov 指数, 并以等值图的形式绘出 FTLE 场, 分别如图 4 (a) 和 (b) 所示. 比较图 (a) 和 (b) 中的结果可知: 两种方法都可以计算出真实的 FTLE 场, 并从其中清晰地识别出脊线结构, 即 LCS, 它们是趋近于两个鞍点的稳定流形. LCS 是单摆相空间中的运动分界面, 将所有轨道划分为周

期解和旋转解. 从图4可知, 差分方法和基于对偶数理论的新方法在网格分辨率很高时都能较准确地计算出FTLE值和识别出拉格朗日相关结构, 但比较两图旁边的色标值可知: 由于能准确计算轨迹空间导数张量, 因此新方法计算的FTLE场比差分方法具有更精确的最大值, 而这正是LCS所在的位置; 差分方法在计算FTLE时存在截断误差, 所计算的FTLE最大值要明显小于新方法, 另外还无法计算边界上的FTLE场. 如同3.1部分中的敏感度计算, 当差分方法的网格距取为无穷小时, 所计算的FTLE值将逼近基于对偶数理论新方法计算的FTLE值. 但是, 当网格距取无限小时, 一方面网格数和计算量都会急剧增加, 另一方面可能会引起减消误差.

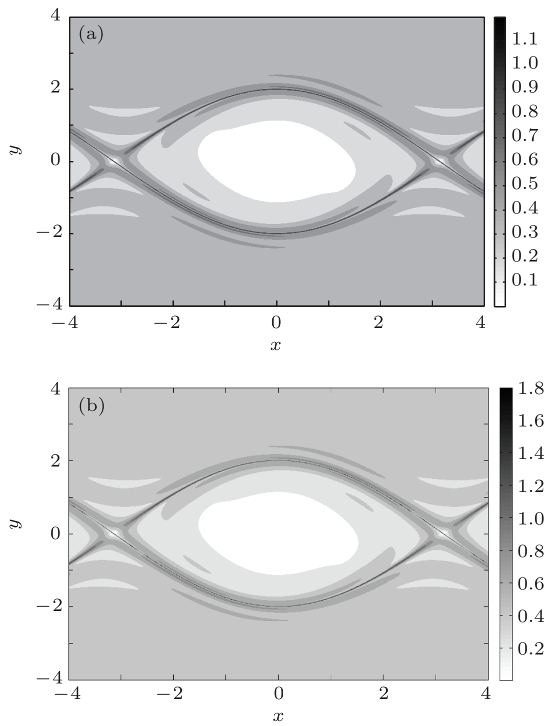

图4 高分辨率网格情况下两种方法所计算的单摆系统FTLE场和LCS (a) 差分方法; (b) 基于对偶数的新方法

图5是当网格距增大为$h = 0.04$、网格规模下降为201×201和终端时间设置为$T = 10$时, 分别利用有限差分方法和基于对偶数理论新方法所计算的单摆系统FTLE场. 从图5(a)可知, 差分方法在较低分辨率网格情况下所计算的FTLE场与图4的结果已经存在很大的差别. 图5(a)中在脊线两侧处存在许多虚假结构, LCS的宽度明显变粗, 中心区域的FTLE零值区形状明显发生了变化, 而且无法计算区域边界FTLE值的问题更加明显. 另外, 从图5(a)的色标值可知, 随着分辨率降低所计算的最大FTLE值具有减小和偏离真值的趋势. 而图5(b)和图4(b)仍然具有较大的一致性, 主要形状没有任何变化, 最大FTLE值没有减小. 这是因为基于对偶数理论的新方法在计算FTLE值时不依赖于周围网格点, 虽然网格变稀疏, 但在每一个网格点位置上所计算的FTLE值仍然是准确的. 而利用差分方法计算有限时间Lyapunov指数时, 由于存在截断误差, 随着网格距变大和分辨率降低, 有限时间Lyapunov指数值的误差将明显增大, 从而使FTLE场中主要结构形状发生较大改变.

