DOI:10.13471/j.cnki.acta.snus.2015.04.002

一种基于加权残值法的高阶辛算法*

陆克浪[1]，富明慧[1]，李纬华[2]，李任飞[1]
（1. 中山大学工学院，广东 广州 510275；
2. 广东技术师范学院机电学院，广东 广州 510635）

摘 要：提出了利用加权残值法构造高阶辛算法的一种新途径。首先根据加权残值法的思想，在时间子域内给出了哈密顿正则方程伽辽金法所对应的积分方程，然后在该时间子域内采用相同的拉氏插值作为位移和动量的试函数，并将这些试函数代入到积分方程中，通过数值积分，将原动力学初值问题转为以插值点位移和动量为未知量的代数方程组。对于非线性问题，给出了一种能显著提高牛顿迭代法计算效率的初值选取方案。最后，对算法的保辛性和性能进行了详细的讨论。通过与同阶辛 RK 法相比较，两种方法精度几乎完全相同，但文中方法更简便，计算量更小。数值算例结果表明该法在计算精度和效率上均具有良好的性能。

关键词：哈密顿系统；加权残值法；非线性动力学；伽辽金法；辛算法
中图分类号：O302 **文献标志码**：A **文章编号**：0529－6579（2015）04－0008－06

A High Order Symplectic Algorithm Based on Weighted Residual Method

LU Kelang[1], *FU Minghui*[1], *LI Weihua*[2], *LI Renfei*[1]
(1. School of Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China;
2. College of Electromechanical Engineering, Guangdong Polytechnic Normal University, Guangzhou 510635, China)

Abstract: A new way to construct high order symplectic algorithms is proposed based on weighted residual method. Firstly, in the time subdomain, the corresponding integral equation of Galerkin method for Hamilton dual equation based on the idea of weighted residual method is proposed, then the generalized displacement and momentum are approximated by the same Lagrange interpolation within the time subdomain, which are substituted into the corresponding integral equation. By numerical integration, the original initial value problem of dynamics is expressed as algebraic equations with displacement and momentum at the interpolation points as unknown variables. For nonlinear dynamic systems, a simple scheme of choosing initial values, which can significantly improve the computational efficiency for Newton-Raphson method, is presented. Finally, the symplecticity and performance of the proposed algorithms are discussed in detail. Compared with the same order symplectic Runge-Kutta methods, the accuracy of the two methods are almost the same, but the proposed algorithms are much simpler and less computational expense. The numerical results illustrate that the proposed algorithms show good performance in accuracy and efficiency.

Key words: Hamilton system; weighted residual method; nonlinear dynamics; Galerkin method; symplectic algorithm

* **收稿日期**：2015－01－06
基金项目：国家自然科学基金资助项目（11172334）；国家自然科学基金青年科学基金资助项目（11202247）；中央高校基本科研业务费专项资金资助项目（2013390003161292）
作者简介：陆克浪（1985 年生），男；**研究方向**：计算固体力学及复合材料结构分析；E-mail：lukelang@mail2.sysu.edu.cn

辛算法在哈密顿系统的数值计算，特别是在长时间数值仿真计算中具有独特的优越性，因而在天体力学[1-2]、多体动力学[3]、分子动力学[4]、量子力学[5-6]、大气科学等领域获得广泛的应用[7]。

构造辛算法主要有两种途径：一种是基于哈密顿对偶方程构造辛算法，比如，辛 RK 法[8]、辛龙格－库塔－奈斯通方法[9]、辛块龙格－库塔法[10]；另一种是通过变分原理构造辛算法，此法简便易行且具有很好的通用性。基于离散的变分原理，Wendlandt 和 Marsden[11]对具有完整约束的系统给出了一种构造保动量的辛算法的通用途径，对保守系统，Marsden 和 West[12]给出了一种保动量的辛算法，Kane 和 Marsden[13]与 Gonzalez 和 Schmidt 等[14]给出了一种既能保能量又保动量的辛算法，高强等[15]通过修正作用量给出了动力学初值问题的一系列保辛算法。上述方法采用的都是哈密顿变分原理或修正的哈密顿变分原理，属于端值型变分原理，须经过一定的技巧才能处理动力学初值问题，因此应用上有不简便之处。为克服这一矛盾，罗恩等[16]给出了一种非传统哈密顿型变分原理，此变分原理完全对应于动力学初值问题，能更方便地应用于构造初值问题的辛算法，在此基础上，黄伟江等[17]和章学军等[18]分别给出弹性梁和深梁动力响应分析的一种辛算法。

