

文章编号: 1000-5862(2015)06-0588-04

基于精确数值离散的一类新的辛算法

张静静

(河南理工大学数学与信息科学学院 河南 焦作 454000)

摘要: 对数值计算中经典的中点公式参数化, 基于精确数值离散的思想构造了带参数的修正中点公式. 此修正中点公式是对称的具有2阶精度的辛算法, 应用此修正中点公式模拟简单单摆问题. 数值实验表明: 对于小的初始摆角和较大的初始摆角, 带参数的修正中点公式比经典的中点公式更优越.

关键词: 精确数值离散; 修正中点公式; 哈密顿系统; 辛算法

中图分类号: O 241.82 **文献标志码:** A **DOI:** 10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2015.06.09

0 引言

动力系统中一切真实的耗散可以忽略不计的物理系统可以表示为哈密顿系统^[1]. 例如天体力学、分子动力学、量子力学、材料科学、半导体等领域中的许多问题都可以用哈密顿系统表示. 哈密顿系统的1个本质特征是其相流是从一个时刻到另一个时刻的辛映射, 如果一个数值方法能够定性地保持这一特性, 则称为辛几何算法, 简称辛算法. 与传统数值方法比较, 辛算法具有长时间的数值计算稳定性. 自从我国学者冯康院士于1984年首次系统地提出哈密顿系统的辛算法以来^[1], 辛算法的研究一直是国内外研究的热点问题之一^[2-5]. 一般地构造辛算法的途径有生成函数理论^[1]、变分积分^[6-7]、Runge-Kutta方法和分裂方法^[2].

基于精确数值离散的思想, 对经典的中点公式参数化, 本文构造了1类含参数 ω 的新的辛算法. 做这个工作的动机如下: 在数值计算中, 中点公式是一类简单而且重要的数值离散方法. 经典中点公式的简单性体现在它可以看作是1级的Runge-Kutta方法. 中点公式的重要性体现在它是对称的具有2阶精度的数值离散方法. 而且, 简单的计算可以表明, 中点公式也属于辛算法. 集众多优点于一身的中点公式对于物理学中经典而且重要的谐振子方程

$$m\ddot{q} = -kq \quad (1)$$

的离散却不尽人意, 其中 m 是质点的质量, k 是某个常数, \dot{q} 代表质点的位移函数 q 对时间 t 的2阶导

数. 基于中点公式离散经典的谐振子方程得到的数值解与精确解具有不同的速度^[8], 因此对中点公式的改进使其能“更好地”模拟经典的谐振子方程具有一定的意义. 此处更好地模拟的最精确描述是指中点公式方法离散谐振子方程得到的数值解和其相应的精确解在离散节点相等, 这种思想称为方程的精确数值离散, 其首次研究参见文献^[9]. 如今对方程的精确数值离散的研究持续得到关注^[10-11]. 这些论著都指出任何常微分方程只要其解存在则都有相应的精确数值离散. 自然地, 对于经典的谐振子方程也存在精确数值离散.

1 格式的推导

本部分导出带参数的修正中点公式, 建立此中点公式的基本思想是将经典的中点公式参数化, 使其对应的Runge-Kutta格式的Butcher表中的系数待定且满足一定的关系. 最后由参数化的中点公式给出谐振子方程的精确数值离散来确定此修正中点公式. 具体建立此公式的步骤如下:

Step 1 将(1)式变换成哈密顿方程的形式.

令 $\dot{q} = p$, 则 $\dot{p} = \ddot{q} = -kq/m$, 谐振子方程可写成哈密顿方程的形式:

$$\begin{cases} \dot{p} = -\partial H / \partial q, \\ \dot{q} = \partial H / \partial p, \end{cases} \quad (2)$$

其中哈密顿函数 $H(p, q) = (p^2 + \omega^2 q^2) / 2$, $\omega^2 = k/m$. 给定初始条件 $p(0) = p_0$, $q(0) = q_0$, 得到方程(2)的解析解是

收稿日期: 2015-08-20

基金项目: 国家自然科学基金(11201125), 河南省教育厅课题(12B110010)和河南理工大学博士基金(B2011-093)资助项目.

作者简介: 张静静(1983-), 女, 河南沁阳人, 讲师, 博士, 主要从事计算数学方面的研究.

$$\begin{cases} p(t) = p_0 \cos(\omega t) - q_0 \omega \sin(\omega t), \\ q(t) = p_0 \sin(\omega t) / \omega + q_0 \cos(\omega t). \end{cases} \quad (3)$$

为方便下面的叙述,将方程(2)写成向量的形式,记 $y = \begin{pmatrix} p \\ \omega q \end{pmatrix}$, $A = \begin{pmatrix} 0 & -\omega \\ \omega & 0 \end{pmatrix}$, 则方程(2)可等价地表示为

$$\dot{y} = Ay. \quad (4)$$

Step 2 经典的中点公式对应的 Runge-Kutta 格式的 Butcher 表如图 1 所示.

