第 46 卷 第 3 期　　天 文 学 报　　Vol.46 No.3
2005 年 7 月　　ACTA ASTRONOMICA SINICA　　Jul., 2005

保持 Runge-Lenz 向量的数值方法*

刘福窑 [1,4]　伍 歆 [2,3]　陆本魁 [1,4]

(1 中国科学院紫金山天文台 南京 210093)
(2 南昌大学理学院 南昌 330047)
(3 南京大学天文系 南京 210093)
(4 中国科学院国家天文台 北京 100012)

摘要　对孤立积分和能够保持 Runge-Lenz 向量的梯形公式进行详尽讨论. 孤立积分就是限制粒子运动区域的不变量. 具有 n 个自由度的自治可积哈密顿系统且只有 n 个互相对合的独立孤立积分, 并且其他孤立积分的存在对粒子的运动是有意义的. Kepler 二体系统存在能量积分、角动量积分和 Runge-Lenz 向量. 对于平面运动情况, 这三类积分中只有 3 个独立孤立积分; 而对于三维空间情形, 该三类积分仅有 5 个是独立的. 就前者而言, Kepler 二体平面运动积分构成该系统中的对称群 $SO(3)$, 经过 Levi-Civita 变换, 它可以转化为二维各向同性谐振子系统中的对称群, 而该对称群能够被梯形公式准确保持. 另一方面, 对于后者梯形公式对这三类积分的严格保持还可以在 5 个 Kepler 轨道根数 a 、 e 、 i 、 Ω 和 ω 上得到体现.

关键词　**天体力学: 孤立积分**, Runge-Lenz **向量**, **辛方法**
中图分类号: P 138;　　**文献标识码**: A

1 引言

从运动微分方程的线性与非线性关系来看, 哈密顿系统分为线性和非线性两类系统. 其中的线性系统和部分非线性系统属于可积系统, 具有运动有序但绝没有混沌行为的动力学性质. 具有 n 个自由度的自治哈密顿系统可积的充要条件是存在 n 个互相对合 (involution) 的独立孤立积分 [1,2]. 当然, 某些含 n 个自由度的可积哈密顿系统具有独立孤立积分数目多于 n 个. 对于含 n 个自由度并且频率通约的线性系统存在 $2n-1$ 个独立的孤立积分. 特别地, n 个自由度的各向同性自治谐振子系统属于此类. 另外, Kepler 二体系统属于各向同性系统, 它存在能量积分、角动量积分和 Runge-Lenz 向量. 这里, 能量积分和角动量积分分别反映时间平移和空间旋转不变性. 对于平面运动情况, 这三类积分中只有 3 个独立孤立积分; 而对于三维空间情形, 该三类共 7 个积分 (即能量积分 1 个, 角动量积分和 Runge-Lenz 向量各 3 个分量) 中仅有 5 个是独立的 [3].

一个较好的数值方法应该具有较高的计算效率、较高的数值精度和较好的数值稳定性, 特别是能够保持原系统的几何拓扑结构和所固有的不变流形. 如辛算法 [4−7] 、稳定

2004-11-01 收到原稿, 2004-11-22 收到修改稿
* 国家自然科学基金 (10303001) 和专项基金 (10447112) 资助

化方法和方程降阶方法 [8,9]. 毫无疑问，一阶辛 Euler 方法和二阶 Wisdom-Holman 蛙跳 (leapfrog) 辛映射等常用辛算法能够维持能量积分 [10], 但这不等于说辛算法严格保持了该能量积分，事实上数值结果所得的哈密顿与原哈密顿来比总存在截断误差 [11], 但是该哈密顿函数误差没有长期变化，使得积分始终在能量面附近进行. 因此，辛算法是以更改形式的能量积分来保持，也就是说，辛算法是自动满足了能量约束条件的方法. 从这一角度来看，辛算法一般不需要稳定化处理 [12]. 此外，对于各向同性谐振子系统和 Kepler 二体系统， Yoshida 发现辛算法能够以更改形式的角动量积分来保持 [13,14]. 可是辛算法一般不能保持所有孤立积分. Yoshida 指出当辛算法用于频率通约且各向异性的线性系统时除存在更改形式的能量积分外其他更改形式的积分并不存在 [13]. 他进一步讨论指出辛算法不能保持 Kepler 二体系统所固有的 Runge-Lenz 向量 [14]. 然而，存在另一类辛算法，能严格保持能量等运动积分. 作为线性多步隐式辛方法的 Newton-Cotes 积分家族中最简单的梯形公式可以准确保持线性振子的能量 [15−17]. 这里应该强调线性多步辛方法和对称法实为近似辛结构保持算法，即在算法稳定和特征方程由主根决定而伪根的影响可忽略的情况下 [15−17]. 针对线性哈密顿系统利用 Newton-Cotes 积分公式和隐式中点公式可以构造出一类形如梯形公式的多层辛积分器 (multilayer symplectic integrator)[18−20]. 对于非线性系统，Minesaki 和 Nakamura 研究了运用梯形公式的可行性. 他们采用 Levi-Civita 或 KS 变换将非线性 Kepler 二体系统化为各向同性谐振子系统，又用梯形公式作用于此各向同性谐振子系统再反推到原系统便可严格保持能量积分和角动量积分以及 Runge-Lenz 向量 [21,22].

