

# 两个三阶最优化力梯度辛积分器的对称组合<sup>\*</sup>

李 荣 伍 歆<sup>†</sup>

(南昌大学理学院, 南昌 330031)

(2010 年 3 月 1 日收到; 2010 年 3 月 19 日收到修改稿)

利用已存在的三阶最优化力梯度辛格式以对称组合方法获得两个新的四阶力梯度辛积分器. 它们在求解摄动 Kepler 混沌问题的能量精度和一维定态 Schrödinger 方程的能量本征值精度方面比 Forest-Ruth 四阶非力梯度辛积分器要好得多, 甚至还要明显优越于已有的四阶最优化力梯度辛积分器.

**关键词:** 辛积分器, 摄动 Kepler 问题, 混沌, 能量本征值

**PACC:** 4610, 4660D, 0540

## 1. 引 言

20 世纪 80 年代初期, 冯康<sup>[1]</sup>和 Ruth<sup>[2]</sup>分别独立建立了求解 Hamilton 函数不需要分解的隐式辛积分器和 Hamilton 函数需分解为动能和势能两可积部分的显式辛积分器. 辛积分器(或辛格式)因具有保能量和辛结构的优点已成为研究 Hamilton 系统长期定性演化的最佳积分工具, 并在经典力学、分子动力学<sup>[3]</sup>、量子力学<sup>[4-6]</sup>、等离子体<sup>[7]</sup>和太阳系动力学等领域得到迅猛发展和广泛应用.

广泛流行的显式辛积分器是以动能和势能所对应的 Lie 算子的指数积所构成的一系列组合, 例如 Forest-Ruth 四阶辛格式<sup>[8]</sup>以及 Yoshida 高阶辛积分器<sup>[9]</sup>. 特别是 Wisdom 和 Holman<sup>[10]</sup>将太阳系  $n$  体问题的 Hamilton 函数分解为 Kepler 主要部分和行星之间相互作用两可积部分, 亦即用所谓的 Hamilton 函数摄动分解来代替其动能和势能分解显著提高了辛积分器的效率与精度, 尤其是辛校正<sup>[11]</sup>的实施更进一步优化了辛积分器. 在摄动分解的基础上膺高阶(pseudo-high-order)辛积分器<sup>[12]</sup>也是高效的积分方法. 另一方面, Ruth<sup>[2]</sup>在其首次提出辛积分器思想时将力梯度算子加入势能所对应的 Lie 算子中, 构造了一个三阶力梯度辛格式. Suzuki<sup>[13]</sup>讨论了这种力梯度辛积分器, 指出二阶以上的非力梯度辛积分器中各子步总有一些不可避免地使用负

步长, 但力梯度辛积分器却可以. Chin 等<sup>[14-18]</sup>把力梯度辛积分器发展到四阶并认为这种全为正步长的力梯度辛积分器对求解某些不可逆量子系统是有利的, 还利用四阶力梯度辛积分器求解圆形限制三体问题<sup>[14]</sup>. Omelyan 等<sup>[19,20]</sup>提出了高阶力梯度辛积分器并讨论其在天体力学、分子动力学和量子力学等领域中的应用, 还指出四阶以上的力梯度辛积分器中总有一些子步不得不采用负步长. 近来文献[21]将建立在 Hamilton 函数具有动能和势能分解的力梯度辛积分器推广到 Hamilton 函数具有摄动分解的情形. 一个值得注意的问题是, 当确定一个辛积分器所需要的系数数目多于某个阶条件数目时, 能够构造无数个同阶辛格式. 如果考虑以截断误差项各系数的平方和最小作为附加条件就得到所谓的最优化辛积分器. 二、三和四阶最优化非力梯度辛积分器能够在文献[22]中找到, 而四阶最优化力梯度辛积分器<sup>[19,20]</sup>也早已存在, 但三阶最优化力梯度辛积分器<sup>[23]</sup>仅在近期提出. 一般来说最优化的辛积分器比相应没有优化的辛积分器明显具有精度优势.

考虑到文献[23]近期提出的三阶最优化力梯度辛积分器具有较好的精度优势, 本文的主要目的在于将其以对称组合方式构造新的四阶力梯度辛格式并着重考察新的格式, 尤其是与四阶最优化力梯度辛积分器<sup>[19,20]</sup>相比是否具有精度优势.

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 10873007)和江西省教育厅科技基金(批准号: GJJ09072)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: xwu@ncu.edu.cn

(9)

## 2. 两个四阶力梯度辛积分器的构造

考虑可分解为动能  $T = T(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \sum_i p_i^2$  和势能  $V = V(\mathbf{q}) = V(q_i)$  两部分的 Hamilton 函数

$$H = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}), \quad (1)$$

具有正则运动方程

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial T(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}, \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial V(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (2)$$

分别以  $A$  和  $B$  约定  $T$  和  $V$  的 Lie 导数(算子)为

$$\begin{aligned} A &= \{, T\} = \sum_i p_i \frac{\partial}{\partial q_i}, \\ B &= \{, V\} = \sum_i f_i \frac{\partial}{\partial p_i}. \end{aligned}$$

这里  $\{, \}$  是 Poisson 括号, 而  $f_i = -\partial V / \partial q_i$  是力  $\mathbf{f}$  的第  $i$  个分量. 此外, 规定互易子  $[A, B] = AB - BA$  且  $[A, B, A] = [A, [B, A]]$  等. 易知力梯度算子<sup>[21]</sup>

$$\begin{aligned} C &= [B, A, B] \\ &= \{, \{ \{ V, T \}, V \} \} \\ &= 2 \sum_{i,j,k=1}^3 V_{ij} V_k T_{jk} \frac{\partial}{\partial p_i} \\ &= 2 \sum_{i,j=1}^3 f_j \frac{\partial f_i}{\partial q_j} \frac{\partial}{\partial p_i} \\ &= \sum_{i=1}^3 \nabla_i |\mathbf{f}|^2 \frac{\partial}{\partial p_i}, \end{aligned} \quad (3)$$