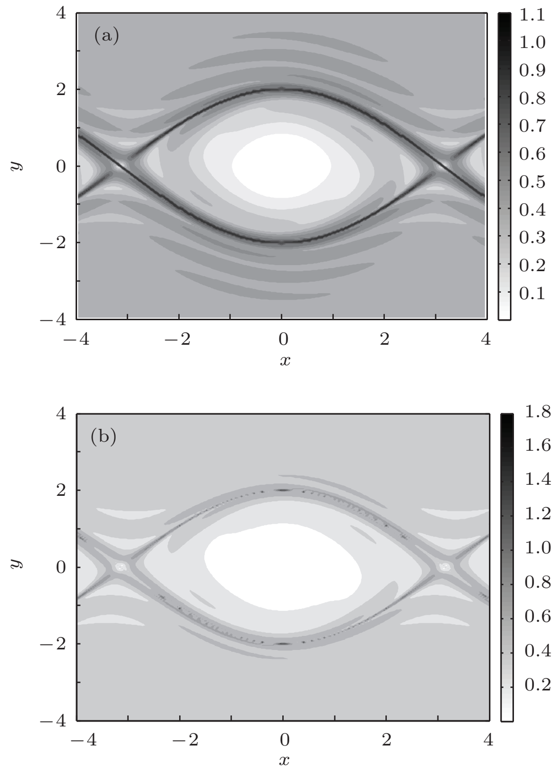

图5 低分辨率网格情况下两种方法所计算的单摆系统FTLE场和LCS (a) 差分方法; (b) 基于对偶数的新方法

4.3 Duffing振子系统LCS的识别

单摆运动方程(16)中的速度矢量是与时间无关的, 即LCS表示的是时间周期不变流形. 为了进一步验证基于对偶数微分的有限时间Lyapunov指数计算新方法的有效性, 下面以强迫Duffing振子系统[17]为例进行考察. 受强迫的Duffing振子系统运动由常微分方程组描述如下[17]:

$$
\begin{aligned}
&\dot{x} = y,\\
&\dot{y} = x - x^3 + \varepsilon(\gamma \sin(\omega t) - \delta y),\\
&(x, y)|_{t=t_0} = (x_0, y_0).
\end{aligned}
\tag{17}
$$

在(17)式中速度矢量函数是依赖于时间的. 数值模拟试验中二维空间区域设置为

$$D = \{(x, y) \in (-2 \leqslant x \leqslant 2, -1.2 \leqslant y \leqslant 1.2)\},$$

网格距为$h = 0.0025$, 则可以划分确定一个规模为1601×961的高分辨率离散网格点集合, 终端时间设置为$T = 10$. 强迫项的各个物理参数设置如下: $\varepsilon = 0.6$, $\omega = 0.6$, $\gamma = 0.17$和$\delta = 0.2$, 积分步长$\tau = 0.05$, 积分步数为200, 同样采用四阶龙格-库塔算法对不同的初值点(x_0, y_0)分别在实数和对偶数空间中求解常微分方程组(17). 然后分别利用有限差分方法和基于对偶数理论的新方法计算出Duffing振子系统在每个格点上的有限时间Lyapunov指数, 并以等值图的形式绘出FTLE场, 分别如图6(a)和(b)所示. 比较图6(a)和(b)中的结果可知: 两种方法所计算的FTLE场在空间分布上是非常类似的, 但色标所标识的最大值存在较大差别. 主要原因是: 有限空间差分方法计算某个格点上的FTLE值时需要利用周围多个格点的初始时间和终端时间的位置坐标, 计算结果只是一种平均FTLE值; 而基于对偶数的新方法能够精确计算轨迹空间导数, 相当于有限差分网格距趋于无限小的情形, 故在图6(b)中FTLE最大值要大于(a)中的FTLE最大值. 这从一个方面说明了新方法能更准确地计算FTLE值. 另外, 从图4还可知, 两种方法都能清晰地识别出脊线结构, 即LCS, 由于强迫Duffing振子系统不是保守系统, 因此等值图中的脊线不是封闭曲线. 从上面的分析容易得出结论: 差分方法和基于对偶数理论的新方法在网格分辨率很高的情况下都能较准确地计算出FTLE场, 并识别出拉格朗日相关结构. 但通过两图旁边的色标互相比较可知: 由于能准确计算轨迹空间导数张量, 因此基于对偶数理论的新方法计算的FTLE场比差分方法具有许多更大值, 而这正是LCS所在的位置; 差分方法在计算FTLE时存在截断误差, 在FTLE极值的计算上要明显小于新方法, 另外还无法计算边界上的FTLE场.