考虑到 Minesaki 和 Nakamura 利用梯形公式严格保持 Runge-Lenz 向量的推导比较繁琐，本文将进行详尽讨论，寻找简便的推导方法. Kepler 二体平面运动积分构成该系统中的对称群 SO(3), 经过 Levi-Civita 变换，它可以转化为二维各向同性谐振子系统中的对称群，而该对称群能够被梯形公式准确保持. 这样推导较简. 同时对孤立积分和可积条件进行深入探讨. 此外，研究 Kepler 6 个轨道根数在数值中的精度. 5 个 Kepler 轨道根数 a 、 e 、 i 、 Ω 和 ω 应为常数，考察梯形公式能否严格保持它们. 还探讨非线性可积系统有关孤立积分能被数值积分保持的条件以及梯形公式作用于二维耦合谐振子的有关运动积分保持情况.

2　Kepler 二体运动中的对称群

为后面方便起见，本节先陈述孤立积分和非孤立积分的概念以及 Kepler 二体平面运动的对称群，并且通过变换使之转化为二维各向同性谐振子系统中的对称群.

2.1　孤立积分与非孤立积分

研究动力系统一般会涉及到孤立积分与非孤立积分和可积与不可积等概念. 孤立积分就是限制粒子运动区域的不变量. 就自治的哈密顿系统 $H = H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$ 而言，若一个关于广义坐标 $\boldsymbol{q}$ 和广义动量 $\boldsymbol{p}$ 的函数 $\Phi = \Phi(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$ 与 H 的 Poisson 括号满足对合关系

$$\{\Phi, H\} = 0\,, \tag{1}$$

则 Φ 是 H 的一个孤立积分. 一个含 3 个自由度的自治哈密顿系统最少存在一个孤立积分, 因为 H 总是运动不变量 (称为能量积分); 但最多含 5 个独立孤立积分, 因为相空间独立变量是五维的, 此时的每个孤立积分都是五维超曲面. 当该系统所含独立孤立积分个数大于或等于 3 时, 此系统是可积的, 其相轨道是拟周期的有序轨道或称 KAM 环, 它由这几个独立孤立积分所限制确定的五维超曲面的交集得到 [23,24]. 该可积系统一般只拥有 3 个独立孤立积分, 但当此系统的特征频率有 2 个或 3 个通约时, 那就存在 4 或 5 个独立孤立积分. 另一方面, 如果此系统所含独立孤立积分个数小于 3, 那么该系统是不可积的, 当动力学参数达到某临界值后系统多数轨道是混沌轨道, 其相空间看起来有些随机分布, 但这些相轨道并不能够从这几个独立孤立积分所限制确定的五维超曲面的交集获得.

为了更清楚地表达孤立积分是对相空间的一种约束, 现以二维线性振子为例予以说明. 该模型为:

$$H=\frac{1}{2}(p_1^2+p_2^2)+\frac{1}{2}(\omega_1^2q_1^2+\omega_2^2q_2^2)\,, \tag{2}$$

其中 ω_1 和 ω_2 是两个常数频率. 它可以视为在 q_1 轴和 q_2 轴两个独立的一维线性谐振子

$$H_i=\frac{1}{2}(p_i^2+\omega_i^2q_i^2)(i=1,2) \tag{3}$$

运动的合成. 事实上, H 、 H_1 和 H_2 都是孤立积分, 还可以列举一个形式改写的孤立积分

$$\Psi=H_2-H_1\,, \tag{4}$$

显然其中只有两个是独立的, 从而该系统可积并且相空间维数是二维的. 为了明显看到这一事实, 我们采用另一种正则坐标变换. 假设 φ_1,φ_2 为作用角变量, 且对应的正则变量分别为作用量 J_1,J_2, 于是系统 (2) 化为

$$H=\frac{1}{2\pi}(\omega_1J_1+\omega_2J_2)\,. \tag{5}$$

因此, 可得

$$J_1=\text{constant};\qquad J_2=\text{constant}\,. \tag{6}$$

$$\varphi_1=\frac{\omega_1}{2\pi}*t+\varphi_1(0);\qquad \varphi_2=\frac{\omega_2}{2\pi}*t+\varphi_2(0)\,. \tag{7}$$

进一步可以求出 (2) 式中的坐标与动量随时间的演化关系

$$q_s=c_s\sin(2\pi\varphi_s)(s=1,2)\,, \tag{8}$$

$$p_s=c_s\omega_s\cos(2\pi\varphi_s)\,. \tag{9}$$

这里常数 $c_s=\sqrt{J_s/\pi\omega_s}(s=1,2)$. 方程 (6) 中的两个运动不变量 J_1 与 J_2 是对 q_1 轴和 q_2 轴上两个独立的一维线性谐振子能量积分 $H_1=\omega_1J_1/2\pi$ 和 $H_2=\omega_2J_2/2\pi$ 的反映, 它们约束粒子的相轨道在由 φ_1 和 φ_2 分别所确定的两个环面所构成的一个二维环面上, 故称 J_1 和 J_2 为两个孤立积分. 也许有人会根据方程 (7) 总可以得到一个运动不变量

$$(\varphi_1-\varphi_1(0))/(\varphi_2-\varphi_2(0))=\omega_1/\omega_2 \tag{10}$$

去断定独立于 J_1 与 J_2 的孤立积分恒存在，结论看起来似乎为真，下面分两种情形来探讨这一问题.