其中  $V_k = \partial V / \partial q_k$ ,  $V_{ij} = \partial^2 V / \partial q_i \partial q_j$ ,  $T_{jk} = \partial^2 T / \partial p_j \partial p_k$ . 文献广泛流行由  $A$  和  $B$  的指数算子复合组成的一系列高阶辛积分器<sup>[8-10,12,22]</sup>, 然而  $C$  加入  $B$  中再与  $A$  的指数算子也能复合组成相应高阶辛积分器, 也就是所谓的力梯度辛积分器<sup>[14-21]</sup>. 它形如

$$\begin{aligned} \exp(W) &= \prod_i \exp(a_i \tau A) \\ &\quad \times \exp(b_i \tau B + c_i \tau C), \end{aligned} \quad (4)$$

其中  $\tau$  为步长, 而  $a_i, b_i$  和  $c_i$  是由特定的阶所确定的系数. 反复使用 Baker-Campell-Hausdorff (BCH) 公式<sup>[24]</sup>, 有形式幂级数

$$W = \Delta_1 \tau + \Delta_2 \tau^2 + \Delta_3 \tau^3 + \Delta_4 \tau^4 + \dots \quad (5)$$

上式中  $\Delta_j (j = 1, 2, \dots)$  各表为

$$\Delta_1 = \alpha_1 A + \alpha_2 B, \quad (6)$$

$$\Delta_2 = \beta [A, B], \quad (7)$$

$$\Delta_3 = \gamma_1 [A, B, A] + \gamma_2 [B, A, B], \quad (8)$$

$$\Delta_4 = \delta_1 [A, A, B, A] + \delta_2 [A, B, A, B].$$

此处不会出现  $[B, B, A, B]$  项是因为它恒等于零. 另外,  $\alpha_1, \alpha_2$  与  $\beta$  等均为  $a_i, b_i$  和  $c_i$  的函数.

若想方程(4)成为一个三阶格式, 则须使  $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$  且  $\beta = \gamma_1 = \gamma_2 = 0$ . 这就是三阶辛格式所满足的条件, 称为三阶条件. 显然, 当系数  $a_i, b_i$  和  $c_i$  个数超过 5 时可以构造无数个三阶力梯度辛格式. 文献<sup>[23]</sup>考虑了以四阶误差项系数  $\delta_1$  与  $\delta_2$  的平方和  $\delta = \delta_1^2 + \delta_2^2$  最小作为附加条件给出了两个三阶最优化辛格式. 即  $ABA(B+C)A$  型格式 A1 为,

$$\begin{aligned} &\exp(a_1 \tau A) \times \exp(b_1 \tau B) \times \exp(a_2 \tau A) \\ &\quad \times \exp(b_2 \tau B + c_2 \tau^3 C) \times \exp(a_3 \tau A), \end{aligned} \quad (10)$$

其中  $a_1 = 0.17270717029761$ ,  $a_2 = 0.58190681989921$ ,  $a_3 = 0.24538600980318$ ,  $b_1 = 0.43755113617833$ ,  $b_2 = 0.56244886382167$  与  $c_2 = 0.01172965730361$ .  $BABA(B+C)$  型格式 A2 为

$$\begin{aligned} &\exp(\bar{b}_1 \tau B) \times \exp(\bar{a}_2 \tau A) \times \exp(\bar{b}_2 \tau B) \\ &\quad \times \exp(\bar{a}_3 \tau A) \times \exp(\bar{b}_3 \tau B + \bar{c}_3 \tau^3 C), \end{aligned} \quad (11)$$

其系数为  $\bar{a}_2 = 0.60482187531038$ ,  $\bar{a}_3 = 0.39517812468962$ ,  $\bar{b}_1 = 0.22443677474275$ ,  $\bar{b}_2 = 0.69731396562925$ ,  $\bar{b}_3 = 0.07824925962800$  和  $\bar{c}_3 = 0.01644283046910$ . 这两个格式由非对称 Lie 算子组合而成, 数值验证其精度比不含力梯度三阶最优化辛积分器和含力梯度三阶辛积分器的要好得多, 甚至还要明显优于不含力梯度的 Forest-Ruth 四阶辛积分器<sup>[8]</sup>.

由于对称算子的组合必会在形式幂级数(5)中不出现含  $\tau$  的偶次幂项, 亦即  $W$  形如

$$W = \Delta_1 \tau + \Delta_3 \tau^3 + \Delta_5 \tau^5 + \dots \quad (12)$$

可以看出由组合算子(4)能够得到偶数阶辛积分器. 由此想到, 如果将上面得到的力梯度辛积分器有关算子  $A$  和  $B$  的系数减为原来的一半, 然后两端按对称的形式连接起来, 再根据四阶条件确定力梯度算子的系数就可以得到由三阶最优化力梯度辛格式对称组合而取得四阶力梯度辛格式. 它们分别记为 M1 和 M2, 其表达式为

$$\begin{aligned} \text{M1: } &\exp\left(\frac{a_1}{2} \tau A\right) \times \exp\left(\frac{b_1}{2} \tau B\right) \times \exp\left(\frac{a_2}{2} \tau A\right) \\ &\quad \times \exp\left(\frac{b_2}{2} \tau B + k \tau^3 C\right) \times \exp(a_3 \tau A) \\ &\quad \times \exp\left(\frac{b_2}{2} \tau B + k \tau^3 C\right) \times \exp\left(\frac{a_2}{2} \tau A\right) \end{aligned}$$

$$\times \exp\left(\frac{b_1}{2}\tau B\right) \times \exp\left(\frac{a_1}{2}\tau A\right), \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \text{M2: } & \exp\left(\frac{\bar{b}_1}{2}\tau B\right) \times \exp\left(\frac{\bar{a}_2}{2}\tau A\right) \times \exp\left(\frac{\bar{b}_2}{2}\tau B\right) \\ & \times \exp\left(\frac{\bar{a}_3}{2}\tau A\right) \times \exp(\bar{b}_3\tau B + l\tau^3 C) \\ & \times \exp\left(\frac{\bar{a}_3}{2}\tau A\right) \times \exp\left(\frac{\bar{b}_2}{2}\tau B\right) \times \exp\left(\frac{\bar{a}_2}{2}\tau A\right) \\ & \times \exp\left(\frac{\bar{b}_1}{2}\tau B\right), \quad (14) \end{aligned}$$

其中  $k = 0.00146620732296$ ,  $l = 0.00411070761728$ .