图7是网格距增大为$h = 0.02$、格点规模下降为201×121和终端时间设置为$T = 10$时分别利用有限差分方法和基于对偶数理论的新方法所计算出的强迫Duffing振子系统的FTLE场. 从图7(a)可知, 差分方法在低分辨率网格情况下所计算的FTLE场与图6的结果已经具有较大差别. 在图7(a)中脊线呈模糊状, LCS的宽度明显变粗, 而且FTLE场中的许多形状明显发生了变化. 另外, 无法计算区域边界上FTLE值的问题变得更加明显, 同时随着分辨率降低, FTLE 最大值进一步减小. 而图7(b)和图6(b)仍然具有较大的一致性, 最大FTLE 值没有减小, 比较图7(a)和(b)可知: 利用差分方法计算的FTLE最大值和最小值都具有较大变化, 其中最大值只有新方法计算的FTLE最大值的一半, 说明已经存在较大的误差. 从上面分析可知, 在网格数规模降低为原来的1/64后, 利用差分方法所计算的有限时间Lyapunov指数值误差明显增大, FTLE场的形状结构发生了巨大改变; 而基于对偶数理论的新方法由于能够独立计算每个格点的有限时间Lyapunov指数值, 即使在网格分辨率降低的情况下, 仍然可以准确地计算每个格点上的FTLE值. 从而说明, 在相同的低分辨率情况下, 相对于传统差分方法, 基于对偶数理论的新方法具有不受截断误差影响、能计算区域边界上的FTLE值等优点, 所获得的FTLE场显著优于常用差分方法所计算的FTLE场.