(1) 如果两频率 ω_1 和 ω_2 通约，即 ω_1/ω_2 为形如有理数 n/m (n 和 m 为互质正整数). 不失一般性，不妨取 $\omega_1 = 1/m$, $\omega_2 = 1/n$, 并结合方程 (10) 有

$$2\pi m\varphi_1 - 2\pi n\varphi_2 = 2\pi(m\varphi_1(0) - n\varphi_2(0)) = \text{constant}\,. \tag{11}$$

方程 (11) 式的确是独立于 J_1 与 J_2 的另一个孤立积分，其具体表达形式推导如下. 将 (8) 式和 (9) 式写成复数解形式

$$\frac{p_s}{\omega_s} + iq_s = c_s e^{i\cdot 2\pi\varphi_s} (i = \sqrt{-1}; s = 1, 2)\,, \tag{12}$$

由此可得

$$\left(\frac{p_1}{\omega_1} + iq_1\right)^m = c_1^m e^{i\cdot 2\pi m\varphi_1}\,, \tag{13}$$

$$\left(\frac{p_2}{\omega_2} + iq_2\right)^n = c_2^n e^{i\cdot 2\pi n\varphi_2}\,. \tag{14}$$

再把 (13) 和 (14) 两边分别相除，我们有

$$z = (p_1/\omega_1 + iq_1)^m (p_2/\omega_2 + iq_2)^{-n} = c_1^m c_2^{-n} e^{i\cdot 2\pi(m\varphi_1(0) - n\varphi_2(0))}\,. \tag{15}$$

容易发现 (11) 式是复数 z 的幅角并且复数 z 是运动的不变量. 这个复平面内的不变点 z 反映了由 φ_1 和 φ_2 分别所确定的两个环面有公共部分，也就是说，相轨迹在这二维环面上是闭合和非稠密的周期轨道. 记 z 的实部和虚部分别为 Rez 与 Imz, 则二者均为孤立积分. 但由于 H 、 Ψ 、 Rez 与 Imz 具有代数关系

$$(\text{Rez})^2 + (\text{Imz})^2 = m^{2m} n^{-2n} (H - \Psi)^m (H + \Psi)^{-n}\,, \tag{16}$$

故只有 3 个是独立的. 下面针对 m 和 n 取值，列举 Rez 与 Imz 的一些具体表达形式.

当 $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ 时，系统 (2) 是各向同性的. 为了简便可取 (15) 式中的 $m = n = 1$, 则有

$$\widehat{\text{Rez}} = p_1 p_2 + \omega^2 q_1 q_2\,, \tag{17}$$

$$\widehat{\text{Imz}} = q_1 p_2 - q_2 p_1\,, \tag{18}$$

其中 $\widehat{\text{Rez}}$ 和 Rez 及 $\widehat{\text{Imz}}$ 和 Imz 之间分别只存在常数因子的差别. $\widehat{\text{Imz}}$ 就是角动量积分，它是关于系统具有轴对称性的反应. 若令

$$S_1 = \frac{1}{2\omega}\widehat{\text{Rez}}\,, \tag{19}$$

$$S_2 = \frac{1}{2\omega}\Psi\,, \tag{20}$$

$$S_3 = \frac{1}{2}\widehat{\text{Imz}}\,, \tag{21}$$

则 S_1 、 S_2 和 S_3 满足关系 $\{S_i, S_j\} = \epsilon_{ijk} S_k \, (i, j, k = 1, 2, 3; \epsilon_{ijk}$ 是 Levi-Civita 张量)[3]. 于是 S_1 、 S_2 和 S_3 生成三维空间内的旋转变换的对称群 $SO(3)$.

当 $\omega_1 \neq \omega_2$ 时，系统 (2) 为各向异性的. 以 $m = 2, n = 1$ 为例，由方程 (15) 可得

$$\Psi_1 = \widehat{Rez} = p_2(4p_1^2 - q_1^2) + 4q_1 q_2 p_2 \, , \tag{22}$$

$$\Psi_2 = \widehat{Imz} = q_2(q_1^2 - 4p_1^2) + 4p_1 p_2 q_1 \, . \tag{23}$$

因系统无对称性，故 Ψ_1 和 Ψ_2 都不可能是角动量积分，并且 Ψ 、 Ψ_1 和 Ψ_2 也不能生成对称群 $SO(3)$.

(2) 当 ω_1/ω_2 为无理数时, 尽管方程 (10) 总是存在, 但它无法化为方程 (11) 的形式, 从而使其二维环上的相轨道是处处稠密且不闭合的无穷环绕拟周期轨道，也就是说，方程 (10) 对运动区域毫无约束, 所以, 方程 (10) 不能视为一个孤立积分, 称为非孤立积分.

