

Hamilton 系统下基于相位误差的 精细辛算法*

刘晓梅¹, 周 钢², 朱 帅³

- (1. 上海第二工业大学 文理学部 理学院, 上海 201209;
2. 上海交通大学 数学科学学院, 上海 200240;
3. 上海交通大学 机械与动力工程学院, 上海 200240)

摘要: Hamilton 系统是一类重要的动力系统, 辛算法(如生成函数法、SRK 法、SPRK 法、多步法等)是针对 Hamilton 系统所设计的具有保持相空间辛结构不变或保 Hamilton 函数不变的算法, 但是, 时域上, 同阶的辛算法与 Runge-Kutta 法具有相同的数值精度, 即辛算法在计算过程中也存在相位误差, 导致时域上解的数值精度不高, 经过长时间计算后, 计算结果在时域上也会变得“面目全非”. 为了提高辛算法在时域上解的精度, 将精细算法引入到辛差分格式中, 提出了基于相位误差的精细辛算法 (HPD-symplectic method), 这种算法满足辛格式的要求, 因此在离散过程中具有保 Hamilton 系统辛结构的优良特性. 同时, 由于精细化时间步长, 极大地减小了辛算法的相位误差, 大幅度提高了时域上解的数值精度, 几乎可以达到计算机的精度, 误差为 $O(10^{-13})$. 对于高低混频系统和刚性系统, 常规的辛算法很难在较大的步长下同时实现对高低频精确仿真, 精细辛算法通过精细计算时间步长, 在大步长情况下, 没有额外增加计算量, 实现了高低混频的精确仿真. 数值结果验证了此方法的有效性和可靠性.

关键词: 辛算法; 相位误差; 保结构; Hamilton 系统; 精细算法

中图分类号: O241; O302

文献标志码: A

DOI: 10.21656/1000-0887.390249

引 言

RK 法是工程中最常应用的数值方法, 它格式简单、几何意义明确、运算效率高, 但是存在耗散机制, 误差会累积, 不适宜做长时间的计算. 为此, Feng(冯康)^[1]在 1984 年国际微分几何与微分方程会议上发表的《差分格式与辛几何》, 首次系统地提出了 Hamilton 方程及其算法——辛几何算法(symplectic geometric algorithms), 这是根据 Hamilton 系统的解能保持辛几何结构不变的性质而设计的辛算法.

辛算法虽然克服了 RK 法的精度耗散机制, 然而在计算过程中如 RK 法一样会产生相位误差, 从而影响数值精度. Görtz 研究了单步辛算法的相位误差问题^[2], 邢誉峰等针对经典的无阻尼 Hamilton 系统阐述了辛算法导致动态响应“面目全非”的原因——相位误差累积^[3]. Monovasilis 和 Simos 等设计了具有最高阶相位精度的某些辛算法的计算格式(譬如 SPRK 法)

* 收稿日期: 2018-09-21; 修订日期: 2018-10-11

基金项目: 国家自然科学基金(50876066)

作者简介: 刘晓梅(1982—), 女, 讲师, 博士(通讯作者. E-mail: xmliu@sspu.edu.cn).

等^[4-13].但是这些方法只能有限地提高辛算法在时域上的精度,长时间计算后相位误差的精度还是会大幅度降低.

采用小步长是提高计算精度的另一种途径,但单纯地将步长细化会大大增加计算量.为此,钟万勰设计了精细算法^[14],能够在步长允许的范围内多次计算,避免了大数吃小数,克服了计算机的舍入误差,使得计算精度几乎可以达到计算机的精度,并且精细矩阵生成后可以做到“一次生成,终身使用”,从而计算量并没有增加,但计算精度却大大提高了,因此得到了广泛的应用^[15-16].Huang(黄永安)等^[17]、曾进等^[18]利用 Padé 逼近,将辛算法与精细积分法相结合,设计了精细辛算法,使得解在保持计算长期稳定性的同时也大大提高了计算精度.但是计算过程中涉及矩阵求逆,只能近似保辛^[19-20].

因此,本文从相位误差的角度出发,将精细算法引入到一阶辛差分格式中,设计了基于相位误差的精细辛算法,证明了此算法每一小步是辛算法,合成一大步后仍然是辛算法,当精细参数 N 趋于无穷大时,相位误差趋于零.因此,所设计的精细辛算法不仅可以保持原 Hamilton 系统的性质,还使相位精度得到了大幅度的提高,可以有效逼近精确的相位,长时间计算后仍可逼近精确解.

1 Hamilton 系统的辛算法

$$\begin{cases} \frac{dq}{dt} = H_p, \\ \frac{dp}{dt} = -H_q, \end{cases} \quad (1)$$

初始值 $q(0) = q_0, p(0) = p_0$, 若令 $z = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}, z_0 = \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix}$, 则式(1)简记为

$$\frac{dz}{dt} = JH_z,$$

$$\text{其中 } J_{2n} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & I_n \\ -I_n & \mathbf{0} \end{bmatrix}, H_z = \begin{pmatrix} H_q \\ H_p \end{pmatrix}.$$

由流形的理论可知,Hamilton 方程的解能保持正则变换.即若 Hamilton 方程的解在 t_0 时刻为 z , 到达 $t_0 + t$ 时刻的解为 \tilde{z} , 则其 Jacobi 矩阵 $M = \partial\tilde{z}/\partial z$ 是辛矩阵 ($M^T J M = J$). 这种特性使得 Hamilton 系统的解能保持相空间的辛结构.

在数值计算中,若从 $z^k = z(t_k)$ 到 z^{k+1} 的差分格式的 Jacobi 矩阵能满足正则变换(即差分格式的 Jacobi 矩阵 $\partial z^{k+1}/\partial z^k$ 是辛矩阵),则称此差分格式为辛差分格式.

