应用简报

如何求解隐式辛格式*

李 旺 尧
（中国科学院计算中心）

HOW TO SOLVE IMPLICIT SYMPLECTIC SCHEMES

Li Wang yao
(Computer Center, Academia Sinica)

Abstract

It is shown that the simple iterative methods are available and efficient for solving implicit symplectic schemes. The numerical test supports this conclusion.

一、前　　言

求解 Hamilton 系统的辛格式一般都是隐式的，仅对可分的 Hamilton 系统和线性 Hamilton 系统存在显式辛格式[1,2,3]。

应用隐式辛格式求解 Hamilton 系统时，每一个积分步都必须求解一个非线性方程组，如何经济而有效的求解非线性方程组是一个必须解决的问题。

一般而言，求解非线性方程组是一个困难和复杂的问题，但我们面对的仅仅是在常微分方程数值积分中出现的非线性方程组，这使问题大大简化和易于解决。首先微分方程的右函数总是有非常好的光滑性质，数值方法总有简单的解析形式，进而当积分步长较小时解的先前时刻的值总是为解的后继值提供一个良好的初值，这些保证了可以应用通常的叠代方法。牛顿法有较快的收敛速度、算法简明，习惯上人们总喜欢采用，但应用牛顿法原则上每次叠代都需求出 Jacobi 阵和求逆，当微分方程组维数 N 增大以后工作量将是 $O(N^3)$，这是一个令人生畏的数字。

二、应用简单叠代法求解隐式辛格式

不失一般性，为简单起见我们仅讨论用梯形公式（对于线性 Hamilton 系统是辛格

* 1992 年 11 月11日收到。

式）$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}(f_{n+1}-f_n)$ 求解 Hamilton 系统 $\dot{z}=JH_z$，其中

$$\dot{z}=\begin{pmatrix}\dot{p}\\ \dot{q}\end{pmatrix},\ J=\begin{pmatrix}0 & -I_n\\ I_n & 0\end{pmatrix},\ H_z=\begin{pmatrix}\frac{\partial H}{\partial p}\\ \frac{\partial H}{\partial q}\end{pmatrix},$$

可简记成 $\dot{z}=f(z)$。

应用梯形公式有

$$z_{n+1}=z_n+\frac{h}{2}(f(z_{n+1})+f(z_n))=\frac{h}{2}f(z_{n+1})+z_n+\frac{h}{2}f(z_n).$$

采用简单叠代法得出（下式上标表叠代指数）

$$z_{n+1}^{(i+1)}=\frac{h}{2}f(z_{n+1}^{(i)})+z_n+\frac{hf(z_n)}{2},\tag{1}$$

$$z_{n+1}^{(i)}=\frac{h}{2}f(z_{n+1}^{(i-1)})+z_n+\frac{hf(z_n)}{2}.\tag{2}$$

(1)—(2)得出

$$z_{n+1}^{(i+1)}-z_{n+1}^{(i)}=\frac{h}{2}(f(z_{n+1}^{(i)})-f(z_{n+1}^{(i-1)}))=\frac{h}{2}\frac{\partial f}{\partial z}(z_{n+1}^{(i)}-z_{n+1}^{(i-1)})$$

$$\Rightarrow\frac{z_{n+1}^{(i+1)}-z_{n+1}^{(i)}}{z_{n+1}^{(i)}-z_{n+1}^{(i-1)}}=\frac{h}{2}\frac{\partial f}{\partial z}.$$

由此看出若 $h\frac{\partial f}{\partial z}$ 有较小的值，简单叠代就会有较快的收敛速度．再一次强调指出，我们的目的是求出有意义的 Hamilton 系统的数值解，因而首先要求 $\left|h\frac{\partial f}{\partial z}\right|<10^{-n}$（精确度要求），一般情况下 $n=1$ 或 2 是起码的精度要求，绝不过份，这样一来一次叠代以后精度就会提高一个或 2 个数量级，加之有较好的初值，若使叠代达到 6 位精度，叠代次数将是很小的．因此简单叠代是可行的、经济的．下面的数值结果支持这个结论．