$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
	1

图 1 Butcher 表

修正上述公式中的系数,假设其系数见图 2,

c	$\frac{a}{2}$
	a

图 2 修正公式中的系数

应用如上的修正中点公式以时间步长 h 离散方程(4),得到

$$\begin{cases} y_1 = y_0 + haAY_1, \\ Y_1 = y_0 + \frac{ha}{2}AY_1, \end{cases}$$

记 $v = \omega h$, 展开上式可得离散时刻点 $t_1 = h$ 处对应的数值解 p_1, q_1 为

$$\begin{cases} p_1 = \frac{4 - a^2 v^2}{4 + a^2 v^2} p_0 - \frac{4av\omega}{4 + a^2 v^2} q_0, \\ q_1 = \frac{1}{\omega} \frac{4av}{4 + a^2 v^2} p_0 + \frac{4 - a^2 v^2}{4 + a^2 v^2} q_0. \end{cases} \quad (5)$$

Step 3 令 $t = h$, 由(3)式得到的精确解 $p(h), q(h)$ 与由(5)得到的数值解 p_1, q_1 对应相等, 则得到关于待定系数 a 的关系式

$$\begin{cases} \frac{4 - a^2 v^2}{4 + a^2 v^2} = \cos v, \\ \frac{4av}{4 + a^2 v^2} = \sin v, \end{cases} \quad (6)$$

解(6)式可得

$$a = \pm 2(1 - \cos v) / (v \sin v),$$

解(7)式可得

$$a = 2(1 \pm \cos v) / (v \sin v),$$

综上可以唯一地确定 $a = 2(1 - \cos v) / (v \sin v)$.

因此,基于对谐振子方程(4)的精确数值离散,导出了 1 类带参数 ω 的修正中点公式,其对应于如图 3 所示的 Runge-Kutta 表格.

c	$\frac{1 - \cos v}{v \sin v}$
	$\frac{2(1 - \cos v)}{v \sin v}$

图 3 Runge-Kutta 表

图 3 中 $v = \omega h$, h 是离散的时间步长, ω 是待定参数, c 的选取可由相容性条件给出.

定理 1 带参数的修正中点公式(见图 3)是对称的辛算法,至少具有 2 阶精度.

证 将带参数的修正中点公式应用于一般的偏微分方程(ODE),由 $\dot{y} = f(y)$ 可得

$$y_{n+1} = y_n + \frac{2(1 - \cos(\omega h))}{\omega \sin(\omega h)} f\left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right), \quad (8)$$

对换(8)式中的 y_n 与 y_{n+1} , 并将 h 替换成 $-h$ 得

$$y_n = y_{n+1} + \frac{2(1 - \cos(-\omega h))}{\omega \sin(-\omega h)} f\left(\frac{y_{n+1} + y_n}{2}\right),$$

整理上式即可重新得到(8)式. 这表明带参数的修正中点公式是对称的^[2]. 因为带参数的修正中点公式对应的 Runge-Kutta 的 Butcher 表为

$$a_{11} = (1 - \cos v) / (v \sin v), \quad b_1 = 2a_{11},$$

其满足关系式 $b_1 a_{11} + b_1 a_{11} = b_1^2$, 即证明了带参数的修正中点公式是辛算法.

由于对称的 Runge-Kutta 方法的数值精度是偶数阶, 所以对称的带参数的修正中点公式至少具有 2 阶精度^[2].

2 数值实验

本部分分别应用带参数的修正中点公式(见图 3)和经典的中点公式(见图 1)数值模拟简单单摆方程. 其物理背景为: 一质量为 m 的质点被一长为 l 的无质量细线悬于定点, 设细线与垂直线的夹角为 θ , 若认为质点只受重力, 则由牛顿第二定律得到单摆的运动方程为

$$ml \frac{d^2 \theta}{dt^2} = -mg \sin \theta, \quad (9)$$

其中 g 为重力加速度. 当 $\theta < 5^\circ$ 时, $\sin \theta \approx \theta$, 上述单摆方程可近似为谐振子运动方程. 因为本文导出的带参数的修正中点公式精确数值离散谐振子方程, 期待当摆角较小时, 带参数的修正中点公式比经典的中点公式较好地模拟单摆方程. 如下的数值实验证明了这种猜测, 并且进一步表明在摆角较大(如 $\theta = 75^\circ$)时, 带参数的修正中点公式仍然比经典的中点公式的全局离散误差小.