因此,根据辛矩阵的定义可知

$$\det(M) = |M| = 1,$$

所以其耗散误差为

$$\alpha = 1 - \sqrt{\det(M)} = 0,$$

这就说明了辛算法在计算过程中不会发生耗散现象,能保持系统的辛结构,保证整体性规律的守恒.

实际中,往往更关心时域上数值解精度的高低.Brusa 和 Nigro^[21]给出了谐振子系统

$$\ddot{q} = -\omega^2 q$$

的差分格式的色散量(即 phase lag, 相位误差):

$$\varphi = \omega\tau - \arccos\left(\frac{\text{tr}(\mathbf{M})}{2\sqrt{\det(\mathbf{M})}}\right).$$

通过上式即可计算出算法的相位误差.也可证明,对于 n 阶辛差分格式,其相位精度为 $2n$ 阶.

2 基于相位误差分析的精细辛算法

考虑线性 Hamilton 正则方程:

$$\begin{cases} \frac{dq}{dt} = p, \\ \frac{dp}{dt} = -\omega^2 q. \end{cases} \quad (2)$$

初始条件为

$$q(0) = q_0, p(0) = p_0.$$

其精确解为

$$\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \frac{1}{\omega} \sin(\omega t) \\ -\omega \sin t & \cos(\omega t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix}.$$

2.1 基于相位误差的精细辛算法格式构造

系统(2)的一阶辛差分格式为

$$\begin{pmatrix} q_{k+1} \\ p_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \tau \\ -\omega^2 \tau & 1 - \omega^2 \tau^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_k \\ p_k \end{pmatrix}, \quad (3)$$

式中 τ 为时间步长, q_k 为 t_k 时刻 q 的计算值, p_k 为 t_k 时刻 p 的计算值.

定理 1 从 (q_k, p_k) 到 (q_{k+1}, p_{k+1}) 的格式变为

$$\begin{pmatrix} q_{k+1} \\ p_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\tau}{2^N} \\ -\omega^2 \frac{\tau}{2^N} & 1 - \omega^2 \left(\frac{\tau}{2^N}\right)^2 \end{pmatrix}^{2^N} \begin{pmatrix} q_k \\ p_k \end{pmatrix}, \quad (4)$$

该格式是辛格式,并称为基于相位误差的精细辛算法.

证明 首先,将时间步长 τ 划分为 2^N (N 为自然数)段,根据辛格式(4)在小段

$\left[k + \frac{j}{2^N} \tau, k + \frac{j+1}{2^N} \tau\right]$ ($j = 0, \dots, 2^N - 1$) 上系统(2)的一阶辛差分格式为

$$\begin{pmatrix} q_{k+(j+1)\tau/2^N} \\ p_{k+(j+1)\tau/2^N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\tau}{2^N} \\ -\omega^2 \frac{\tau}{2^N} & 1 - \omega^2 \left(\frac{\tau}{2^N}\right)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{k+j\tau/2^N} \\ p_{k+j\tau/2^N} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

在每一小段上的传递矩阵均为

$$\mathbf{M}_{\tau/2^N} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\tau}{2^N} \\ -\omega^2 \frac{\tau}{2^N} & 1 - \omega^2 \left(\frac{\tau}{2^N}\right)^2 \end{pmatrix}.$$

因其是辛差分格式,故有

$$\mathbf{M}_{\tau/2^N}^T \mathbf{J} \mathbf{M}_{\tau/2^N} = \mathbf{J}.$$

格式(3)是由格式(5)组合而成的,即

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} q_{k+1} \\ p_{k+1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & \frac{\tau}{2^N} \\ -\omega^2 \frac{\tau}{2^N} & 1 - \omega^2 \left(\frac{\tau}{2^N}\right)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{k+(2^N-1)\tau/2^N} \\ p_{k+(2^N-1)\tau/2^N} \end{pmatrix} = \\ & \begin{pmatrix} 1 & \frac{\tau}{2^N} \\ -\omega^2 \frac{\tau}{2^N} & 1 - \omega^2 \left(\frac{\tau}{2^N}\right)^2 \end{pmatrix}^{2^2} \begin{pmatrix} q_{k+(2^N-2)\tau/2^N} \\ p_{k+(2^N-2)\tau/2^N} \end{pmatrix} = \\ & \begin{pmatrix} 1 & \frac{\tau}{2^N} \\ -\omega^2 \frac{\tau}{2^N} & 1 - \omega^2 \left(\frac{\tau}{2^N}\right)^2 \end{pmatrix}^{2^N} \begin{pmatrix} q_k \\ p_k \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

其传递矩阵为

$$\mathbf{M}_\tau = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\tau}{2^N} \\ -\omega^2 \frac{\tau}{2^N} & 1 - \omega^2 \left(\frac{\tau}{2^N}\right)^2 \end{pmatrix}^{2^N}. \quad (6)$$

因此

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_\tau^T \mathbf{J} \mathbf{M}_\tau &= [(\mathbf{M}_{\tau/2^N})^{2^N}]^T \mathbf{J} [(\mathbf{M}_{\tau/2^N})^{2^N}] = \\ & [(\mathbf{M}_{\tau/2^N}) \cdots (\mathbf{M}_{\tau/2^N})]^T \mathbf{J} [(\mathbf{M}_{\tau/2^N}) \cdots (\mathbf{M}_{\tau/2^N})] = \\ & (\mathbf{M}_{\tau/2^N})^T \cdots [(\mathbf{M}_{\tau/2^N})^T \mathbf{J} (\mathbf{M}_{\tau/2^N})] \cdots (\mathbf{M}_{\tau/2^N}) = \\ & (\mathbf{M}_{\tau/2^N})^T \mathbf{J} (\mathbf{M}_{\tau/2^N}) = \mathbf{J}. \end{aligned}$$

即 \mathbf{M}_τ 是辛矩阵,故格式(4)为辛格式. \square

此格式的耗散误差为零 ($\det(\mathbf{M}_\tau) = 1$).因此,此精细辛算法在长时间计算过程中能保持原有 Hamilton 系统的辛结构.