本文从另一途径出发，提出了一种基于加权残值法构造高阶辛算法的新途径。首先给出哈密顿正则方程伽辽金法对应的积分公式。然后，结合拉格朗日插值法和高斯积分法，构造出动力学初值问题的一种高阶算法。最后，对算法的保辛性和性能进行了详细的讨论。数值算例结果表明该法在计算精度和效率上均具有良好的性能。

1　基于加权残值法的高阶辛算法

哈密顿系统动力学初值问题所对应的哈密顿正则方程和初始条件为：

$$\begin{cases} \dot{q} = \dfrac{\partial H}{\partial p} = H'_p \\ \dot{p} = -\dfrac{\partial H}{\partial q} = -H'_q \\ q_0 = \bar{q}_0, \quad p_0 = \bar{p}_0 \end{cases} \tag{1}$$

其中，q 和 p 分别为 d 维的广义位移和广义动量向量，H 为哈密顿函数，$\bar{q}_0$ 和 $\bar{p}_0$ 为初始值向量。

在时间域 $[0,\tau]$ 上其对应的加权残值法的积分形式为：

$$\begin{aligned} \int_0^\tau (\dot{q} - H'_p) w_j \mathrm{d}t = 0 \\ \int_0^\tau (\dot{p} + H'_q) w_j \mathrm{d}t = 0 \end{aligned} \quad (j = 1,2,\cdots,m) \tag{2}$$

其中 w_j 是权函数。在伽辽金法中，权函数为试函数。

在时间域，将 q 和 p 均采用满足初始条件的 m 次拉格朗日多项式近似，即

$$q(t) = \sum_{i=0}^{m} l_i(t) q_i, \quad p(t) = \sum_{i=0}^{m} l_i(t) p_i \tag{3}$$

其中 $l_i(t) = \prod_{j=0, j\neq i}^{m} \dfrac{(t - g_j)}{(g_i - g_j)}, (i = 0,1,\cdots,m), g_0 = 0, g_1, \cdots, g_m$ 为插值点，本文中选取其为高斯积分点（理由见下文），q_i 和 p_i 分别是各自相应节点的位移和动量。

将式（3）代入式（2），并根据伽辽金法将权函数取为试函数，可得

$$\begin{aligned} \int_0^\tau (\dot{q} - H'_p) l_j \mathrm{d}t = 0 \\ \int_0^\tau (\dot{p} + H'_q) l_j \mathrm{d}t = 0 \end{aligned} \quad (j = 1,2,\cdots,m) \tag{4}$$

上式即为伽辽金法对应的代数方程组。

对上式中积分采用 m 个积分点的高斯积分法，得

$$\begin{aligned} &\sum_{j=1}^{m} b_j l_k(g_j) \Big(\sum_{i=0}^{m} l_i(g_j) q_i - \\ &H'_p\Big(\sum_{i=0}^{m} l_i(g_j) q_i, \sum_{i=0}^{m} l_i(g_j) p_i \Big) \Big) = 0 \\ &\sum_{j}^{m} b_j l_k(g_j) \Big(\sum_{i=0}^{m} l_i(g_j) p_i + \\ &H'_q\Big(\sum_{i=0}^{m} l_i(g_j) q_i, \sum_{i=0}^{m} l_i(g_j) p_i \Big) \Big) = 0 \end{aligned} \quad (k = 1,2,\cdots,m) \tag{5}$$

其中，b_j 为高斯积分法的权系数。

由拉格朗日插值基函数的性质，有 $l_i(g_j) = \delta_{ij}$，则上式可化简为

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{m} c_{ik} q_i = \tau H'_p(q_k, p_k) \\ \sum_{i=0}^{m} c_{ik} p_i = -\tau H'_q(q_k, p_k) \end{aligned} \quad (k = 1,2,\cdots,m) \tag{6}$$