为了后面讨论的需要, 这里列出 Forest-Ruth 四阶非力梯度辛积分器<sup>[8]</sup>

$$\begin{aligned} \text{M3: } & \exp\left(\frac{\tau}{2c}A\right) \times \exp\left(\frac{\tau}{c}B\right) \times \exp\left(\frac{1-s}{2c}\tau A\right) \\ & \times \exp\left(\frac{-s}{c}\tau B\right) \times \exp\left(\frac{1-s}{2c}\tau A\right) \times \exp\left(\frac{\tau}{c}B\right) \\ & \times \exp\left(\frac{\tau}{2c}A\right), \quad (15) \end{aligned}$$

其中  $s = 2^{1/3}$ ,  $c = 2 - s$ , 以及四阶最优化力梯度辛积分器<sup>[19]</sup>

$$\begin{aligned} \text{M4: } & \exp\left(\frac{\tau}{6}B - \frac{17\tau^3}{18000}C\right) \times \exp\left(\frac{\tau}{2}A\right) \\ & \times \exp\left(\frac{2\tau}{3}B + \frac{71\tau^3}{4500}C\right) \times \exp\left(\frac{\tau}{2}A\right) \\ & \times \exp\left(\frac{\tau}{6}B - \frac{17\tau^3}{18000}C\right). \quad (16) \end{aligned}$$

下面重点数值比较新的四阶辛格式 M1 和 M2 与已有方法 M3 及 M4 的性能.

### 3. 数值模拟与比较

下面主要应用新构造的两个辛格式模拟经典和量子力学有关问题并与四阶最优化力梯度辛积分器 M4 等已有方法进行对比来考察其数值效果.

#### 3.1. 经典力学问题模拟

由于天体对外的引力场在零阶近似下看做质量集中于质心的质点所产生的引力场, 所以两天体的运动问题就可以近似视为两质点在 Newton 引力作用下的运动问题, 即二体问题模型. 当天体有形状时就转化为摄动二体问题, 例如下面的 Hamilton 量<sup>[25]</sup>

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) - \frac{1}{r} - \frac{\varepsilon}{2r^3}\left(1 - 3\frac{q_x^2}{r^2}\right), \quad (17)$$

其中  $r = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ , 而  $p_x$  和  $p_y$  分别为坐标  $q_x$  和  $q_y$  所对应的动量, 且  $\varepsilon$  为摄动小参数(特别地当  $\varepsilon = 0$  时为纯二体问题), 动能部分  $T = (p_x^2 + p_y^2)/2$ , 势能部分  $V(q_x, q_y) = -1/r - \varepsilon(1 - 3q_x^2/r^2)/(2r^3)$ .

以算法 M1 为例说明其应用于该模型所得从  $s - 1$  步到  $s$  步的离散差分格式

$$\begin{aligned} q_{x1} &= q_{xs-1} + \frac{a_1}{2}\tau p_{xs-1}, \\ q_{y1} &= q_{ys-1} + \frac{a_1}{2}\tau p_{ys-1}, \\ p_{x1} &= p_{xs-1} + \frac{b_1}{2}\tau f_1(q_{x1}, q_{y1}), \\ p_{y1} &= p_{ys-1} + \frac{b_1}{2}\tau f_2(q_{x1}, q_{y1}), \\ q_{x2} &= q_{x1} + \frac{a_2}{2}\tau p_{x1}, \\ q_{y2} &= q_{y1} + \frac{a_2}{2}\tau p_{y1}, \\ p_{x2} &= p_{x1} + \frac{b_2}{2}\tau f_1(q_{x2}, q_{y2}) + k\tau^3 g_1(q_{x2}, q_{y2}), \\ p_{y2} &= p_{y1} + \frac{b_2}{2}\tau f_2(q_{x2}, q_{y2}) + k\tau^3 g_2(q_{x2}, q_{y2}), \\ q_{x3} &= q_{x2} + a_3\tau p_{x2}, \\ q_{y3} &= q_{y2} + a_3\tau p_{y2}, \\ p_{x3} &= p_{x2} + \frac{b_2}{2}\tau f_1(q_{x3}, q_{y3}) + k\tau^3 g_1(q_{x3}, q_{y3}), \\ p_{y3} &= p_{y2} + \frac{b_2}{2}\tau f_2(q_{x3}, q_{y3}) + k\tau^3 g_2(q_{x3}, q_{y3}), \\ q_{x4} &= q_{x3} + \frac{a_2}{2}\tau p_{x3}, \\ q_{y4} &= q_{y3} + \frac{a_2}{2}\tau p_{y3}, \\ p_{xs} &= p_{x3} + \frac{b_1}{2}\tau f_1(q_{x4}, q_{y4}), \\ p_{ys} &= p_{y3} + \frac{b_1}{2}\tau f_2(q_{x4}, q_{y4}), \\ q_{xs} &= q_{x4} + \frac{a_1}{2}\tau p_{xs}, \\ q_{ys} &= q_{y4} + \frac{a_1}{2}\tau p_{ys}, \quad (18) \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} f_1(x, y) &= -\frac{\partial V(x, y)}{\partial x}, \\ f_2(x, y) &= -\frac{\partial V(x, y)}{\partial y}, \end{aligned}$$

$$g_1(x, y) = \nabla_x |f|^2$$

$$= 2 \left[ f_1(x, y) \frac{\partial f_1(x, y)}{\partial x} + f_2(x, y) \frac{\partial f_2(x, y)}{\partial x} \right],$$

$$g_2(x, y) = \nabla_y |f|^2$$

$$= 2 \left[ f_1(x, y) \frac{\partial f_1(x, y)}{\partial y} + f_2(x, y) \frac{\partial f_2(x, y)}{\partial y} \right].$$

下面分  $\varepsilon = 0$  和  $\varepsilon \neq 0$  两种情况讨论.