2.2 程序实现

传递矩阵(6)又可记为

$$\mathbf{M}_\tau = (\mathbf{E} + \mathbf{B})^{2^N},$$

这里

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\tau}{2^N} \\ -\omega^2 \frac{\tau}{2^N} & -\omega^2 \left(\frac{\tau}{2^N}\right)^2 \end{pmatrix}.$$

在传递矩阵 \mathbf{M}_τ 的计算过程中采用精细算法:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_\tau &= (\mathbf{E} + \mathbf{B})^{2^N} = (\mathbf{E} + \mathbf{B})^{2^{N-1}} (\mathbf{E} + \mathbf{B})^{2^{N-1}} = \\ & (\mathbf{E} + \mathbf{B}) \cdots (\mathbf{E} + \mathbf{B}), \end{aligned}$$

而 $(E + B)(E + B) = E + 2B + B \cdot B$. 从而计算机上的算法实现为

```
for  i = 1:N
    B = B * B + 2 * B
end
M = E + B.
```

2.3 相位误差分析

定理 2 格式(5)具有 2 阶相位精度.

证明 根据格式(5)可以得到

$$\text{tr}(\mathbf{M}_{\tau/2^N}) = 2 - \frac{(\omega\tau)^2}{2^N},$$

再根据相位误差的公式,得到

$$\cos(\omega\tau/2^N) - \frac{\text{tr}(\mathbf{M}_{\tau/2^N})}{2} = o(\tau^4).$$

因此,格式(5)具有 2 阶相位精度. □

定理 3 设 N 为精细参数,当 N 趋近于 $+\infty$ 时,此精细辛算法的相位误差趋于零.

证明 精细辛算法的传递矩阵又可转化为

$$\mathbf{M} = \left(\mathbf{E} + \frac{1}{2^N} \mathbf{C} \right)^{2^N},$$

这里

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & \tau \\ -\omega^2\tau & -\frac{\omega^2\tau^2}{2^N} \end{pmatrix}.$$

若时间步长 τ 的划分越来越细,即 $N \rightarrow +\infty$, 则 $\frac{1}{2^N} \mathbf{C} \rightarrow \mathbf{0}$,

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \mathbf{M}_\tau = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(\mathbf{E} + \frac{1}{2^N} \mathbf{C} \right)^{2^N} = e^{\mathbf{C}}.$$

因此,精细辛算法的相位精度就取决于 $e^{\mathbf{C}}$ 中 \mathbf{C} 的特征值.

根据特征方程,可以得出特征值为

$$\lambda = -\frac{\omega^2\tau^2}{2^{N+1}} \pm i\omega\tau \sqrt{1 - \frac{\omega^2\tau^2}{2^{2N-2}}},$$

即

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \lambda = \pm i\omega\tau.$$

因此,根据相位误差的公式,可得

$$\varphi = \omega\tau - \omega\tau = 0.$$

即当时间的划分越来越细时,其相位精度(色散误差)几乎可以趋于零. □

因此,本文所设计的精细辛算法既能满足 Hamilton 系统辛结构的要求,又能大幅度提高辛算法的相位精度.这样,时域上解的精度就能大幅度提高,并且在长时间计算过程中结果不失真.

3 数值算例

例 1 考虑简谐振子系统

$$\begin{cases} \frac{dq}{dt} = p, \\ \frac{dp}{dt} = -4q, \end{cases} \quad t > 0$$

$$q(0) = 0, p(0) = 1,$$

的精确解:

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(2t) & \frac{1}{2} \sin(2t) \\ -2\sin(2t) & \cos(2t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(2t) \\ -2\sin(2t) \end{pmatrix}.$$

1) 相图

取时间步长 $\tau = 0.1$, 精细常数 $N = 1$, 经过 100 步的计算后, 各种算法的相图如图 1 所示.

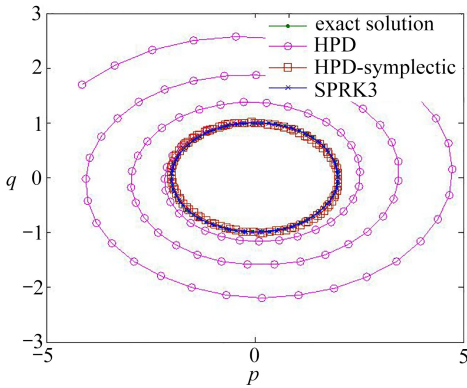


图 1 各种算法关于谐振子系统的相图
Fig. 1 The phase diagram

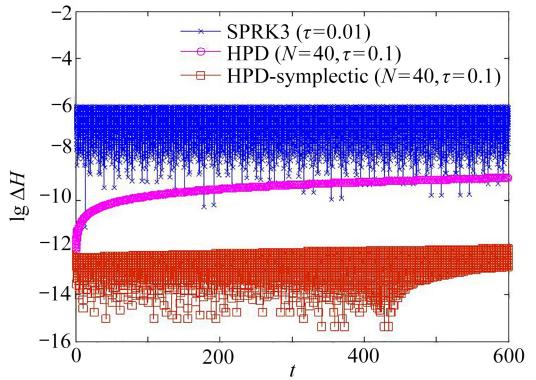


图 2 Hamilton 函数的计算图
Fig. 2 The Hamiltonian function diagram

从图 1 中可以看出, 精细辛算法、三阶辛算法 (SPRK3 算法) 的相图与精确解的相图完全吻合, 说明了这些算法能保持 Hamilton 系统的辛结构, 同时也从数值算例上证实了精细辛算法是辛算法. 另外, 精细算法 (HPD) 并不是辛算法, 当精细参数比较小时, 它不能保持系统的辛结构.