从数学的观点来看, 孤立积分与非孤立积分的区别并不明显, 但从物理的观点来看, 非孤立积分没有意义，而孤立积分却对相空间具有限制作用. 通常所说的积分就是指孤立积分. 尚需指出情形 (1) 和 (2) 所探究的系统 (2) 是否存在第三孤立积分与 Hénon 等 [23] 所要寻找的第三孤立积分对动力学的定性性质所起的作用是完全不同的. 无论系统 (2) 是否存在第三孤立积分, 该系统总是存在有序轨道但相轨道分布有所差异. 若系统 (2) 各向同性，其构形空间内的轨道是圆心在原点的椭圆. 于是在平面内只要知道椭圆半长轴，偏心率及长轴方位角，就可以确定椭圆. 因此，在平面内描述圆心在原点的椭圆，需要知道 3 个参数，即需要 3 个孤立积分. 如果只知道椭圆半长轴，偏心率 (相当于两个孤立积分) 而长轴方位角不固定 (相当于第三孤立积分不存在), 不难理解相轨道分布的稠密性. 可见这种第三孤立积分的存在还是有意义的，即它的存在与否将决定相轨道是否闭合、稠密以及是周期还是拟周期. 而 Hénon 和 Heilies 所涉及的第三孤立积分的存在与否会直接关系到系统的可积性，随之体现轨道是有序还是混沌的问题. 具有 3 自由度的轴对称自治哈密顿系统含有能量积分和角动量积分，若第三孤立积分存在，则此系统可积；否则不可积，可能产生混沌现象. 所以，第三孤立积分的存在是该系统可积不可缺少的条件. 就二自由度的自治 Hénon-Heilies 系统而言，存在能量积分但无角动量积分，自然地寻找第三孤立积分变为第二孤立积分. 对于 Hénon-Heilies 系统在弱不可积情况下，用分析方法寻找第二孤立积分是困难的. Hénon 和 Heilies 利用 Poincaré 截面观察 KAM 环是否被破坏从而推断 Hénon-Heilies 系统的第二孤立积分的存在与否. 此外，我们还要着重强调含 n 个自由度的自治可积哈密顿系统至少存在 n 个独立孤立积分，但仅有 n 个是互相对合的，例如，方程 (2) 中的总能量积分 H 与 (19)—(21) 式中的 S_1 、 S_2 和 S_3 都对合但 S_1 、 S_2 和 S_3 三者中任何两个不对合. 有些书本和文献在讨论可积性时所提到的孤立积分可能与文 [23,24] 的含义不同. Lichtenberg 等 [2] 指出 “具有 n 个自由度的哈密顿系统可积的重要条件是存在 n 个独立的孤立积分” 中的孤立积分实际上彼此对合. 另一方面，从 Lyapunov 指数的角度也比较好理解系统的可积性. 已知道含 n 个自由度的自治哈密顿系统具有 $2n$ 个 Lyapunov 指数形如 $\pm\lambda_i (i = 1, \cdots n)$. Casati 等证明了每个孤立运动积分对应两个零 Lyapunov 指数 [25]. 因此对于含 n 个独立孤立积分的可积系统，其所有的 Lyapunov 指数全为零，轨道一般是拟周期的. 这是可积系统没有混

沌的根源. 这里 n 个独立孤立积分仍然必须满足互相对合关系.

下面考察非线性且各向同性的 Kepler 二体系统中的孤立积分.

2.2 Kepler 二体运动中的孤立积分

相对 Kepler 二体运动的哈密顿为

$$H = \frac{1}{2}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p} - \frac{\mu}{r}\,, \tag{24}$$

其中 r 为二体之间的距离. H 本身就是一个积分，称为能量积分. 由于空间各向同性，从而具有旋转对称性，角动量守恒，即

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}\,. \tag{25}$$

同时还存在 Runge-Lenz 向量 [26]

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - \mu\frac{\boldsymbol{r}}{r}\,. \tag{26}$$

这三类积分确定了 Kepler 二体系统的可积性.

对于 Kepler 二体平面运动，哈密顿形式为

$$H = (p_x^2 + p_y^2)/2 - \mu/\sqrt{x^2+y^2}\,, \tag{27}$$

方程 (25), (26) 具体表为

$$\boldsymbol{L} = (0, 0, xp_y - yp_x)\,, \tag{28}$$

$$\boldsymbol{R} = \left(p_y(xp_y - yp_x) - \frac{\mu x}{\sqrt{x^2+y^2}}, p_x(yp_x - xp_y) - \frac{\mu y}{\sqrt{x^2+y^2}}, 0\right)\,. \tag{29}$$

记 (28) 与 (29) 中非零分量依次为 L_z 、 R_x 和 R_y. 现进行 Levi-Civita 正则变换

$$\begin{aligned} x &= 2u_1u_2\,,\\ y &= u_1^2 - u_2^2\,,\\ p_x &= \frac{1}{2}\frac{u_1p_2 + u_2p_1}{u_1^2+u_2^2}\,, \qquad (30)\\ p_y &= \frac{1}{2}\frac{u_1p_1 - u_2p_2}{u_1^2+u_2^2}\,, \end{aligned}$$

(31)

于是方程 (27) 等价于

$$\overline{H} = \frac{p_1^2 + p_2^2 - 8\mu}{8(u_1^2+u_2^2)}\,. \tag{32}$$

令 $\mathrm{d}t = 4(u_1^2+u_2^2)\mathrm{d}\tau$, 再对 (32) 式进行正则扩充所得新哈密顿为：

$$\begin{aligned} \Gamma &= 4(u_1^2+u_2^2)(\overline{H} + p_0)\\ &= \frac{1}{2}(p_1^2+p_2^2) + 4p_0(u_1^2+u_2^2) - 4\mu, \end{aligned} \tag{33}$$

其中 $p_0=-E$ (E 是系统 (27) 的能量；对于椭圆运动， $E<0$) 并且 $\Gamma\equiv 0$. Γ 表示频率为 $\omega=\sqrt{8p_0}$ 的各向同性线性振子. 这也叫正规化方法. 通过这种处理，使 Lyapunov 不稳定的 Kepler 轨道变为稳定的线性各向同性谐振子轨道. 同时， L_z 、 R_x 和 R_y 形式上变为

$$L_z=\frac{1}{2}(u_2p_1-u_1p_2)\,, \tag{34}$$

$$R_x=-\frac{1}{4}(p_1p_2+8p_0u_1u_2)\,, \tag{35}$$

$$R_y=\frac{1}{4}\left[\left(\frac{1}{2}p_2^2+4p_0u_2^2\right)-\left(\frac{1}{2}p_1^2+4p_0u_1^2\right)\right]\,. \tag{36}$$