其中，δ_{ij} 为克罗内克符号，$c_{ik} = \tau \dot{l}_i(g_k)$。值得一提的是，方程也可看成配点法在高斯积分点所对应的代数方程组。

q_0 和 p_0 已知，故上式共有 $2md$ 个方程和 $2md$ 个未知量，这是一组封闭的代数方程组。对于线性

动力系统，上式是线性代数方程组；对于非线性动力系统，上式则是非线性代数方程组。

求解方程组（6），即可得到 $q_i, p_i (i = 1,2,\cdots,m)$。由式（3）即可求得末时刻的状态值 q_τ 和 p_τ，但以下给出求 q_τ 和 p_τ 的方法更为优越。对（1）式积分，有

$$q_\tau = q_0 + \int_0^\tau H'_p \mathrm{d}t, p_\tau = p_0 - \int_0^\tau H'_q \mathrm{d}t \quad (7)$$

同样采用 m 个积分点的高斯积分法，可得

$$q_\tau = q_0 + \tau \sum_{j=1}^{m} b_j H'_p \big|_{t=g_j},$$

$$p_\tau = p_0 - \tau \sum_{j=1}^{m} b_j H'_q \big|_{t=g_j} \quad (8)$$

由上式即可求得 q_τ 和 p_τ。应该指出，辛 RK 法中也采用了同样的公式计算末端值[8]。

本文中，对非线性代数方程组采用牛顿迭代法求解。在迭代初值的选取上，除第一个时间步的初值选取具有一定的任意性外，其余时间步的初值可按上一时间区段的拉氏插值公式外推给出，即按如下公式选取：

$$\bar{q}_j^0 = \sum_{i=0}^{m} l_i(\tau + t_j)\bar{q}_i, \bar{p}_j^0 = \sum_{i=0}^{m} l_i(\tau + t_j)\bar{p}_i$$
$$(j = 1,2,\cdots,m) \quad (9)$$

其中，$\bar{q}_i$ 和 $\bar{p}_i$ 为上一个时间步的 q_i 和 p_i 的值。

这种简单的处理方法，只在初值选取上略微增加了计算量，却可使初值比较接近于解答，从而使迭代次数大幅减少。

2 算法的性能

2.1 算法的保辛性

令 $v = [q^{\mathrm{T}}, p^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}}, F(v) = [H_p{}'^{\mathrm{T}}, -H_q{}'^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}}$，则式（6）和式（8）可表示为

$$\sum_{i=0}^{m} c_{ik} v_i = \tau F(v_k), \quad (k = 1,2,\cdots,m) \quad (10)$$

$$v_\tau = v_0 + \tau \sum_{i=1}^{m} b_i F(v_i) \quad (11)$$

由式（10）和式（11）可求得算法的雅克比（Jacobi）矩阵 $A = \partial v_\tau / \partial v_0$。若满足 $A^{\mathrm{T}} J A = J$（J 为标准辛矩阵），则 A 为辛矩阵，该算法是辛算法。对不同问题可给出 A 的具体表达形式，作者通过大量算例验证了本文方法是辛算法。

2.2 与辛 RK 法的性能比较

下面比较本文算法与同阶辛 RK 法的性能。

m 级 $2m$ 阶辛 RK 法的一般格式如下：

$$v_k = v_0 + \tau \sum_{i=1}^{m} a_{ki} F(v_i), \quad (k = 1,2,\cdots,m) \quad (12)$$

$$v_\tau = v_0 + \tau \sum_{i=1}^{m} b_i F(v_i) \quad (13)$$

本文算法中，式（10）对应的雅克比矩阵，可表示为线性部分与非线性部分之和，其中非线性部分为一子块为 $2d$ 阶子阵的块对角矩阵，如下图形式所示

$$\begin{bmatrix} \tau \dfrac{\partial F_1}{\partial v_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \tau \dfrac{\partial F_m}{\partial v_m} \end{bmatrix}$$

而辛 RK 法中，式（12）对应的雅克比矩阵的非线性部分为满阵。

可以看出，本文算法相对于同阶辛 RK 法具有两点优势：① 对于非线性方程组所对应的雅克比矩阵的非线性部分，本文算法的是块对角矩阵，而辛 RK 法的则为满阵，因此本文算法在牛顿迭代过程中，需要更新的数据更少，计算量更少；② 本文算法非线性方程组对应的分块对角型雅克比矩阵，对于构造更加有效率的迭代算法是十分有益的。