三、数值例证

四个算例都是典型的 Hamilton 系统，采用梯形公式积分．隐式方程采用简单叠代．计算记录下积分步长 $h, h\lambda$ 和达到相对误差为 10^{-6} 时所用的叠代次数 N。

例 1．线性谐振子

$$H=\frac{1}{2}(p^2+4q^2),$$

微分方程

$$\begin{cases}\dot{p}=-4q,\\ \dot{q}=p.\end{cases}$$

右函数 Jacobi 阵的特征值 $|\lambda|=2$，

$$h = 0.05,\ h\lambda = 0.1,\ N = 3 - 4,$$
$$h = 0.005,\ h\lambda = 0.01,\ N = 1 - 2.$$

例 2. 非线性谐振子 $H = \frac{1}{2}\left(p^2 + 4q^2 + \frac{4}{3}q^4\right)$,

微分方程

$$\begin{cases} \dot{p} = -4q - \frac{8}{3}q^3, \\ \dot{q} = p. \end{cases}$$

右函数 Jacobi 阵的特征值 $\lambda = \pm 2\sqrt{1 + 2q^2}\,i$,

当 $q = 0 - 0.5$ 时(实算结果) $|\lambda| \in [2, 2.5)$,

$$h = 0.04,\ h\lambda \approx 0.1,\ N = 3 - 4,$$
$$h = 0.005,\ h\lambda \approx 0.0125,\ N = 1 - 2.$$

例 3. 惠更斯卵形线 $H = p^2 - q^2 + q^4$,

微分方程

$$\begin{cases} \dot{p} = 2q - 4q^3, \\ \dot{q} = p. \end{cases}$$

右函数 Jacobi 阵的特征值 $\lambda = \pm\sqrt{2 - 12q}$,

当 q 的取值范围是[0.1, 1]时 $|\lambda| \in (0.9, 3.16)$,

$$h = 0.03,\ h\lambda \approx 0.1,\ N = 2 - 4,$$
$$h = 0.003,\ h\lambda \approx 0.01,\ N = 1 - 2.$$

例 4. 卡西尼卵形线 $H = (p^2 + q^2)^2 - (p^2 - q^2)$,

微分方程

$$\begin{cases} \dot{p} = -4q\left(p^2 + q^2 + \frac{1}{2}\right), \\ \dot{q} = 4p\left(p^2 + q^2 - \frac{1}{2}.\right). \end{cases}$$

右函数 Jacobi 阵的特征值 $\lambda = \pm 4\sqrt{\frac{1}{4} + (q^2 - p^2) - 3(p^2 + q^2)^2}$.

当 $p = 0.5$, $q = 0.4$ 时(计算采用的初值) $|\lambda| \approx 3.2$,

$$h = 0.033334,\ h\lambda \approx 0.1,\ N = 3 - 6,$$
$$h = 0.0033334,\ h\lambda \approx 0.01,\ N = 1 - 2.$$

四、结　语

我们推荐采用简单叠代法来求解隐式辛格式.这是一个行之有效的非常经济的选择，同时可用监测叠代次数来粗略的估计是否满足精度的基本要求．还需要说明的是简单叠代法仅适用于用辛格式求解 Hamilton 系统．对于 stiff 问题由于相应于系统最大特征值的分量在暂态以后衰减不再影响解的精度即不应该再约束步长 h 的选取，此时步长 h

往往要求按精度限制同小特征值选配。这样将使简单叠代不收敛或是收敛得很慢。因而求解 stiff 方程时还需要采用牛顿法。

参 考 文 献

[1] Feng Kang, The Hamiltonian way for Computing Hamiltonian dynamics Applied and Industrial Mathematics, 1991, 17—35.

[2] Qin Meng-zhao, Wang dao-liu, Zhang Mei-qing, Explicit symplectic difference schemes for separable Hamiltonian systems, Joarnal of Computational Mathematics, 9: 3 (1991) 211—221.

[3] Li Wang-yao, Symplectic multistep methods for Linear Hamiltonian Systems (to appear).