### 3.1.1. Kepler 二体问题

当  $\varepsilon = 0$  时, 方程(17)恰为可积的纯 Kepler 二体运动问题. 选择初始条件为  $q_x = 1, q_y = 0, p_x = 0$  和  $p_y = 1$  的 Kepler 轨道并取步长为 0.1257 (即周期的 1/50), 将上述几个辛积分器分别用来求解该问

题. 图 1 是关于各方法的长半径相对误差随时间的变化情况. 事实上这个变化情况反映了能量精度, 表明精度最好的算法是新得到的四阶对称组合的力梯度辛积分器 M1 和 M2, 最差的是四阶非力梯度辛积分器 M3. 而新的对称组合格式 M1 (或 M2) 的精度比 M3 提高四 (或五) 个数量级, 甚至要比最优化力梯度辛积分器 M4 提高两个数量级. 这里我们再次看到两个三阶最优化力梯度辛积分器 A1 和 A2 的精度都要高于四阶非力梯度积分器 M3. 总体来说, 加入力梯度算子  $C$  之后相应误差精度都有了明显的提高.

上面已经验证对于可积的纯二体问题两个新

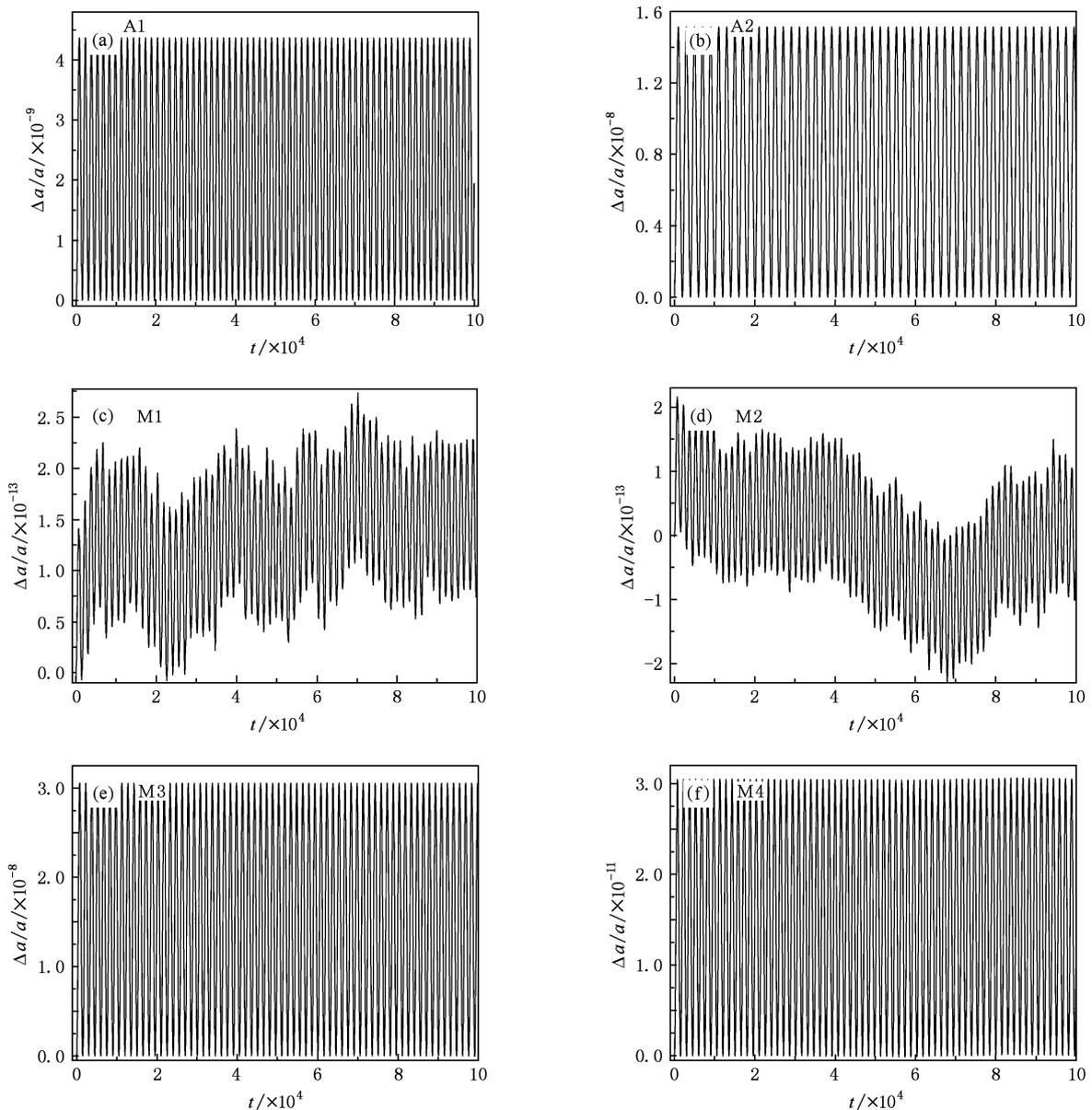


图 1 几个辛积分器求解 Kepler 运动所得轨道长半径  $a$  的相对误差

的对称组合格式具有明显的精度优势. 如果换成不可积甚至混沌的摄动二体问题, 两个新的对称组合格式还能够保持精度优势吗? 下面我们考虑方法 M1—M4 在  $\varepsilon \neq 0$  所对应的摄动二体问题情况.