3 数值算例

3.1 摄动单摆问题

考虑摄动单摆问题，其哈密顿函数为 $H = p^2/2 - \cos q(1 - p/6)$，存在 q 和 p 的耦合项，是不可分的哈密顿系统。取初始条件 $q(0) = 1, p(0) = 0.1$，时间步长 $\tau = 0.1$ 和 0.2，在 $0 \sim 100$ s 区间上积分。

本算例首先研究算法的保辛性。对非线性哈密顿系统，本文构造的算法的保辛性可从数值上加以验证。表 1 给出了 m 取不同数值时，A 的具体

表 1 算法保辛性数值验证

Table 1 The numerical validation for symplecticity of the proposed algorithm

	m			
	1	2	3	4
A	$\begin{bmatrix} 0.983\,475 & 0.099\,872\,9 \\ -0.052\,812\,8 & 1.011\,44 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.983\,371 & 0.099\,897\,9 \\ -0.052\,780\,3 & 1.011\,55 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.983\,37 & 0.099\,913\,1 \\ -0.052\,784\,2 & 1.011\,55 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.983\,37 & 0.099\,913\,1 \\ -0.052\,787\,7 & 1.011\,55 \end{bmatrix}$
$A^{\mathrm{T}}JA$	J	J	J	J

形式。可以看出，A 仍然满足 $A^{\mathrm{T}}JA = J$，这也从数值上说明本文算法是保辛的。

下面研究算法的精度。根据文献［19］，算法精度的阶数 r 可通过下式估算

$$r = \log(e_1/e_2)/\log(\tau_1/\tau_2) \tag{14}$$

其中 τ_1，τ_2 为积分步长，e_1，e_2 为相应步长积分结果的误差。

表 2 给出了本文算法精度的阶数 r 随 m 的变化情况。可以看出，算法的精度大致为 $2m$ 阶。

表 2 算法精度的阶数 r 与 m 的对应关系

Table 2　Accuracy order r of the proposed algorithm with different m

	m			
	1	2	3	4
r	1.999 6	4.007 7	6.018 9	8.386 1

接下来研究本文算法的精度与 m 级 $2m$ 阶辛 RK 法精度的比较。当 $m = 1,2,3,4$ 时，本文算法和辛 RK 法分别记为 M2、M4、M6、M8 和 SRK2、SRK4、SRK6 及 SRK8。图 1 给出了在不同 m 下哈密顿函数数值解的相对误差 $e_H = |[H(t) - H(0)]/H(0)|$ 随时间的变化曲线，从图中可以看出，对于相同的 m，两种方法的 e_H 曲线几乎完全重合，这进一步说明了本文方法的精度是 $2m$ 阶的。

最后研究式（14）用于初值估算时，本文算法迭代效率的改善情况。表 3 给出了 M4、M6 方法在 0 ~ 100 s 区间的计算中每步的平均迭代次数。可以看出，采用式（14）进行初值估算时可使每步的迭代次数大幅减少，效率提升可达 40% ~ 50%。