这三个孤立积分极相似于方程 (19)—(21), 只要各自适当乘以常数因子就完全能够得到相同形式，即

$$\widetilde{L}_z=-L_z\,, \tag{37}$$

$$\widetilde{R}_x=-\frac{2R_x}{\sqrt{8p_0}}\,, \tag{38}$$

$$\widetilde{R}_y=\frac{2R_y}{\sqrt{8p_0}}\,. \tag{39}$$

因此，由系统 (27) 的 3 个孤立积分 L_z 、 R_x 和 R_y 我们能够将它们转化为各向同性线性振子 (33) 式的孤立积分 $\widetilde{L}_z$ 、 $\widetilde{R}_x$ 和 $\widetilde{R}_y$ 并且生成系统 (33) 的三维空间内的旋转变换的对称群 $SO(3)$. 下面我们寻找保持这个对称群的数值方法.

3 梯形公式对 Kepler 运动有关守恒量的保持

对于一阶常微分方程

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{f}(t,\boldsymbol{x})\,, \tag{40}$$

可以借助线性 k 步隐式 Newton-Cotes 求积公式

$$\boldsymbol{x}_{n+k}=\boldsymbol{x}_n+h\sum_{i=0}^{k}C_{ik}\boldsymbol{f}_{n+i}\,, \tag{41}$$

其中

$$C_{ik}=\frac{(-1)^{k-i}}{i!(k-i)!}\int_0^k\prod_{j\neq i}^{k}(s-j)\mathrm{d}s\,,$$

$$\boldsymbol{f}_{n+i}=\boldsymbol{f}(t_{n+i},\boldsymbol{x}_{n+i})\,,$$

获得数值解，而 h 为积分步长，又 $t_{n+i}=t_n+ih$. 这里列举几个 Newton-Cotes 积分器：

$$k=1,\quad \boldsymbol{x}_{n+1}-\boldsymbol{x}_n=\frac{h}{2}(\boldsymbol{f}_n+\boldsymbol{f}_{n+1})\,, \tag{42}$$

$$k=2,\quad \boldsymbol{x}_{n+2}-\boldsymbol{x}_n=\frac{h}{3}(\boldsymbol{f}_n+4\boldsymbol{f}_{n+1}+\boldsymbol{f}_{n+2})\,, \tag{43}$$

$$k=3,\quad \boldsymbol{x}_{n+3}-\boldsymbol{x}_n=\frac{3h}{8}(\boldsymbol{f}_n+3\boldsymbol{f}_{n+1}+3\boldsymbol{f}_{n+2}+\boldsymbol{f}_{n+3})\,, \tag{44}$$

$$k=4,\quad \boldsymbol{x}_{n+4}-\boldsymbol{x}_n=\frac{2h}{45}(7\boldsymbol{f}_n+32\boldsymbol{f}_{n+1}+12\boldsymbol{f}_{n+2}+32\boldsymbol{f}_{n+3}+7\boldsymbol{f}_{n+4})\,. \tag{45}$$

它们依次称为二阶单步梯形公式，四阶两步 Simpson 公式，四阶三步 Newton 公式，六阶四步 Cotes 公式.

根据冯康的理论 [15], 不难判断线性 k 步隐式 Newton-Cotes 求积公式 (41) 是辛的. 冯康的理论表述如下：用于求解线性哈密顿系统的某线性 k 步法

$$\sum_{i=0}^{k}\alpha_i\boldsymbol{x}_{n+i}=h\sum_{i=0}^{k}\beta_i\boldsymbol{f}_{n+i} \tag{46}$$

是辛的充要条件为 (46) 式的两个特征多项式

$$\rho(\xi)=\sum_{i=0}^{k}\alpha_i\xi^i,\qquad \sigma(\xi)=\sum_{i=0}^{k}\beta_i\xi^i\,. \tag{47}$$

满足关系 $\psi(\xi)=-\psi(1/\xi)$ $(\psi(\xi)=\rho(\xi)/\sigma(\xi))$, 亦即 $\rho(\xi)$ 反对称而 $\sigma(\xi)$ 对称. 由此可知 (41) 式是线性多步辛方法.

值得注意的是线性多步法公式 (41) 所显示的辛性质仅当方法为数值稳定，并且线性多步法差分方程的解由主根决定而伪根作用可忽略才成立 [16,17]. 除了梯形公式 (42) 存在一个较大相对稳定区外，其他的 Newton-Cotes 积分方法都是零稳定，即稳定区域只限于复平面虚轴上对称于原点的一段区间. 对于线性系统，只要步长适当，就能保证这些线性多步法的稳定性. 而把它们用于非线性系统时，表现出较强的数值不稳定性.

3.1 对各向同性二维谐振子中的对称群的保持

考虑到二阶单步梯形公式 (42) 的稳定性大大优于其他的 Newton-Cotes 积分方法且又是单步法，因此它有一定的实用性. 但在辛算法的应用和研究中，人们不太留意它，因为它是隐式方法，一般需要用到迭代，效率不如显式辛算法. 然而，当它用于线性系统时，隐式方法可以转化为显式算法.