3.1.2. 摄动二体问题

以  $\varepsilon = 0.001$  为例分别选取一条有序轨道和一条混沌轨道来考察新方法的效果. 为此, 首先固定初始条件  $q_x = 1 - e, q_y = 0$  及  $p_y = \sqrt{(1 + e)/(1 - e)}$ , 其中  $e = 0.2$  是纯二体问题的轨道偏心率. 一旦给定能量, 那么初始动量分量  $p_x > 0$  也就随之确定.

3.1.3. 情形 1 能量  $E = -0.5$

图 2(a) 和 (b) 分别为辛积分器 M1 所提供的该轨道 Poincaré 截面和功率谱. 截面上的 KAM 环和离散功率谱表明这条轨道是有序的. 附带说明其他三个辛积分器也给出了几乎差不多的 Poincaré 截面和功率谱, 但从相对能量误差  $\Delta E/E$  来看四个积分器之间存在较大差异. 从图 3 中可以看出新的对称组合的力梯度辛积分器 M1 和 M2 的精度比最优力梯度辛积分器 M4 提高了 10 倍左右, 但比非力梯度积分器 M3 却提高了近 300 倍.

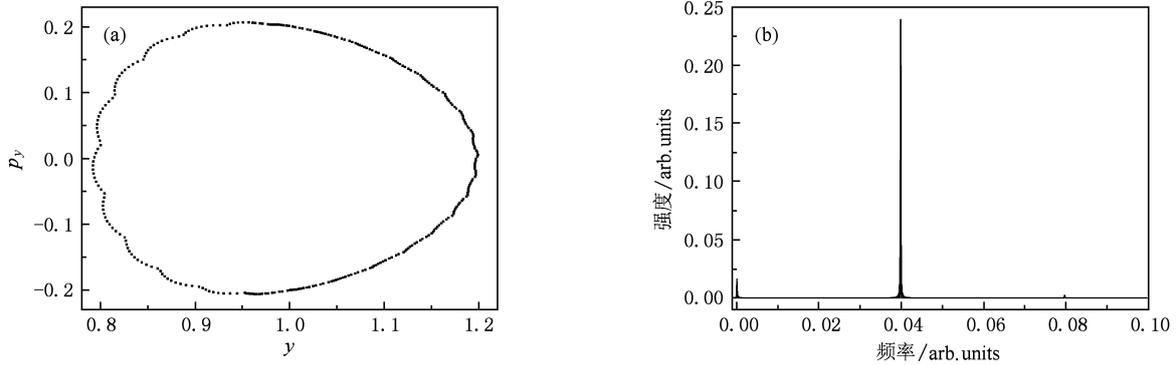


图 2 新对称组合力梯度辛积分器 M1 关于初始轨道  $q_x = 1 - e, q_y = 0, p_y = \sqrt{(1 + e)/(1 - e)}$  及参数  $e = 0.2, \varepsilon = 0.001$  和  $E = -0.5$  所提供的 Poincaré 截面图 (a) 和功率谱图 (b)

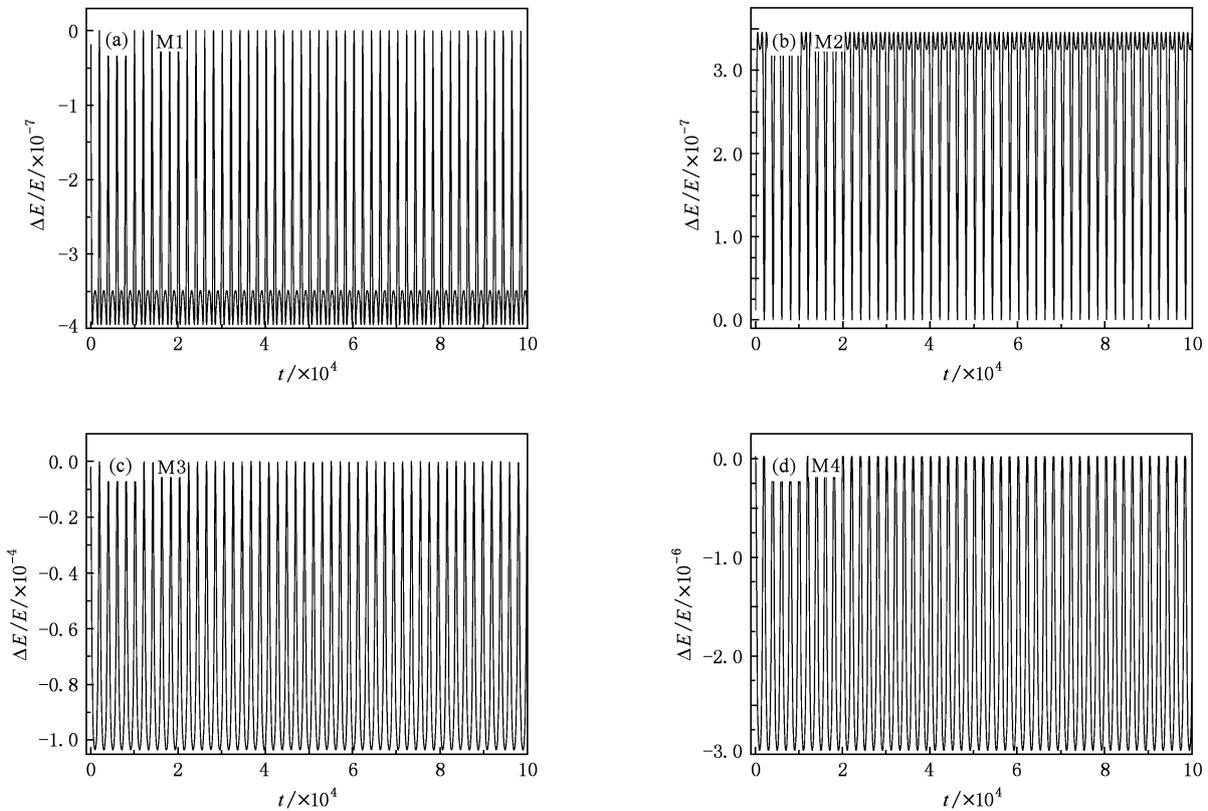


图 3 四个辛积分器关于图 2(a) 轨道的相对能量误差  $\Delta E/E$  (a) M1, (b) M2, (c) M3, (d) M4

### 3.1.4. 情形 2 能量 $E = -0.257$

图 4 中辛积分器 M1 提供了随机离散分布的 Poincaré 截面和连续功率谱,表明该轨道是混沌的. 图 5 的快速 Lyapunov 指标更明显反映了图 4(a) 与图 2(a) 的轨道有完全不同的动力学特征. 图 4 对应的轨道的快速 Lyapunov 指标随时间指数膨胀,这是混沌的特性,而图 2 对应的轨道的快速 Lyapunov 指标随时间线性变化,这是有序轨道的特性. 这里