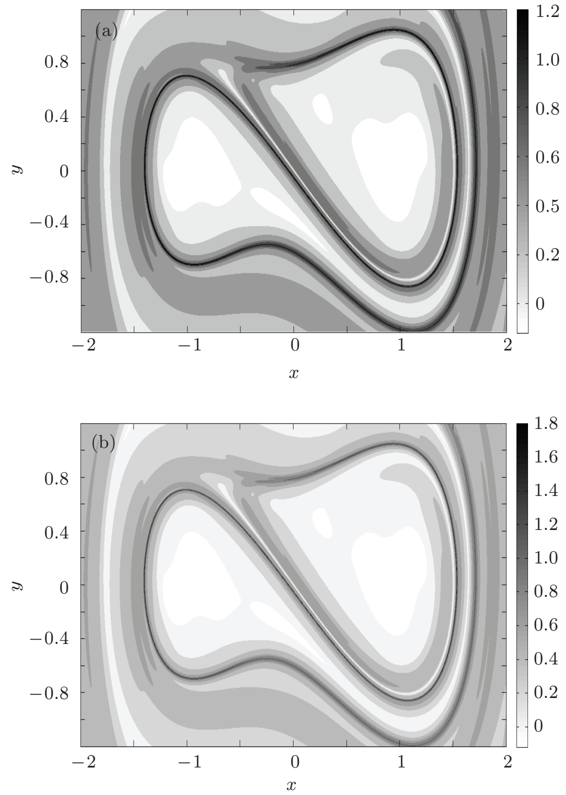

图6 高分辨率网格情况下两种方法所计算的强迫Duffing振子系统FTLE场和LCS (a) 差分方法; (b) 基于对偶数的新方法

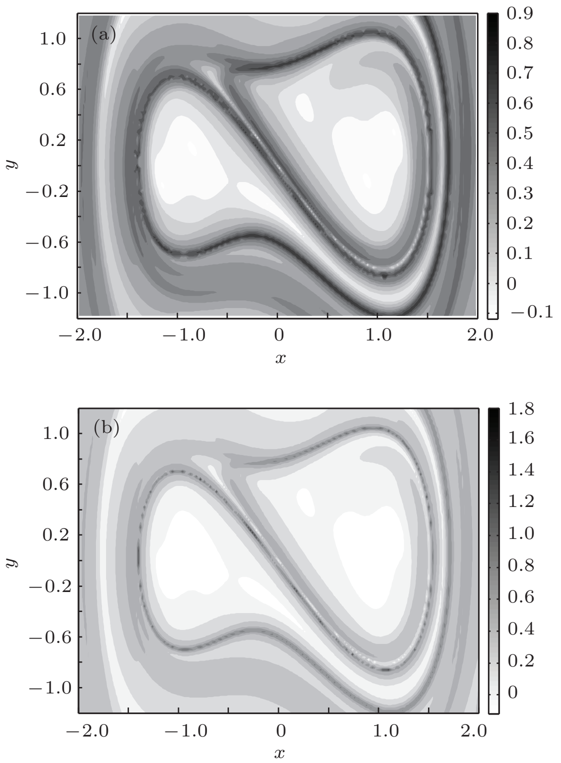

图 7　低分辨率网格情况下两种方法所计算的强迫 Duffing 振子系统 FTLE 场和 LCS　(a) 差分方法; (b) 基于对偶数的新方法

5　结　论

本文提出了一种基于对偶数理论[26,27,30–33]计算有限时间 Lyapunov 指数的新方法. 主要思想是将 FTLE 定义公式中的轨迹空间导数张量计算问题转化为对偶数空间中非线性微分方程数值求解问题, 形成柯西-格林形变张量后能高精度地计算出 FTLE 值. 新方法由于能够避免有限空间差分计算, 所以不会引入截断误差, 从而克服了 FTLE 差分方法计算准确度不高和无法获得边界值的问题. 首先设计了基于对偶数理论计算有限时间 Lyapunov 指数的新算法; 其次通过一个强非线性微分方程不同时刻状态量对初始值敏感度分析为例, 说明了基于对偶数理论的新方法在计算导数信息方面相对于差分方法具有显著优势; 然后针对典型单摆运动系统和强迫 Duffing 振子系统进行了数值模拟试验. 结论如下: 1) 对于高分辨率离散网格, 差分方法和新方法都能较好地计算出 FTLE 场和识别所包含的拉格朗日相关结构, 但在 FTLE 最大值的计算上新方法具有更高准确度; 只有当网格距趋于无限小时, 差分方法计算结果才在理论上逼近基于对偶数新方法的结果; 差分方法无法计算边界上的 FTLE 值, 新方法能克服此问题; 2) 在网格分辨率大幅降低后, 差分方法计算的 FTLE 值变小, FTLE 场的形状和结构有巨大变化, 且边界空白区问题变严重; 而新方法由于能独立和准确地计算每个格点上的有限时间 Lyapunov 指数值, FTLE 场的形状结构和最大值、最小值的变化相对较小; 3) 因为不需要周围格点的信息, 所以新方法在计算上具有更大的自然并行性; 由于能独立计算单点上的 FTLE 值, 因此适合于从非规则分布的自然界流体运动矢量 (例如: 大气风场和海表流场) 观测数据导出 FTLE 场, 这也是下一步需要研究的内容. 新方法可广泛应用于湍流边界层、地球物理流体、流体力学、环境污染扩散、生物运动和图像分割等领域的 FTLE 场计算和拉格朗日结构识别的研究中.

参考文献

[1] Wu H, Hou W, Wang W X, Yan P C 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 129204 (in Chinese) [吴浩, 侯威, 王文祥, 颜鹏程 2013 物理学报 **62** 129204]

[2] Zhang W C, Tan S C, Gao P Z 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 060502 (in Chinese) [张文超, 谭思超, 高璞珍 2013 物理学报 **62** 060502]

[3] Yao T L, Liu H F, Xu J L, Li W F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 234704 (in Chinese) [姚天亮, 刘海峰, 许建良, 李伟锋 2012 物理学报 **61** 234704]

[4] Chen B H, Li J P, Ding R Q 2006 *Sci. China D* **36** 1068

[5] Ding R Q, Li J P 2007 *Phys. Lett. A* **364** 396

[6] Lorenz E N 1963 *J. Atmos. Sci.* **20** 130

[7] Haller G 2001 *Physica D* **149** 248

[8] Haller G 2002 *Phys. Fluids A* **14** 1851

[9] Farazmand M, Haller G 2012 *Chaos* **22** 013128

[10] Tang W, Mathur M, Haller G, Hahn D C 2010 *J. Atmos. Sci.* **67** 2307

[11] Sapsis T, Haller G 2009 *J. Atmos. Sci.* **66** 2481

[12] Sapsis T, Peng J, Haller G 2011 *Bull. Math. Biol.* **73** 1841

[13] Tang W, Haller G, Baik J J, Ryu Y H 2009 *Phys. Fluids* **21** 043302

[14] Mathur M, Haller G, Peacock T 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 144502

[15] Green M A, Rowley C W, Haller G 2007 *J. Fluid Mech.* **572** 111

[16] Lekien F, Coulliette C, Mariano A J 2005 *Physica D.* **210** 1

[17] Shadden S C, Lekien F, Marsden J E 2005 *Physica D* **212** 271

[18] Shadden S C, Dabiri J O, Marsden J E 2006 *Phys. Fluids* **18** 047105

[19] Shadden S C, Katija K, Rosenfeld M 2007 *J. Fluid Mech.* **593** 315

[20] Pan C, Wang J J, Zhang C 2009 *Sci. Sin. G: Phys. Mech. Astronom.* **39** 627 (in Chinese) [潘翀, 王晋军, 张草 2009 中国科学G辑 物理学 力学 天文学 **39** 627]