为了问题的简洁，首先分析谐振子公式 (3) (其中下标 i 略去), 其运动微分方程为

$$\dot{q}=p,\qquad \dot{p}=-\omega^2 q. \tag{48}$$

它有分析解如下

$$\begin{aligned} q(t) &= q_0\cos(\omega t)+(1/\omega)p_0\sin(\omega t)\,,\\ p(t) &= -\omega q_0\sin(\omega t)+p_0\cos(\omega t)\,. \end{aligned} \tag{49}$$

注意 (49) 式与 (8) 式和 (9) 式仅仅在形式上不同而已. 对 (48) 式作用于梯形公式 (42), 便得数值解形式为

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= q_n\cos\alpha+(1/\omega)p_n\sin\alpha,\\ p_{n+1} &= -\omega q_n\sin\alpha+p_n\cos\alpha\,. \end{aligned} \tag{50}$$

其中

$$\begin{aligned}\cos\alpha &= (4-\omega^2h^2)/(4+\omega^2h^2),\\ \sin\alpha &= 4\omega h/(4+\omega^2h^2)\,,\\ \alpha &\approx h\Omega(h)\\ \Omega(h) &= 4\omega/(4-\omega^2h^2)\approx\omega+\omega^3h^2/4\,.\end{aligned}\tag{51}$$

容易验证 $\mathrm{d}q_{n+1}\bigwedge\mathrm{d}p_{n+1}=\mathrm{d}q_n\bigwedge\mathrm{d}p_n$, 即 (50) 式是保面积或辛映射. 数值解 (50) 式与分析解 (49) 式形式完全雷同, 但映射频率 $\Omega(h)$ 与该系统的固有频率 ω 明显不等, 因此数值解表现为线性增长的沿迹误差而不会引入任何人工耗散. 不难得到 $H(q_{n+1},p_{n+1})\equiv H(q_n,p_n)$, 表明梯形公式严格保持了该谐振子的能量, 亦即对能量没有产生一点截断误差 †. 这与通常的辛算法对能量的保持是不同的. 通常的辛算法在能量方面总存在截断误差, 但这种截断误差总在原能量附近波动, 从而维持了能量, 可谓通常的辛算法维持了一个更改形式的能量积分.

类似地利用梯形公式 (42) 数值求解频率为 $\omega=\sqrt{8p_0}$ 的线性各向同性二维谐振子 (33) 取得数值解, 并采用此结果经过简单的推算可得 $\Gamma\equiv0$, 并且 (37)—(39) 式中的 3 个孤立积分 $\widetilde{L}_z$ 、 $\widetilde{R}_x$ 和 $\widetilde{R}_y$ 能够严格保持, 也就是由它们生成的对称群 $SO(3)$ 被准确保持. 于是 (27)—(29) 式中的孤立积分便可由梯形公式 (42) 严格保持.

3.2 对 5 个 Kepler 轨道根数的保持

三维空间内的 Kepler 二体运动仍然存在如 (24)—(26) 式所示的三类积分, 即能量积分 1 个, 角动量积分和 Runge-Lenz 向量各 3 个分量总计 7 个孤立积分. 但由于 $\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{L}=0$ 及过近星点的径向单位矢量 $\hat{\boldsymbol{P}}$ 满足关系

$$\hat{\boldsymbol{P}}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cos E-\frac{\sqrt{a}}{\sqrt{\mu}}\dot{\boldsymbol{r}}\sin E=\frac{\boldsymbol{r}}{e}\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{a}\right)-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\dot{\boldsymbol{r}}}{e\mu}\dot{\boldsymbol{r}}=\frac{\boldsymbol{r}}{e}\left[\frac{1}{r}-\left(\frac{2}{r}-\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}}{\mu}\right)\right]-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}}{e\mu}\boldsymbol{p}=$$
$$\frac{1}{e\mu}\left[(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{r}-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}-\mu\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]=\boldsymbol{R}/(e\mu)\,,\tag{52}$$

也就是 Runge-Lenz 向量平行于过近星点的径向矢量, 其模的大小关系为

$$|\boldsymbol{R}|=e\mu\quad(e=|\boldsymbol{R}|/\mu)\,,\tag{53}$$

故只有 5 个独立孤立积分 (若采用正则共轭的 Delaunay 变量, 则变换后的新哈密顿函数出现 5 个循环坐标, 相应地产生 5 个循环积分, 这使 5 个独立孤立积分的存在将变得更为明显). 直观来看, 确定三维空间内圆心在原点的椭圆形状和位置的确需要 5 个独立参数即半长径 a 、偏心率 e 、轨道倾角 i 、交点黄径 Ω 和近星点角 ω, 因而, 需要 5 个独立孤立积分. 除了偏心率 e 外, 其他 4 个轨道根数也可以用上述三类积分 (24)—(26) 式表示出来. 分别表示如下 [26]

$$a=-\mu/(2H)\,,\tag{54}$$

†: 数值解仍然存在截断误差, 它体现在映射频率 $\Omega(h)$ 上.

$$i = \arccos R_z \,, \tag{55}$$

$$\Omega = \arctan(-R_x/R_y) \,, \tag{56}$$

$$\omega = \arcsin(\hat{P}_z/\sin i) = \arcsin[R_z/(e\mu \sin i)] \,. \tag{57}$$

当然，计算 Ω 和 ω 尚各需要其另一个三角函数的符号才能确定它们各自所处的象限.