给定初值条件 $\theta(0) = \theta_0$, $\dot{\theta}(0) = 0$, 方程(9) 的解析解的表达式^[12] 为

$$\theta(t) = 2\arcsin \left\{ \sin \frac{\theta_0}{2} s_n \left[K(\sin^2 \frac{\theta_0}{2}) - \omega_0 t; \sin^2 \frac{\theta_0}{2} \right] \right\},$$

其中 $\omega_0 = \sqrt{g/l}$, $K(\cdot)$ 为第 1 类完全椭圆积分, $s_n[\cdot; \cdot]$ 为 Jacobi 椭圆函数.

令 $\dot{\theta} = p$, 则方程(9) 可化为哈密顿系统

$$\dot{\theta} = p, \quad \dot{p} = -\omega_0^2 \sin \theta, \quad (10)$$

相应的哈密顿函数 $H(p, \theta) = p^2/2 - \omega_0^2 \cos \theta$. 分别应用带参数的修正中点公式和经典的中点公式离

散(10) 式, 得到

$$\begin{cases} \theta_{n+1} = \theta_n + \delta \frac{p_{n+1} + p_n}{2}, \\ p_{n+1} = p_n - \omega_0^2 \delta \sin \left(\frac{\theta_{n+1} + \theta_n}{2} \right), \end{cases}$$

其中 $\delta = 2 \tan(\omega h/2) / \omega$ 对应于带参数 ω 的修正中点公式离散, $\delta = h$ 对应于经典的中点公式离散. 下面所有的数值实验中, 选取 $\omega_0 = 1$, $\omega = 1$. 表 1 选取初值条件 $\theta(0) = 1^\circ$, $\dot{\theta}(0) = 0$, 计算当每次步长 h 增大 2 倍时对应的全局误差.

表 1 θ_n 与 $\theta(t)$ 在 $t = 10$ 时的全局误差 E_h^θ 和数值精度

中点公式 ($\omega = 1$)			修正中点公式(8) ($\omega = 1$)	
h	$E_h^\theta = \theta_n - \theta(10) $	阶	$E_h^\theta = \theta_n - \theta(10) $	阶
0.002 0	0.000 3e-004		0.000 3e-008	
0.003 9	0.001 2e-004	4.000 0	0.001 2e-008	4.000 0
0.007 8	0.004 8e-004	3.999 9	0.004 7e-008	4.000 0
0.015 6	0.019 3e-004	3.999 4	0.018 9e-008	3.999 9
0.031 3	0.077 2e-004	3.997 7	0.075 5e-008	3.999 5
0.062 5	0.308 0e-004	3.990 7	0.302 0e-008	3.999 8

在表 1 中, 从第 3 列和第 5 列可以得到带参数的修正中点公式和经典的中点公式的全局误差 $E_h^\theta = O(h^2)$, 即验证了带参数的修正中点公式和经典的中点公式的全局误差精度都是 2 阶. 从第 2 列和第 4 列可以明显看出带参数的修正中点公式的全局误差比经典的中点公式的全局误差小, 这一

现象证实了本文的猜测, 即在摆角 θ 较小时带参数的修正中点公式(8) 比经典的中点公式更优越.

在图 4 中, 选取了 4 个初始条件 $\theta(0) = 5^\circ, 25^\circ, 45^\circ, 75^\circ$, $\dot{\theta}(0) = 0$, 分别用带参数的修正中点公式和经典的中点公式数值模拟了 θ_n 与精确解 $\theta(t)$ 的误差的绝对值.