2) Hamilton 函数

$$H(q, p) = q^2 + p^2 = 1.$$

分别采用精细辛算法 (时间步长 $\tau = 0.1$)、精细积分法 (时间步长 $\tau = 0.1$) 和三阶辛算法 (时间步长 $\tau = 0.01$) 计算 Hamilton 函数, 其结果如图 2 所示, 纵坐标 $\Delta H = |H - H_{\text{compute}}|$. 从图 2 中可以看出, 精细辛算法比精细算法至少高 3 个精度, 比三阶辛算法高 6 个精度.

3) 时域上解的精度

取时间步长 $\tau = 0.1$, 常用精细常数 $N = 20$, 观察 p 在时域上的绝对误差 (图 3). 从图 3 中可以看出, 精细辛算法比三阶辛算法至少高 5 个精度. 精细辛算法有了辛结构的保证, 比一般的精细算法高 9 个精度, 数值精度在长期的计算过程中得到了保证.

当精细常数 $N = 40$ 时, 计算 q 的误差 (图 4), 精细辛算法的计算精度非常高, 已经基本上

达到了计算机的计算精度。

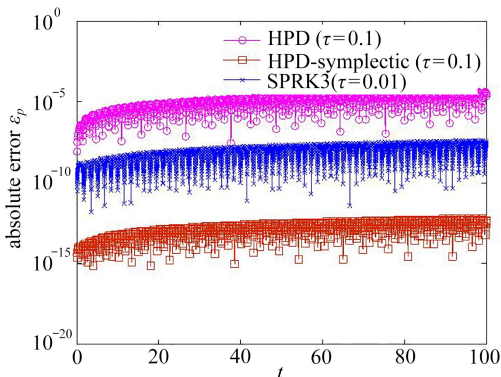


图 3 关于 p 的绝对误差

Fig. 3 The absolute error of p

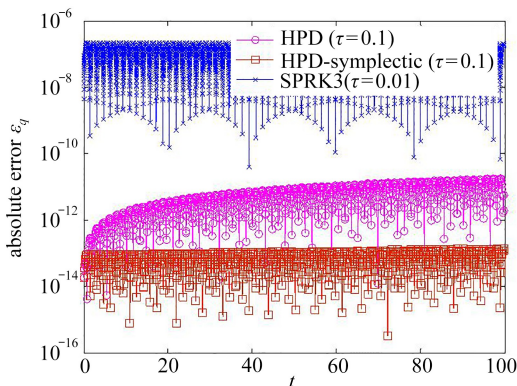


图 4 关于 q 的绝对误差

Fig. 4 The absolute error of q

例 2 对于高低混频系统,文献[22]指出数值方法的步长和系统频率之间必须满足 CFL 条件,即 $hw \approx 1$.这意味着对于高频信号的仿真,数值上必须采用极小的步长。

考虑 Hamilton 函数:

$$H(p_1, q_1, p_2, q_2) = \frac{1}{2} \left(50p_1^2 + \frac{1}{50}p_2^2 + 200q_1^2 + \frac{4}{50}q_2^2 \right),$$

正则方程组为

$$\begin{cases} \frac{dp_1}{dt} = -200q_1, \\ \frac{dp_2}{dt} = -\frac{4}{50}q_2, \\ \frac{dq_1}{dt} = 50p_1, \\ \frac{dq_2}{dt} = \frac{1}{50}p_2. \end{cases}$$

其初值为

$$p_1(0) = 2, p_2(0) = 2, q_1(0) = 0, q_2(0) = 0.$$

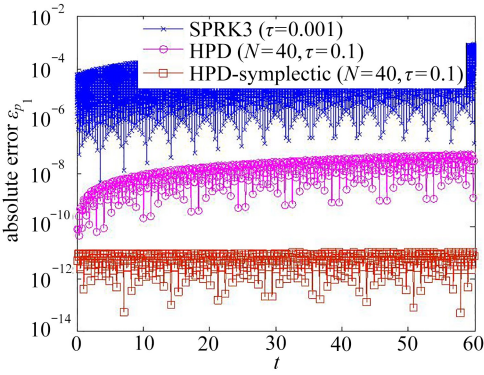
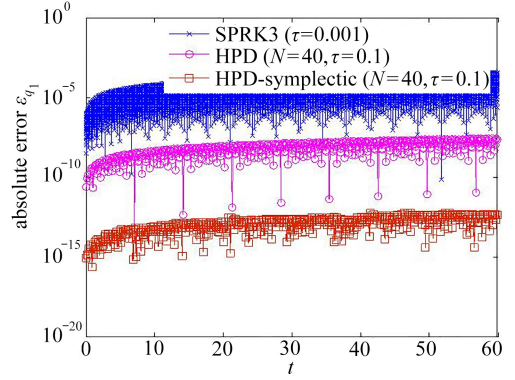
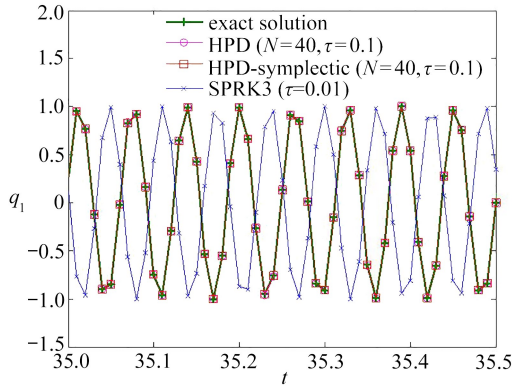
解析解为

$$\begin{cases} q_1 = \sin(100t), \\ q_2 = \sin(t/25), \\ p_1 = 2\cos(100t), \\ p_2 = 2\cos(t/25). \end{cases}$$