Minesaki 等 [22] 采用 KS 变换将非线性 Kepler 二体系统化为四维各向同性谐振子系统，然后用梯形公式作用于此各向同性谐振子系统再反推到原系统便可严格保持能量积分和角动量积分以及 Runge-Lenz 向量. 由此我们根据方程 (53)—(57) 可以断定梯形公式能够严格保持 5 个 Kepler 轨道根数 a 、 e 、 i 、 Ω 和 ω. 这里我们要强调 5 个根数只是完全确定了三维空间内圆心在原点的椭圆，至于椭圆上某点的具体位置，还须借助平近点角 M 来描述. 现在我们来看梯形公式对平近点角 M 的误差所造成的影响. 文 [22] 中对物理时间 t 采用定步长，则对 KS 变换新坐标时间 s 来说就转为变步长. 由于 a 被梯形公式严格保持，故平运动角频率 n 也被严格保持. 对一个步长内的物理时间，平近点角 M 的增量为 $\triangle M = n \cdot \triangle t$, 表明梯形公式对平近点角 M 没有产生一点截断误差. 但对于通常的辛算法，因角频率 n 存在截断误差 $\triangle n$ 使得 $\widetilde{n} = n + \triangle n$, 则一步内平近点角 M 的增量是 $\triangle M = \widetilde{n} \cdot \triangle t = n \cdot \triangle t + \triangle n \cdot \triangle t$. 其中， $\triangle n \cdot \triangle t$ 即为常用辛算法对 M 产生的局部截断误差，表明常用辛算法对 M 的误差影响有长期变化. 这又是梯形公式优越于常用辛算法的一个事实.

4 耦合谐振子

对于各向异性线性振子，尽管原系统存在固有频率 $\omega_1/\omega_2 = n/m$, 但是通过梯形公式所得形如 (51) 式的映射频率表明 $\Omega_1(h)/\Omega_2(h) \neq n/m$. 因此，除能量或与其有关的积分外，梯形公式不再保持各向异性线性振子的其他孤立积分 (例如：方程 (22) 和 (23) 所示的孤立积分). 下面我们再分析一个耦合谐振子模型.

该耦合谐振子模型为

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}\omega_0^2(q_1^2 + q_2^2) - \epsilon q_1 q_2 \,, \tag{58}$$

其中 ϵ 是耦合参数. 取坐标变换

$$q_1 = \frac{\xi + \eta}{\sqrt{2}}, \qquad q_2 = \frac{\xi - \eta}{\sqrt{2}} \,, \tag{59}$$

得新哈密顿为：

$$H = \frac{1}{2}(p_\xi^2 + p_\eta^2) + \frac{1}{2}(\omega_1^2\xi^2 + \omega_2^2\eta^2) \,, \tag{60}$$

$$\omega_1 = \omega_0\sqrt{1 - \epsilon/\omega_0^2} \,, \tag{61}$$

$$\omega_2 = \omega_0\sqrt{1 + \epsilon/\omega_0^2} \,. \tag{62}$$

方程 (60) 表示各向异性线性振子. 当 $\epsilon/\omega_0^2 \ll 1$ 时, $\omega_1 \approx \omega_0[1-\epsilon/(2\omega_0^2)]$, $\omega_2 \approx \omega_0[1+\epsilon/(2\omega_0^2)]$. 这表明在大于计算机机器精度内无论 ϵ/ω_0^2 多么小, 除能量或与其有关的积分外, 梯形公式不再严格保持耦合谐振子的其他孤立积分.

可见, 梯形公式对有关孤立积分的严格保持条件相当苛刻. 即使是线性系统, 只要它是各向异性, 除能量或与其有关的积分外, 梯形公式不能严格保持该系统的其他孤立积分. 除 Kepler 二体系统以外的其他具有 n 个自由度的非线性可积自治哈密顿系统 (如一个中心引力场附加一个均匀力场体系 [1] 及双不动中心问题等) 一般不能化为各向同性谐振子系统. 若还存在数目大于 n 个独立孤立积分, 梯形公式大都不能严格保持 n 个以外的孤立积分.

5 结束语

具有 n 个自由度的线性自治哈密顿系统一定存在 n 个互相对合的独立孤立积分, 并且这些孤立积分能够被梯形公式严格保持. 如果此系统还存在部分或全部特征频率通约, 那么独立孤立积分数目大于 n 但最多只能为 $2n-1$. 当该系统还是各向同性时, 它拥有 $2n-1$ 个独立孤立积分, 而且全部能被梯形公式严格保持. 若该系统特征频率全部通约且各向异性, 尽管也存在 $2n-1$ 个独立孤立积分, 但是除能量或与其有关的孤立积分外梯形公式不能保持该系统的其他孤立积分.

二维 Kepler 二体系统属于各向同性非线性系统, 存在能量积分、角动量积分和 Runge-Lenz 向量. 就平面运动情形而言, 这三类积分中共有 4 个非零孤立积分但只有 3 个是独立的. 这些独立孤立积分构成该系统中的对称群 $SO(3)$, 经过 Levi-Civita 变换, 它可以转化为 2 维各向同性谐振子系统中的对称群, 而该对称群能够被梯形公式准确保持. 而对于三维空间情形, 该三类积分总计 7 个孤立积分却仅有 5 个是独立的, 并且 Runge-Lenz 向量平行于过近星点的向径矢量. 经过 KS 变换, 该系统可以转化为四维各向同性谐振子系统 (用拓扑语言来说, 二和三维 Kepler 二体系统分别同胚于二和四维各向同性谐振子系统), 梯形公式同样可以严格保持这三类积分, 特别在 5 个 Kepler 轨道根数 a 、 e 、 i 、 Ω 和 ω 上得到反映. 至于其他非线性可积自治哈密顿系统一般不能化为各向同性谐振子系统, 梯形公式大都不能保持类似于 Runge-Lenz 向量形式的孤立积分.