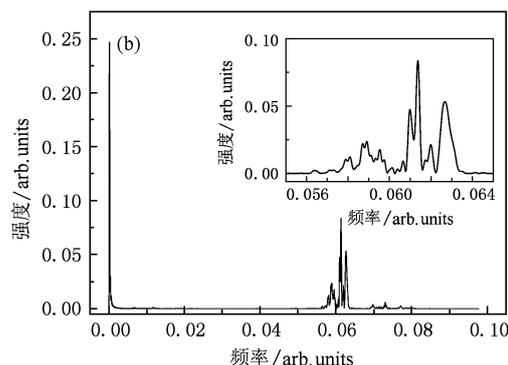
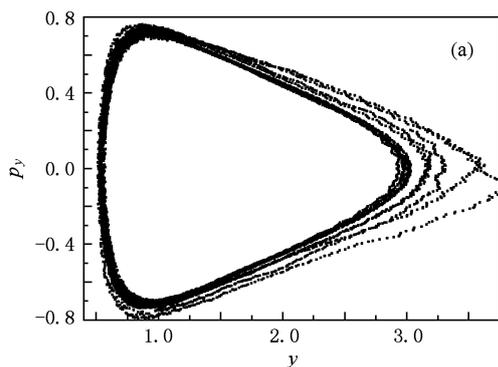


图 4 与图 2 相同但能量  $E = -0.257$  (a) Poincaré 截面图, (b) 功率谱图

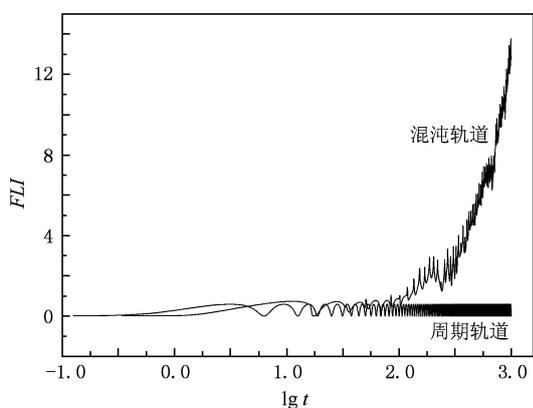


图 5 辛积分器 M1 对图 2 与图 4 中的轨道所提供的快速 Lyapunov 指标

混沌的存在必然加速数值误差的迅速累积,因而必将对辛积分器的数值精度造成深远的影响<sup>[31]</sup>. 图 6 也正好说明了这点. 对比图 6 的混沌轨道和图 3 的有序轨道,可以看出每个辛积分器的能量精度都有显著下降. 尽管如此,新的对称组合格式 M1 和 M2 仍然在能量精度方面显示了巨大的优越性,其精度比四阶非力梯度辛积分器 M3 或四阶最优力梯度辛积分器 M4 提高了三个数量级左右.

对于经典力学模型,以上数值实验已经清晰地

采用的快速 Lyapunov 指标是文献[26]所给出的两邻近轨道的快速 Lyapunov 指标及其算法,其定义为

$$FLI(t) = \lg[d(t)/d_0], \quad (19)$$

其中  $d_0$  和  $d(t)$  分别是初始与  $t$  时刻距离. 这个指标应用方便且比 Lyapunov 指数更灵敏识别混沌,已在文献[27—30]中用来讨论 Newton 和相对论轨道动力学.

表明,新的力梯度辛积分器 M1 与 M2 无论对可积还是不可积(混沌)系统都具有能量精度的优越性. 下面评估它们应用于量子系统的情况.

### 3.2. 量子力学问题模拟

一维不显含时间的 Schrödinger 方程为

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 q}{dx^2} + V(x)q = Eq, \quad (20)$$

其中  $E$  为能量本征值,  $V(x)$  为势函数,  $q$  为波函数,  $x$  是径向坐标. 上式可以改写为

$$\ddot{q} = -\frac{\partial U}{\partial q}, \quad (21)$$

其中  $U(x, q) = \frac{1}{2}B(x)q^2$  而  $B(x) = 2[E - V(x)]$ .

它实际对应如下 Hamilton 量

$$H(q, p; x) = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}B(x)q^2. \quad (22)$$

若将  $x$  看做时间变量, 则此 Hamilton 量便为非自治系统. 此时  $p^2/2$  为形式动能,  $q$  为广义坐标, 而  $U(x, q)$  为形式势函数.