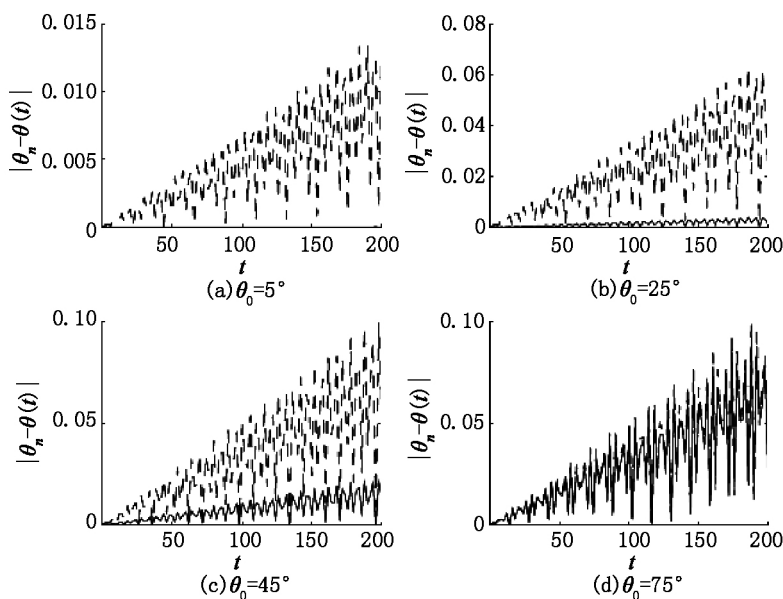


图 4 带参数 $\omega = 1$ 的修正中点公式与经典中点公式计算 θ_n 与精确解 $\theta(t)$ 的误差

在图 4 的每个子图中, 实线代表带参数的修正中点公式的数值离散误差, 虚线代表经典的中点公

式的数值离散误差. 从每个子图显然可以看出, 实线大部分位于虚线下方, 这表明即使对于大摆角的情

形,带参数的修正中点公式的数值离散误差仍然比经典的中点公式的数值离散误差小.

3 结论

本文的创新之处是构造了带参数的修正中点公式.此修正中点公式精确数值离散谐振子方程,是对称的具有2阶精度的辛算法.为了表明修正中点公式在非线性哈密顿系统的应用,以简单单摆方程为例,选取参数 $\omega = 1$,应用修正中点公式数值模拟了简单单摆方程.数值实验表明,无论对于小的初始摆角还是较大的初始摆角,带参数的修正中点公式比经典的中点公式优越.应用修正中点公式数值模拟其他更多的非线性哈密顿系统需要确定参数 ω .限于篇幅,将另文探讨 ω 的选取,此处仅列出 ω 的选取可以根据截断误差的精度、修正方程的精度、修正中点公式保持哈密顿函数的精度等.针对不同的问题, ω 可以根据不同的策略进行选取.

4 参考文献

- [1] 冯康,秦孟兆.哈密顿系统的辛几何算法[M].杭州:浙江科学技术出版社,2003.
- [2] Hairer E, Lubich C, Wanner G. Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations [M]. Berlin: Springer-Verlag, 2006.
- [3] 徐远,孔令华,王兰,等.带有阻尼项的4阶非线性薛定谔方程的显式辛格式[J].江西师范大学学报:自然科学版,2013,37(3):244-248.
- [4] 童慧,孔令华,王兰. Dirac 方程的紧致分裂多辛格式[J].江西师范大学学报:自然科学版,2014,38(5):521-525.
- [5] 王兰.多辛 Preissmann 格式及其应用[J].江西师范大学学报:自然科学版,2009,33(1):42-46.
- [6] Leok M, Zhang Jingjing. Discrete Hamiltonian variational integrators [J]. IMA J Numer Anal, 2011, 31(4): 1497-1532.
- [7] Marsden J E, West M. Discrete mechanics and variational integrators [J]. Acta Numer, 2001, 10: 357-514.
- [8] Vladimir Dorodnitsyn, Roman Kozlov. Invariance and first integrals of continuous and discrete Hamiltonian equations [J]. J Engn Math, 2010, 66(1/2/3): 253-270.
- [9] Renfrey B Potts. Differential and difference equations [J]. Amer Math Monthly, 1982, 89(6): 402-407.
- [10] Agarwal R P. Difference equations and inequalities: theory, methods and applications [M]. New York: Marcel Dekker, 2000.
- [11] Mickens Ronald E. Nonstandard finite difference models for differential equations [M]. Singapore: World Scientific, 1994.
- [12] Belédez A, Pascual C, Méndez D I, et al. Exact solution for the nonlinear pendulum [J]. Revista Brasileira de Ensino de Física, 2007, 29(4): 645-648.

A New Class of Symplectic Method Based on Exact Numerical Discretization

ZHANG Jingjing

(School of Mathematics and Information Science, Henan Polytechnic University, Jiaozuo Henan 454000, China)

Abstract: The modified midpoint formula with a parameter is constructed by parameterizing the classical midpoint formula and based on the idea of exact numerical discretization. The modified midpoint formula is symmetric, second order convergent and symplectic. When applied to simple pendulum problem, it shows that the modified midpoint formula with a parameter is better than classical midpoint formula for small and large initial angular displacements.

Key words: exact numerical discretization; modified midpoint formula; Hamilton system; symplectic

(责任编辑: 曾剑锋)