尚需强调指出, 尽管从分析观点来看梯形公式严格保持了能量积分、角动量积分和 Runge-Lenz 向量及 5 个 Kepler 轨道根数 a 、 e 、 i 、 Ω 和 ω, 但计算机所得数值结果仍会表现它们都有随积分时间呈线性增长的误差. 这是因为不含截断误差而导致舍入误差成为主要的误差源之故. 此外, 还应当指出利用 Runge-Lenz 向量可以简便推导行星轨道运动方程和相对论效应所引起的轨道近日点进动等 [27].

致谢 本文第二作者曾与南京大学天文系黄天衣教授就孤立积分和非孤立积分概念展开讨论并受益匪浅, 特致谢意.

参 考 文 献

1 Arnold V I. Mathematical Methods of Classical Mechanics (translated by Vogtmann K and Weinstein A). New York: Springer-Verlag New York Heidelberg Berlin, 1978. 100

2 Lichtenberg A J, Lieberman M A. Regular and Chaotic Dynamics. Springer-Verlag, 1983. 1

3 Goldstein H. Classical Mechanics. Addison-Wesley Publishing Company, 1950. 55-300

4 Wu Xin, Huang Tian-yi, Wan Xiao-sheng. ChA&A, 2003, 27(1): 114

5 Wu Xin, Huang Tian-yi, Wan Xiao-sheng. AcASn, 2002, 43(4): 391 (伍歆, 黄天衣, 万晓生. 天文学报, 2002, 43(4): 391)

6 Liu Fu-yao, Wu Xin, Lu Ben-kui. ChA&A, 2005, 29(1): 92

7 Liu Fu-yao, Wu Xin, Lu Ben-kui. AcASn, 2004, 45(4): 402 (刘福窑, 伍歆, 陆本魁. 天文学报, 2004, 45(4): 402)

8 Wu Xin, Huang Tian-yi, Wan Xiao-sheng. ChA&A, 2005, 29(1): 81

9 Wu Xin, Huang Tian-yi, Wan Xiao-sheng. AcASn, 2004, 45(3): 310 (伍歆, 黄天衣, 万晓生. 天文学报, 2004, 45(3): 310)

10 Wisdom J, Holman M. AJ, 1991, 102: 1528

11 Yoshida H. CeMDA, 1993, 56: 27

12 Ascher U M. Numerical Algorithms, 1997, 14: 1

13 Yoshida H. Phys Lett A, 2001, 282: 276

14 Yoshida H. CeMDA, 2002, 83: 355

15 Feng Kang. Proceeding of the Annual Meeting on Computational Mathematics in Tianjin. Tianjin: Nankai University Press, 1990. 1

16 Huang Tian-yi, Wang Chang-bin, Zhao Zhang-yin. ChA&A, 1998, 22: 101

17 Huang Tian-yi, Wang Chang-bin, Zhao Zhang-yin. AcASn, 1997, 38: 278 (黄天衣, 王昌彬, 赵长印. 天文学报, 1997, 38: 278)

18 Chiou J C, Wu S D. J Chem Phys, 1997, 107(17): 6894

19 Zhu W, Zhao X, Tang Y. J Chem Phys, 1996, 104(6): 2275

20 Kalogiratou Z, Simos T E. J Comput & App Math, 2003, 158: 75

21 Minesaki Y, Nakamura Y. Phys Lett A, 2002, 306: 127

22 Minesaki Y, Nakamura Y. Phys Lett A, 2004, 324: 282

23 Hénon M, Heiles C. AJ, 1964, 69: 73

24 http://www.google.com. Annu Rev Astron Astrophys. 1982, 20: 399

25 Casati G, Chirikov B V, Ford J. Phys Lett A, 1980, 77: 91

26 Brouwer D, Clemence G M. Methods of Celestial Mechanics. New York: Academic Press, New York and London, 1961. 15

27 Weinberg S. Gravitation and Cosmology. New York: John Wiley, 1972. 165

A Note on the Numerical Method for Conserving the Runge-Lenz Vector

LIU Fu-yao[1,4] WU Xin[2,3] LU Ben-kui[1,4]
(1 *Purple Mountain Observatory, Chinese Academy of Sciences, Nanjing* 210008)
(2 *School of Science, Nanchang University, Nanchang* 330047)
(3 *Department of Astronomy, Nanjing University, Nanjing* 210093)
(4 *National Astronomical Observatories, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100012)

Abstract An intensive discussion is given here on an isolating integral and the trapezoidal rule applied to the preservation of the Runge-Lenz vector introduced by Minesaki and Nakamura. The isolating integral is an integral of a dynamical system which can further restrict the motion region of a particle in the system. It is well known that an integrable autonomous Hamiltonian system with n degrees of freedom must hold n independent isolating integrals in involution each other. If there exist other independent isolating integrals in this system, these isolating integrals have significance. It is clear that a bound Kepler problem contains energy integral, angular momentum integral and the Runge-Lenz vector. It is found that a symmetry group $SO(3)$ formed by three independent isolating integrals in a dynamical system of two-dimensional Kepler motion is to be identified with a group of two-dimensional isotropic harmonic oscillator derived from the orginal Kepler system in terms of Levi-Civita transformation. As a result, the group of the isotropic harmonic oscillator can be strictly conserved by the trapezoidal rule. In addition, the trapezoidal rule can preserve exactly five orbital elements a, e, i, Ω and ω in a three-dimensional Kepler motion with five independent isolating integrals.

Key words celestial mechanics: isolating integral, Runge-Lenz vector, symplectic method