数值结果分别从高频系统、低频系统、Hamilton 函数、计算时间 4 个方面去探讨分析。

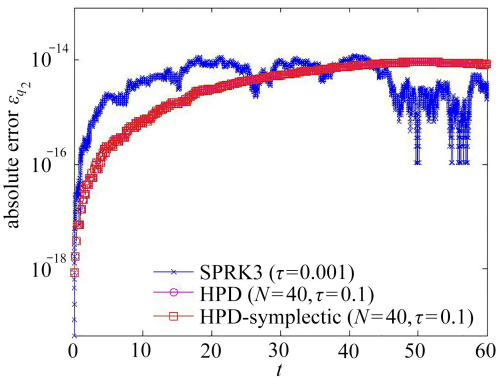
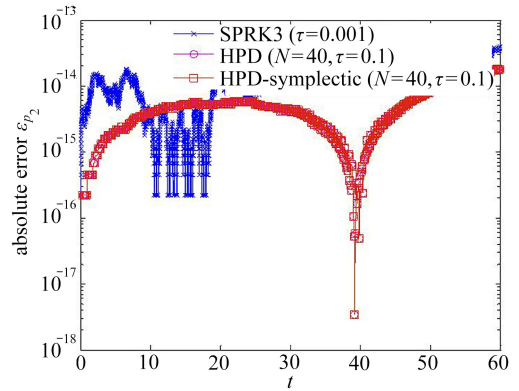
1) 高频系统

从图 5 中可看出,精细辛算法在大步长下,对高频信号仿真的精度达到 10^{-11} ,比常规精细积分法高 4~5 个精度,比三阶辛格式高 6 个精度。图 6 计算了 q_1 的误差,精细辛算法的计算精度非常高。图 7 展示了在计算 35 s 后,由于相位误差的存在,三阶辛算法在时域上已经完全颠倒,图像严重失真。而精细辛算法数值解的结果与精确解基本上吻合。

图 5 关于 p_1 的绝对误差Fig. 5 The absolute error of p_1 图 6 关于 q_1 的绝对误差Fig. 6 The absolute error of q_1 图 7 q_1 的数值结果Fig. 7 The result of q_1

2) 低频系统

从图 8、图 9 中可看出,对于低频信号,几种算法的精度都非常高,几乎达到了计算机的精度 10^{-14} 。

图 8 关于 q_2 的绝对误差Fig. 8 The absolute error of q_2 图 9 关于 p_2 的绝对误差Fig. 9 The absolute error of p_2

3) Hamilton 函数

从表 1 中可以看出,随着精细参数 N 的不断增大,Hamilton 函数的误差不断减小,尤其是精细辛算法,由于辛算法的保证,即使在步长比较大 ($\tau = 0.1$),精细参数比较小 ($N = 10$) 的情况下,也能保证 Hamilton 函数的守恒,达到 10^{-3} .当精细参数 $N = 40$ 时,Hamilton 函数的精度达到 10^{-12} .

从表 2 可以看出,三阶辛算法在步长比较大 ($\tau = 0.1$) 的情况下是无法计算的,只有步长非常小 ($\tau = 0.001$) 的情况下,才能计算得比较好,Hamilton 函数的精度只达到了 10^{-5} .这说明精细辛算法优于常规辛算法和精细算法.

表 1 不同精细参数下 Hamilton 函数的相对误差 ($\tau = 0.1$)

Table 1 The relative errors of the Hamiltonian function for different parameters ($\tau = 0.1$)

t/s	5	10	50	100
HPD ($N = 10$)	1.168 5E+2	1.578 9E+4	1.452 8E+21	2.3279E+42
HPD ($N = 20$)	0.004 7	0.009 5	0.048 7	0.099 9
HPD ($N = 40$)	4.45E-9	9.00E-9	4.537E-8	9.082E-8
HPD-symplectic ($N = 10$)	8E-4	3.5E-3	3.5E-3	2.1E-3
HPD-symplectic ($N = 20$)	8.39E-7	3.408E-6	3.549E-6	2.407E-6
HPD-symplectic ($N = 40$)	8.35E-13	3.179E-12	3.027E-12	3.007E-12

表 2 三阶辛算法在不同步长下 Hamilton 函数的相对误差

Table 2 The relative errors of the Hamiltonian function for different steps by SPRK3

t/s	5	10	50	100
SPRK3 ($\tau = 0.1$)	inf	-	-	-
SPRK3 ($\tau = 0.01$)	7.5E-3	2.41E-2	9.9E-3	2.19E-2
SPRK3 ($\tau = 0.001$)	1.928E-5	2.678E-5	4.07E-6	1.135E-5

4) 计算时间

从表 3 中可以看出,随着精细参数 N 的增加,计算时间的增加非常少,而随着三阶辛算法步长变小,计算时间却增加非常多.这说明精细辛算法在基本不增加工作量的前提下,能大幅度提高数值精度.