显含时间的 Hamilton 系统采用辛积分器时有几种处理方法. 一种方法就是采用相空间正则扩充<sup>[32]</sup>, 即把时间变量  $x$  看成空间坐标而其对应的正

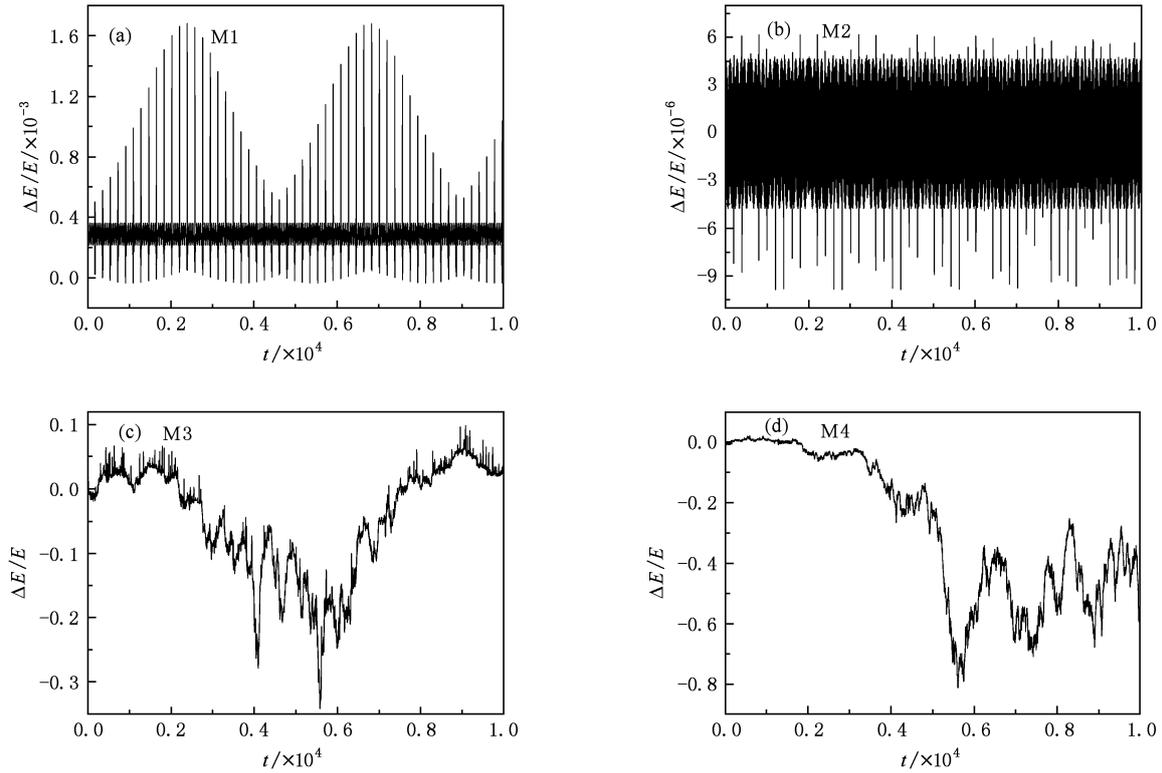


图 6 各辛积分器关于图 4 中的轨道所对应的能量误差 (a) M1, (b) M2, (c) M3, (d) M4

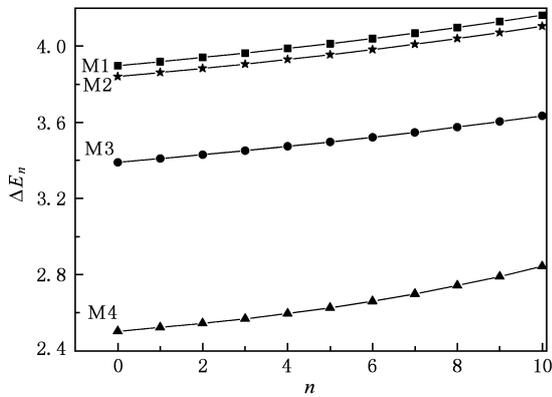


图 7 各辛积分器所得能量本征值相对误差  $\Delta E_n = -\lg |(\tilde{E}_n - E_n)/E_n|$  随能级  $n$  的变化曲线, 其中  $\tilde{E}_n$  和  $E_n$  分别为数值与实际的能量本征值

则动量则为  $p_0 = -H(q, p; x)$ , 这样能够得到一个自治的零 Hamilton  $\Gamma = H(q, p; x) + p_0$ . 另一种方法就是将时间全取为  $s - 1$  步和  $s$  步的中间时刻<sup>[33]</sup>, 即  $x^* = x_{s-1} + \tau/2$ . 当然也有其他处理方法, 如文献 [17] 所介绍的方法. 本文就是采用这种处理方式. 仍以辛积分器 M1 为例说明其应用于该问题的离散差分格式构成特点. 此差分格式从  $s - 1$  步到  $s$  步为

$$\begin{aligned}
 q_1 &= q_{s-1} + \frac{a_1}{2} \tau p_{s-1}, \\
 p_1 &= p_{s-1} + \frac{b_1}{2} \tau f(x + a_1 \tau, q_1), \\
 q_2 &= q_1 + \frac{a_2}{2} \tau p_1, \\
 p_2 &= p_1 + \frac{b_2}{2} \tau f\left(x + \frac{a_2}{2} \tau, q_2\right) + k \tau^3 g\left(x + \frac{a_2}{2} \tau, q_2\right), \\
 q_3 &= q_2 + a_3 \tau p_2, \\
 p_3 &= p_2 + \frac{b_2}{2} \tau f(x + a_3 \tau, q_3) + k \tau^3 g(x + a_3 \tau, q_3), \\
 q_4 &= q_3 + \frac{a_2}{2} \tau p_3, \\
 p_s &= p_3 + \frac{b_1}{2} \tau f\left(x + \frac{a_2}{2} \tau, q_4\right), \\
 q_s &= q_4 + \frac{a_1}{2} \tau p_s,
 \end{aligned} \tag{23}$$

其中

$$\begin{aligned}
 f(x, q) &= -\frac{\partial U(x, q)}{\partial q} = -qB(x), \\
 g(x, q) &= \nabla_q f^2(x, q) = 2qB^2(x).
 \end{aligned}$$

我们采用如下的 Morse 势<sup>[34]</sup>

$$V(x) = D[e^{-2\omega x} - 2e^{-\omega x}], \quad (24)$$

其中  $D = 12$  及  $\omega = 0.204124$ . 这一模型有精确的本征值为

$$E_n = -12 + \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{48} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2$$

$$(n = 0, 1, 2, 3, \dots). \quad (25)$$

现将辛积分器用来求解该一维 Schrödinger 方程的能量本征值问题, 同时也一起考虑使用辛打靶法<sup>[34,35]</sup>和二分法<sup>[36]</sup>. 选取边界条件  $q(\alpha) = q(\beta) = 0$  且  $\alpha = -15.5$ ,  $\beta = 15.5$ , 而步长取为 0.05. 图 7 表明新的对称组合格式 M1 和 M2 在能量本征值精度方面好于四阶最优化力梯度辛积分器 M4 约一个数量级而优于四阶非力梯度辛积分器 M3 近两个数量级.