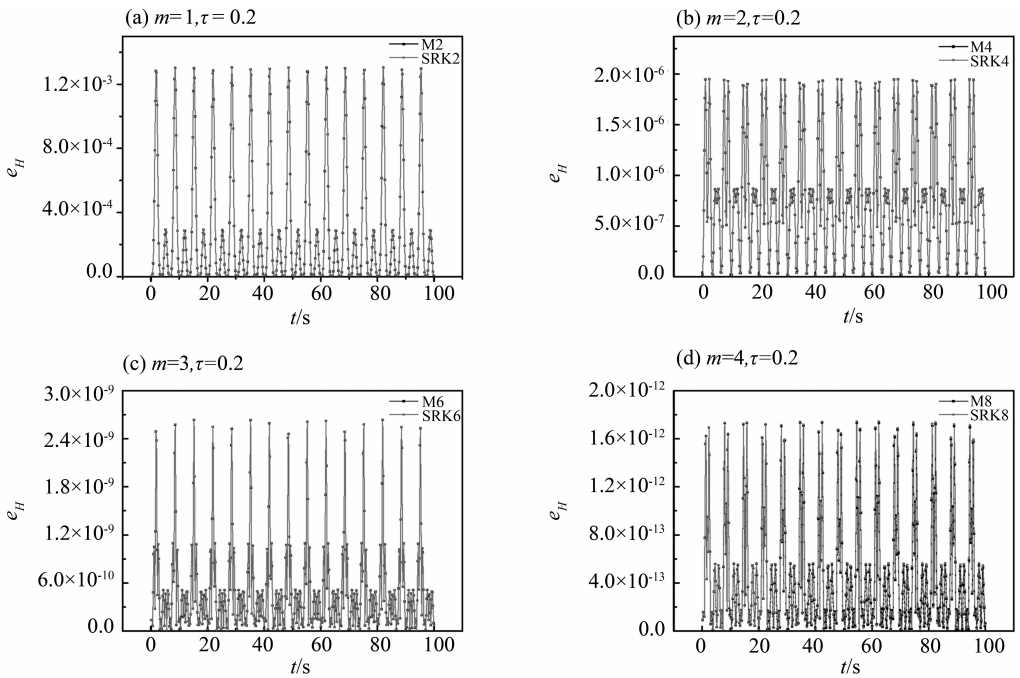


图 1　e_H 随时间 t 的变化曲线

Fig. 1　The error e_H against the time t

表 3　迭代次数/每步

Table 3　Iterations/step

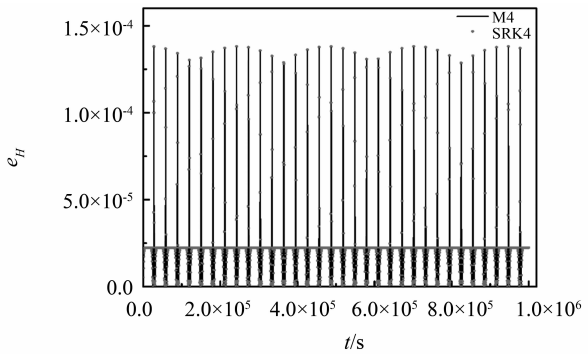
τ	With Eq. (12)		Without Eq. (12)	
	M4	M6	M4	M6
0.01	2.000 2	2.000 2	3.811 0	3.965 8
0.02	2.000 4	2.000 4	3.751 0	3.973 2
0.05	2.001 0	2.001 0	3.548 5	3.962 5
0.1	2.001 0	2.002 0	3.436 0	3.960 0
0.2	2.002 0	2.004 0	3.264 0	3.846 0

3.2　双原子系统经典轨迹问题

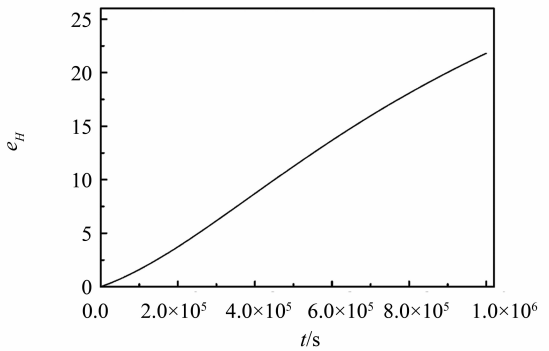
考虑双原子系统在电子势能面上的经典运动，根据文献［20］，其无量纲化的哈密顿函数为 $H = p^2/2 + (e^{-2q} - 2e^{-q})/2$。取初始条件 $q(0) = 0$，$p(0) = \sqrt{1 - 0.02}$，时间步长 $\tau = 0.1$，积分到 10^5 s，采用 M4 法，SRK4 法和 4 阶龙格库塔法（RK4）求解。