表 3 各种算法计算 100 s 所需的 CPU 时间

Table 3 The CPU time for computing

method	t/s
HPD-symplectic ($N = 20$)	0.228
HPD-symplectic ($N = 40$)	0.264
SPRK3 ($\tau = 0.01$)	1.897
SPRK3 ($\tau = 0.001$)	146.924

例 3 上述两个系统均为线性 Hamilton 系统,下面以 Kepler 二体问题为例阐述精细辛算法计算非线性 Hamilton 系统的效能:

$$\begin{cases} \frac{dq_1}{dt} = p_1, & \frac{dp_1}{dt} = -\frac{q_1}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}, \\ \frac{dq_2}{dt} = p_2, & \frac{dp_2}{dt} = -\frac{q_2}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}. \end{cases}$$

若初始值选椭圆轨道的偏心率 $e = 0$, 则此问题的精确解为

$$\begin{cases} q_1 = -\cos t, p_1 = \sin t, \\ q_2 = \sin t, p_2 = \cos t. \end{cases}$$

计算过程中采用局部线性化处理的方法,使得每一步长内的传递矩阵为常数矩阵,并且这一矩阵为辛矩阵.其数值结果分别从相图、时域上解的精度、精细参数的选择 3 个方面去探讨.

1) 相图

取精细参数 $N = 10$, 时间步长 $\tau = 0.1$, 经过 1 000 s 的计算以后, 各种算法的相图如图 10 所示.

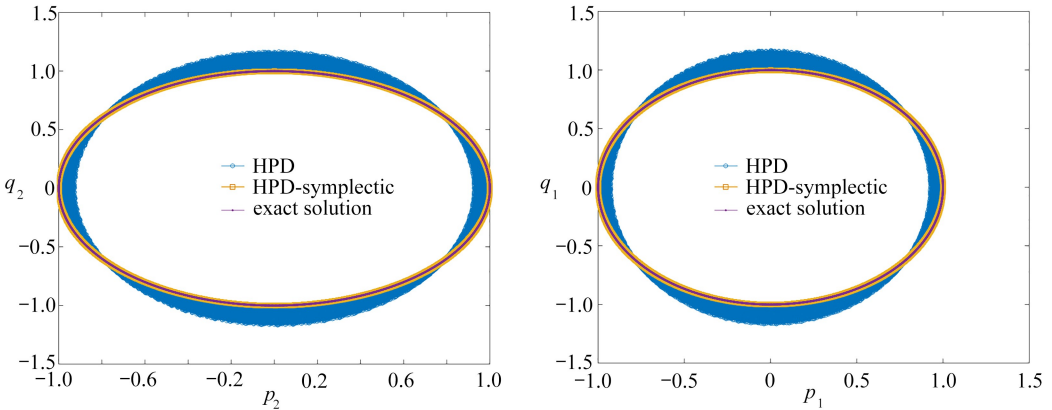


图 10 关于 (p_2, q_2) 和 (p_1, q_1) 的轨道图

Fig. 10 The phase diagrams of (p_2, q_2) and (p_1, q_1)

从图 10 中可以看出,虽然此系统是非线性的 Hamilton 系统,但是精细辛算法的相图与精确解的相图完全吻合,说明了此精细辛算法仍能保持 Hamilton 系统的辛结构.但是,精细算法并不是辛算法,不能保持系统的辛结构,且随时间的推移,误差具有放大的趋势,使得结果失真.

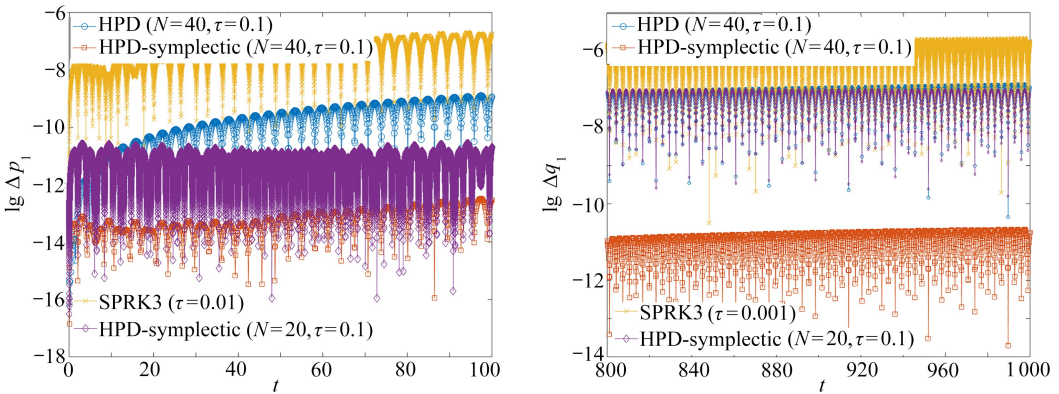


图 11 各种算法关于 (p_1, q_1) 的绝对误差

Fig. 11 The absolute errors of (p_1, q_1)

2) 时域上解的精度

图 11 中,纵坐标 $\lg(\Delta p_1) = \lg(|p_1 - \hat{p}_1|)$, $\lg(\Delta q_1) = \lg(|q_1 - \hat{q}_1|)$,其中 p_1, q_1 是精确解,

\hat{p}_1, \hat{q}_1 是数值解.从图 11 和表 4、表 5 中可以看出,大步长的精细辛算法比小步长的三阶辛算法高 3~5 个精度,而常规的精细算法与三阶辛算法计算结果相差不大.