## 4. 结 论

利用文献[23]给出的两个三阶最优化力梯度辛积分器来构造新的四阶力梯度辛积分器. 其构造方式就是将这两个中的任意一个三阶最优化力梯度辛积分器有关动能和势能所对应 Lie 算子的系数减为原来的一半, 然后两端按对称的形式连接起来, 再根据四阶条件确定力梯度算子的系数. 尽管这种对称组合的四阶力梯度辛积分器增加了几个子步, 但在求解有关经典力学能量精度和一维 Schrödinger 方程的能量本征值精度方面比 Forest-Ruth 四阶非力梯度辛积分器要好得多, 特别是明显优于已有的四阶最优化力梯度辛积分器.

- [1] Feng K 1986 *J. Comput. Math.* **4** 279
- [2] Ruth R D 1983 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-30** 2669
- [3] Chi Y H, Liu X S, Ding P Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6320 (in Chinese) [ 赵玉华、刘学深、丁培柱 2006 物理学报 **55** 6320 ]
- [4] Luo X Y, Liu X S, Ding P Z 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 604 (in Chinese) [ 罗香怡、刘学深、丁培柱 2007 物理学报 **56** 604 ]
- [5] Liu X S, Wei J Y, Ding P Z 2005 *Chin. Phys.* **14** 231
- [6] Bian X B, Qiao H X, Shi T Y 2007 *Chin. Phys.* **16** 1822
- [7] Hu W P, Deng Z C 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3923
- [8] Forest E, Ruth R D 1990 *Physica D* **43** 105
- [9] Yoshida H 1990 *Phys. Lett. A* **150** 262
- [10] Wisdom J, Holman M 1991 *Astron. J.* **102** 1528
- [11] Wisdom J, Holman M, Touma J 1996 *Fields Inst. Commun.* **10** 217
- [12] Chambers J E, Murison M A 2000 *Astron. J.* **119** 425
- [13] Suzuki M 1995 *Phys. Lett. A* **201** 425
- [14] Chin S A 1997 *Phys. Lett. A* **75** 226
- [15] Chin S A, Chen C R 2001 *J. Chem. Phys.* **114** 7338
- [16] Chin S A, Chen C R 2005 *Celest. Mech. Dyn. Astron.* **91** 301
- [17] Chin S A, Anisimov P 2006 *J. Chem. Phys.* **124** 054106
- [18] Chin S A 2007 *Phys. Rev. E* **75** 036701
- [19] Omelyan I P, Mryglod I M, Folk R 2003 *Comput. Phys. Commun.* **151** 272
- [20] Omelyan I P, Mryglod I M, Folk R 2002 *Phys. Rev. E* **66** 026701
- [21] Xu J, Wu X 2010 *Res. Astron. Astrophys.* **10** 173
- [22] McLachlan R I, Atela P 1992 *Nonlinearity* **5** 541
- [23] Li R, Wu X 2010 *Sci. China G* **53** 1600
- [24] Casas F, Murua A 2009 *J. Math. Phys.* **50** 033513
- [25] Blanes S, Casas F, Murua A 2008 *arXiv*: 0812. 0377 [ *math-ph*. NA ]
- [26] Wu X, Huang T Y, Zhang H 2006 *Phys. Rev. D* **74** 083001
- [27] Wu X, Xie Y 2007 *Phys. Rev. D* **76** 124004
- [28] Wu X, Xie Y 2008 *Phys. Rev. D* **77** 103012
- [29] Zhu J F, Wu X, Ma D Z 2007 *Chin. J. Astron. Astrophys.* **7** 601
- [30] Han W B 2008 *Gen. Relat. Gravit.* **40** 1831
- [31] Zhao H J, Du M L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3827 (in Chinese) [ 赵海军、杜孟利 2007 物理学报 **56** 3827 ]
- [32] Mikkola S 1997 *Celest. Mech. Dyn. Astron.* **67** 145
- [33] Tselios K, Simos T E 2003 *J. Math. Chem.* **34** 83
- [34] Liu X S, Ding P Z 2004 *Prog. Phys.* **24** 47 (in Chinese) [ 刘学深、丁培柱 2004 物理学进展 **24** 47 ]
- [35] Liu X S, Zhou Z Y, Ding P Z, Pan S F 2000 *Int. J. Quant. Chem.* **79** 343
- [36] Quarteroni A, Sacco R, Saleri F 2000 *Numerical Mathematics* (Berlin: Springer Science) p254

## A symmetric product of two optimal third-order force gradient symplectic algorithms<sup>\*</sup>

Li Rong Wu Xin<sup>†</sup>

(*School of Science, Nanchang University, Nanchang 330031, China*)

(Received 1 March 2010; revised manuscript received 19 March 2010)

### Abstract

This paper provides two new fourth-order force gradient symplectic integrators, each of which is obtained from a symmetric product of two identified optimal third-order force gradient symplectic algorithms reported in the literature. They are both greatly superior to the fourth-order non-gradient symplectic method of Forest and Ruth in the accuracy of either energy on chaotic perturbed Kepler problems or the energy eigenvalues for one-dimensional Schrödinger equations. So are they to the known optimal fourth-order force gradient symplectic scheme.

**Keywords:** symplectic integrator, perturbed Kepler problem, chaos, energy eigenvalues

**PACC:** 4610, 4660D, 0540

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10873007) and the Science and Technology Foundation of Department of Education of Jiangxi Province, China (Grant No. GJJ09072).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: xwu@ncu.edu.cn