图 2 是哈密顿函数数值解的相对误差 e_H 随时间的变化曲线，可以看出 M4 法和 SRK4 法计算的

e_H 几乎一样，均表现出长期保能量的优点，符合辛算法的性质，计算到 $10^5 s$ 时仍保持系统总能量守恒，而 RK4 法的 e_H 则随着时间线性增长。图 3 是三种方法相图的比较，可以看出 M4 法和 SRK4 法计算的相图是一条闭合曲线，说明双原子作周期振动，这与理论和实验结果一致。而 RK4 法给出的相图是具有一定宽度的闭合环，说明数值解出现了明显的人工耗散现象，这也体现出非辛算法的弊端。



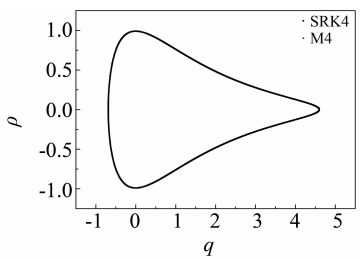
(a) 辛算法M4和SRK4



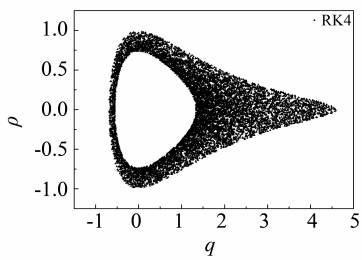
(b) 非辛算法RK4

图 2 e_H 随时间的变化曲线

Fig. 2 The error e_H against the time t



(a) 辛算法M4和SRK4



(b) 非辛算法RK4

图 3 不同数值方法的相图

Fig. 3 The phase diagrams for different methods

4 结 论

1）本文利用加权残值法构造了求解动力学初值问题的通用高阶辛算法。该算法原理简单，便于编程应用。数值研究表明，本文算法具有 $2m$ 阶计算精度。

2）相对于常用的辛 RK 法，本文算法较同阶辛 RK 法形式更简单，计算量更少。

参考文献：

[1] XU J, WU X. Several fourth-order force gradient symplectic algorithms [J]. Research in Astron Astrophys, 2009, 10(2): 173 – 188 .

[2] 钟双英,伍歆. 半隐 Euler 法和隐中点法嵌入混合辛积分器的比较[J]. 物理学报, 2011, 60(9): 104 – 115.

[3] 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.

[4] 匙玉华,刘学深,丁培柱. 啁啾激光场中 HF 分子的经典解离[J]. 物理学报, 2006, 55(12): 6320 – 6325.

[5] BIAN X B, QIAO H X, SHI T Y. Pseudospectral method with algorithm for the solution of time-dependent Schrödinger equations[J]. Chin Phys, 2007, 16 (7): 1822 – 1826

[6] 沈晶,沙威,黄志祥,等. 含时 Schrödinger 方程的高阶辛 FDTD 算法研究[J]. 物理学报, 2012, 61(19): 190202.

[7] 王斌,季仲贞,肖庆农. 大气动力学方程的 Hamilton 算法[J]. 计算物理, 2001, 18(4): 289 – 297.

[8] BUTCHER J C. Implicit runge-kutta processes [J]. Mathematics of Computation, 1964, 18(85): 50 – 64.

（下转第 22 页）

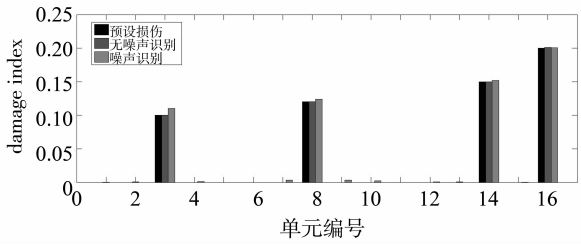


图 9 基于布谷鸟算法的桁架损伤识别结果

Fig. 9 Damage detection results of truss based on Cuckoo search algorithm

4 结 论

以双跨简支梁和桁架作为结构损伤识别算例，基于系统的模态和频率构造目标函数，以布谷鸟算法来对目标函数进行全局寻优。算例表明在随机噪声的影响下，布谷鸟算法仍能准确、高效的识别结构的损伤位置和程度，可在工程实际问题上应用。

参考文献：

[1] LU Z R, LAW S S. Features of dynamic response sensitivity and its application in damage detection [J]. Journal of Sound and Vibration, 2007, 303: 305 – 329.

[2] 王乐,杨智春,谭光辉,等. 基于固有频率向量的结构损伤检测方法[J]. 应用力学学报,2008,25(4):709 – 714.