表 4 各种算法关于 p_2 的相对误差Table 4 The relative errors of p_2 for different parameters

t/s	50	100	500	1 000
SPRK3 ($\tau = 0.01$)	3.293E-8	1.330E-7	5.479E-7	3.169E-6
HPD ($N = 40, \tau = 0.1$)	9.650E-11	8.069E-10	1.799E-8	2.004E-7
HPD-symplectic ($N = 20, \tau = 0.1$)	1.232E-8	2.784E-8	2.510E-8	6.971E-8
HPD-symplectic ($N = 40, \tau = 0.1$)	2.474E-14	2.024E-13	5.302E-13	3.151E-11

表 5 各种算法关于 q_2 的相对误差Table 5 The relative errors of q_2 for different parameters

t/s	50	100	500	1 000
SPRK3 ($\tau = 0.01$)	3.986E-7	3.697E-7	1.930E-6	1.467E-6
HPD ($N = 40, \tau = 0.1$)	1.253E-9	2.332E-9	6.431E-8	9.258E-8
HPD-symplectic ($N = 20, \tau = 0.1$)	3.419E-7	1.619E-7	1.797E-7	6.468E-8
HPD-symplectic ($N = 40, \tau = 0.1$)	4.591E-13	6.569E-13	1.822E-12	1.453E-11

3) 精细参数的选择

图 12 中,纵坐标 $\lg(\varepsilon_{\max}) = \lg(\max_{1 \leq i \leq m} |p_{1,i} - \hat{p}_{1,i}|)$, 其中 $p_{1,i}$ 是 p_1 在 $i \cdot \tau$ 处的精确解, $\hat{p}_{1,i}$ 是 p_1 在 $i \cdot \tau$ 处的数值解, $m = 100$ 为最大步数.从图中可以看出,随着精细参数 N 的增大和步长 τ 的减小,数值精度得到了极大的提高.当精细参数 N 从 1 增加到 20 时,数值结果提高了 6 个精度,从 20 增加到 40 时,再一次提高了 8 个精度. $N = 40$ 后,数值精度并没有得到明显的提高.另外,在相同的精细参数 N 下,步长增大为 50 倍,数值结果只减少了 1 个精度,说明步长对精度影响并不大,当 $N = 40$ 时,其精度也可达到 $O(10^{-13})$.因此,在数值计算过程中可选取大步长,精细参数 $N = 40$.

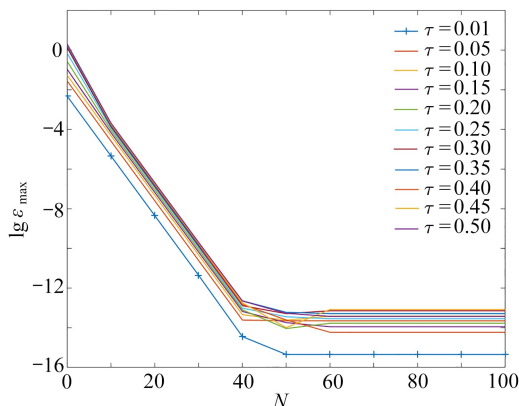


图 12 数值精度随精细参数和时间步长的变化

Fig. 12 The changes of numerical precision with parameters and time steps

3 结 论

精细辛算法继承了辛算法在求解 Hamilton 系统中保辛的特性,同时精细化时间步长后,在不增加原有计算量的前提下,极大地减少了相位误差,使其时域上解的精度几乎达到了计算

机的精度.数值结果令人满意,说明该方法的有效性,具有广泛的工程实践价值.

致谢 本文作者衷心感谢上海第二工业大学应用数学重点学科(XXKPY1604)对本文的资助.

参考文献(References):

- [1] FENG K. Difference schemes for Hamiltonian formalism and symplectic geometry[J]. *Journal of Computational Mathematics*, 1986, **4**(3): 279-289.
- [2] GÖRTZ P. Backward error analysis of symplectic integrators for linear separable Hamiltonian systems[J]. *Journal of Computational Mathematics*, 2002, **20**(5): 449-460.
- [3] 邢誉峰, 杨蓉. 单步辛算法的相位误差分析及修正[J]. 力学学报, 2007, **39**(5): 668-671. (XING Yufeng, YANG Rong. Phase errors and their correction in symplectic implicit single-step algorithm[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2007, **39**(5): 668-671. (in Chinese))
- [4] MONOVASILIS T, KALOGIRATOU Z, SIMOS T E. Symplectic partitioned Runge-Kutta methods with minimal phase-lag[J]. *Computer Physics Communications*, 2010, **181**(7): 1251-1254.
- [5] SIMOS T E. A two-step method with vanished phase-lag and its first two derivatives for the numerical solution of the Schrödinger equation [J]. *Journal of Mathematical Chemistry*, 2011, **49**(10): 2486-2518.
- [6] MONOVASILIS T, KALOGIRATOU Z, SIMOS T E. Two new phase-fitted symplectic partitioned Runge-Kutta methods[J]. *International Journal of Modern Physics C*, 2011, **22**(12): 1343-1355.
- [7] 陈璐, 王雨顺. 保结构算法的相位误差分析及其修正[J]. 计算数学, 2014, **36**(3): 271-290. (CHEN Lu, WANG Yushun. Phase error analysis and correction of structure preserving algorithms[J]. *Mathematica Numerica Sinica*, 2014, **36**(3): 271-290. (in Chinese))
- [8] VYVER H V D. A symplectic Runge-Kutta-Nystrom method with minimal phase-lag[J]. *Physics Letters A*, 2007, **367**(1/2): 16-24.
- [9] MONOVASILIS Th, KALOGIRATOU Z, SIMOS T E. Exponentially fitted symplectic Runge-Kutta-Nyström methods[J]. *Applied Mathematics & Information Sciences*, 2013, **7**(1): 81-85.
- [10] 刘晓梅, 周钢, 王永泓, 等. 辛算法的纠飘研究[J]. 北京航空航天大学学报, 2013, **39**(1): 22-26. (LIU Xiaomei, ZHOU Gang, WANG Yonghong, et al. Rectifying drifts of symplectic algorithm[J]. *Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics*, 2013, **39**(1): 22-26. (in Chinese))
- [11] MONOVASILIS Th. Symplectic partitioned Runge-Kutta methods with the phase-lag property [J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2012, **218**(18): 9075-9084.
- [12] XI X P, SIMOS T E. A new high algebraic order four stages symmetric two-step method with vanished phase-lag and its first and second derivatives for the numerical solution of the Schrödinger equation and related problems[J]. *Journal of Mathematical Chemistry*, 2016, **54**(7): 1417-1439.
- [13] 朱帅, 周钢, 刘晓梅, 等. 精细辛有限元方法及其相位误差研究[J]. 力学学报, 2016, **48**(2): 399-405. (ZHU Shuai, ZHOU Gang, LIU Xiaomei, et al. Precise symplectic time finite element