[21] Yang A L, Jia L B, Yin X Z 2012 *J. Exp. Mech.* **27** 677 (in Chinese) [杨岸龙, 贾来兵, 尹协振 2012 实验力学 **27** 677]

[22] Lei P F, Zhang J Z, Wang Z P, Chen J H 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 084702 (in Chinese) [雷鹏飞, 张家忠, 王琢璞, 陈嘉辉 2014 物理学报 **63** 084702]

[23] Gawlik E S, Du Toit P C, Campagnola S 2009 *Celest. Mech. Dyn. Astron.* **103** 227

[24] Qi R, Xu S J 2013 *Aerospace Control and Application* **39** 6 (in Chinese) [祁瑞, 徐世杰 2013 空间控制技术与应用 **39** 6]

[25] Ali S, Shah M 2007 *IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition* Washington DC, USA, May 13–15, 2007 pp1–6

[26] Clifford W K 1871 *Proceedings of the London M athematical Society* London, UK, April 13–15, 1871 p381

[27] Study E 1981 *Mathematische Annalen* **39** 441

[28] He J H, Lee E W M 2009 *Phys. Lett. A* **373** 1644

[29] He J H 2007 *Comput. Math. Appl.* **54** 881

[30] Brodsky V, Shoham M 1999 *Mechanism and Machine Theory* **34** 693

[31] Wang J Y, Liang H Z, Sun Z W 2010 *J. Astronaut.* **31** 1711 (in Chinese) [王剑颖, 梁海朝, 孙兆伟 2010 宇航学报 **31** 1711]

[32] Spall R, Yu W 2013 *J. Fluids Engineer.* **135** 014501

[33] Yu W B, Blair M 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 1446

[34] Cao X Q, Song J Q, Zhang W M, Zhao J 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 070511 (in Chinese) [曹小群, 宋君强, 张卫民, 赵军 2011 物理学报 **60** 070511]

[35] Cao X Q, Song J Q, Zhang W M, Zhu X Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 080401 (in Chinese) [曹小群, 宋君强, 张卫民, 朱小谦 2011 物理学报 **60** 080401]

[36] He J H 2008 *Int. J. Modern. Phys. B* **22** 3487

[37] He J H 2001 *Int. J. Nonlin. Sci. Numer.* **2** 309

[38] Wu G C 2012 *Chin. Phys. B* **21** 120504

[39] Wu G C, Dumitru B 2013 *Appl. Math. Model.* **37** 6183

[40] Cao X Q, Song J Q, Zhu X Q 2012 *Chin. Phys. B* **21** 020203

Highly accurate computation of finite-time Lyapunov exponent*

Cao Xiao-Qun[1)2)†] Song Jun-Qiang[1)2)] Ren Kai-Jun[1)] Leng Hong-Ze[1)] Yin Fu-Kang[1)]

1) (*School of Computer Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*Science and Technology on Parallel and distributed Processing Laboratory, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

(Received 13 February 2014; revised manuscript received 16 May 2014)

Abstract

Aiming at the shortcomings of current method of calculating finite-time Lyapunov exponent (FTLE), such as low accuracy, inability to obtain boundary values, etc., a method of highly accurately computing FTLE is proposed based on dual number theory. Firstly, the weakness and disadvantages of the finite difference method used widely for computing FTLE are described. Secondly, the dual number theory is introduced to evaluate the derivatives accurately and efficiently, and its distinct virtues are also presented. The computation of Cauchy-Green deformation tensors for a dynamical system is transformed into a numerical integration problem of solving the nonlinear ordinary differential equation in dual number space by the new method. Finally, the proposed method is applied to typical pendulum system and nonlinear Duffing oscillator separately. The results of simulation experiments indicate that the new method is effective, convenient and accurate for computing the field of FTLE, from which Lagrangian coherent structures can be identified successfully.

Keywords: finite-time Lyapunov exponent, dual number, dynamical system, Lagrangian coherent structure

PACS: 05.45.–a, 47.10.Fg, 47.27.De, 11.25.Tq, 45.20.Jj **DOI:** 10.7498/aps.63.180504

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 41475094, 41105063, 41375105) and the Young Innovation Science Foundation of CHREO (Grant No. GFZX04060103-5-19).

† Corresponding author. E-mail: caoxiaoqun@nudt.edu.cn