[3] 刘济科,汤凯. 基于振动特性的损伤识别方法的研究进展[J]. 中山大学学报:自然科学版,2004,43(6):57 – 61.

[4] 吕中荣,王文洁,徐伟华,等. 基于振动响应的耦合杆系统损伤识别[J]. 中山大学学报:自然科学版,2012, 51(5):31 – 35.

[5] SHI Z Y, LAW S S, ZHANG L M. Damage localization by directly using incomplete mode shapes [J]. Journal of Engineering Mechanics-ASCE, 2000, 126(6): 656 – 660.

[6] 施洲,赵人达. 基于模态参数考虑边界条件变异的桥梁结构损伤识别[J]. 应用力学学,2012,29(2):191 – 197.

[7] 刘济科,汤凯. 基于残余力向量的结构损伤识别二步法[J]. 中山大学学报:自然科学版,2005,44(4):1 – 4.

[8] 黄民水,吴玏,朱宏平. 噪声影响下基于改进损伤识别因子和遗传算法的结构损伤识别[J]. 振动与冲击,2012,31(21):168 – 174.

[9] BONABEAU E, DORIGO M, THERAULAZ G. Inspiration for optimization from social insect beheviour [J]. Nature, 2000,406(6):39 – 42.

[10] SUGANTHAN P N. Particle swarm optimization with neighborhood operator[C] // Proc of the IEEE Congress of Evolutionary Computation,1999.

[11] YANG X S, DEB S. Engineering optimisation by cuckoo search [J]. Int J Mathematical Modelling and Numerical Optimisation, 2010, 1(4):330 – 343.

[12] YANG X S, DEB S, Cuckoo search via Levy flights [C] // Proc of World Congress on Nature & Biologically Inspired Computing (NaBIC 2009), India USA: IEEE Publication, 2009:210 – 214.

(上接第 12 页)

[9] DORMAND J R, PRINCE P J. New runge-kutta-nystrom algorithms for simulation in dynamical astronomy[J]. Celestial Mechanics, 1978,18(3): 223 – 232.

[10] ABIA L, SANZ-SERNA J M. Partitioned Runge-kutta methods for separable hamiltonian problems[J]. Mathematics of Computation, 1993, 60 (202): 617 – 634.

[11] WENDLANDT J M, Marsden J E. Mechanical integrators derived from a discrete variational principle[J]. Physica D, 1997, 106 (3): 223 – 246.

[12] MARSDEN J E, WEST M. Discrete mechanics and variational integrators [J]. Acta Numerica, 2001, 10: 357 – 514.

[13] KANE C, MARSDEN J E, ORTIZ M. Symplectic-energy-momentum preserving variational integrators [J]. Math Phys, 1999, 40(7): 3353 – 3371.

[14] GONZALEZ M, SCHMIDT B, ORTIZ M. Energy-stepping Integrators in lagrangian mechanics[J]. Int J Num Meth Eng, 2010, 82(2): 205 – 241.

[15] 高强,彭海军,张洪武,等. 基于哈密顿动力系统新变分原理的保辛算法之一：变分原理和算法构造[J]. 计算力学学报, 2013, 30 (4): 461 – 467.

[16] 罗恩,黄伟江,张贺忻. 相空间非传统 Hamilton 型变分原理与辛算法[J]. 中国科学：A 辑, 2002, 32 (12): 1119 – 1126.

[17] 黄伟江,罗恩,佘慧. 弹性梁动力响应分析的一种辛算法[J]. 中山大学学报：自然科学版, 2002, 41 (3):5 – 8.

[18] 章学军,黄伟江,罗恩. 深梁动力响应分析的一种辛算法[J]. 中山大学学报：自然科学版, 2010, 49 (4):33 – 37.

[19] 高强,彭海军,张洪武,等. 基于哈密顿动力系统新变分原理的保辛算法之三：数值算例[J]. 计算力学学报, 2013, 30 (4): 473 – 478.

[20] 闫海青,唐晨,张皞,等. 任意阶显式精细积分多步法的常用形式及其高阶次数值计算[J]. 计算物理, 2004, 21(3): 333 – 338.