- method and the study of phase error[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2016, **48**(2): 399-405.(in Chinese))
- [14] 钟万勰. 结构动力方程的精细时程积分法[J]. 大连理工大学学报, 1994, **37**(2): 131-136. (ZHONG Wanxie. On precise time-integration method for structural dynamics[J]. *Journal of Dalian University of Technology*, 1994, **37**(2): 131-136.(in Chinese))
- [15] 钟万勰, 吴峰, 孙雁, 等. 保辛水波动力学[J]. 应用数学和力学, 2018, **39**(8): 855-874. (ZHONG Wanxie, WU Feng, SUN Yan, et al. Symplectic water wave dynamics[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2018, **39**(8): 855-874.(in Chinese))
- [16] 富明慧, 李勇息. 求解病态线性方程组的预处理精细积分法[J]. 应用数学和力学, 2018, **39**(4): 462-469.(FU Minghui, LI Yongxi. A preconditioned precise integration method for solving ill-conditioned linear equations[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2018, **39**(4): 462-469.(in Chinese))
- [17] HUANG Y A, DENG Z C, YAO L X. An improved symplectic precise integration method for analysis of the rotating rigid-flexible coupled system[J]. *Journal of Sound and Vibration*, 2007, **299**(1/2): 229-246.
- [18] 曾进, 周钢. 精细辛算法[J]. 上海交通大学学报, 1997, **31**(9): 31-33. (ZENG Jin, ZHOU Gang. Precise symplectic algorithm[J]. *Journal of Shanghai Jiaotong University*, 1997, **31**(9): 31-33.(in Chinese))
- [19] 黄永安, 尹周平, 邓子辰, 等. 多体动力学的几何积分方法研究进展[J]. 力学进展, 2009, **39**(1): 44-57.(HUANG Yongan, YIN Zhouping, DENG Zicheng, et al. Progress in geometric integration method for multibody dynamics[J]. *Advances in Mechanics*, 2009, **39**(1): 44-57.(in Chinese))
- [20] 徐明毅, 张勇传. 精细辛算法的高效格式和简化计算[J]. 力学与实践, 2005, **27**(1): 55-57. (XU Mingyi, ZHANG Yongchuan. Efficient format and simple computation of precise symplectic integration method[J]. *Mechanics in Engineering*, 2005, **27**(1): 55-57.(in Chinese))
- [21] BRUSA L, NIGRO L. A one-step method for direct integration of structural dynamic equations [J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1980, **15**(5): 685-699.
- [22] DAVID C, ERNST H, LUBICH C. Numerical energy conservation for multi-frequency oscillatory differential equations[J]. *BIT Numerical Mathematics*, 2005, **45**(2): 287-305.

A Highly Precise Symplectic Direct Integration Method Based on Phase Errors for Hamiltonian Systems

LIU Xiaomei¹, ZHOU Gang², ZHU Shuai³

(1. School of Science, College of Arts and Sciences, Shanghai Polytechnic University, Shanghai 201209, P.R.China;

2. School of Mathematical Sciences, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, P.R.China;

3. School of Mechanical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, P.R.China)

Abstract: Symplectic methods, including the generating function method, the symplectic Runge-Kutta (RK) method, the symplectic partitioned Runge-Kutta method, the multi-step method and so on, are applicable to Hamiltonian systems. They can preserve the symplectic structure in the phase space and the laws of the Hamiltonian system. But in the time domain, due to phase lags in the computing course, the RK methods and the symplectic methods have the same algebraic precision under the same algebraic order of schemes. After longtime computing, the numerical precision goes worse and worse in the time domain. To improve the precision, a new method combining the highly precise direct integration method with the symplectic difference scheme, called the HPD-symplectic method, was proposed. This method, proved to be symplectic, can preserve the symplectic structure. Moreover, the HPD-symplectic method can largely decrease the phase error in the time domain, and accordingly, improve the numerical precision even up to an error level of 10^{-13} . For systems with mixed frequencies or rigid systems, the traditional symplectic methods can hardly work well, while the HPD-symplectic method can simulate the signals at both high and low frequencies well with large time steps but no additional computation cost. The results of numerical examples demonstrate the reliability and effectiveness of the proposed method.

Key words: symplectic algorithm; phase error; structure preservation; Hamiltonian system; highly precise direct integration method

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China(50876066)

引用本文/Cite this paper:

刘晓梅, 周钢, 朱帅. Hamilton 系统下基于相位误差的精细辛算法[J]. 应用数学和力学, 2019, 40(6): 595-608.

LIU Xiaomei, ZHOU Gang, ZHU Shuai. A highly precise symplectic direct integration method based on phase errors for Hamiltonian systems[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2019, 40(6): 595-608.