

Methods of Mathematical Physics

§27 哈密顿量和蛙跳法

Lecturer: 黄志琦

<http://zhiqihuang.top/mmp>

本讲内容

Review and Practices

Leapfrog Method

看看多少人已经下车了



一个半径为 R 的实心均匀球，现在调控球面上的温度为：

$$T(r, \theta, \phi)|_{r=R} = T_0 + T_1 \operatorname{Re}[Y_{7,4}(\theta, \phi)].$$

其中 Re 表示取实部， r, θ, ϕ 是以球心为原点建立的球坐标系， T_0, T_1 为常量。

则球内部的温度 $T(r, \theta, \phi)$ ($r < R$) 是怎样的？

看看多少人已经下车了



大致估算

$$\int_{10!}^{1000!} [N_{100}(x)]^2 dx$$

的值。

看看多少人已经下车了



如果 \hat{A} 是算符，定义

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n.$$

那么，如果有两个算符 \hat{A}, \hat{B} ,

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$$

一般还成立吗？如果已知这两个算符对易呢？

哈密顿方程

设 q 为广义坐标, p 为广义动量。

如果已知哈密顿量 $H(p, q)$, 则 (x, p) 的时间导数由哈密顿方程给出:

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

练练手，熟悉一下



设 $H = \frac{1}{2}p^2$ ，写出哈密顿方程。

练练手，熟悉一下



设 $H = \frac{1}{2}q^2$ ，写出哈密顿方程。

烧脑的观点来了

我们可以把任意二元函数 $H(\cdot, \cdot)$ 等价地看成一个 (p, q) 到 (\dot{p}, \dot{q}) 的映射规则:

$$\dot{p} = -\frac{\partial H(p, q)}{\partial q}$$

$$\dot{q} = \frac{\partial H(p, q)}{\partial p}$$

抽象地写就是

$$\begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} = \hat{H} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

这里的 \hat{H} 就是一个“操作规则”，或者说，一个算符。这个算符把函数 (p, q) 映射为了函数 (\dot{p}, \dot{q}) 。注意一般来说这个算符是非线性的。

抽象解

虽然 \hat{H} 这个算符一般是非线性的，已经复杂到无法用矩阵来描述了，但这不妨碍我们抽象地把

$$\begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} = \hat{H} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

进行“积分”，得到

$$\begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix} = e^{\hat{H}t} \begin{pmatrix} p(0) \\ q(0) \end{pmatrix}$$

这里的

$$e^{\hat{H}t} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{H}^n t^n.$$

例子：谐振子

一维谐振子的哈密顿量可以写成：

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

其中 q 是位移， p 是动量。

(请自行根据量纲补充合适的单位，这些不是我们讨论的重点)

例子：谐振子

哈密顿方程为：

$$\dot{p} = -q$$

$$\dot{q} = p$$

简单起见，假设初始条件为 $p(0) = 0$, $q(0) = 1$ 。我们想求出以后的 $p(t)$, $q(t)$ 是如何演化的。

假装我们的高数已经下车，但是C语言刚刚上车。准备用数值方法求解这个问题。

(我其实主要是针对对没有解析解的情况，只是为了说明问题方便而用你们熟悉的谐振子作为例子)

C语言来了

```
int N = 10000;
double dt = 0.01, p = 0, q = 1;
for(int i = 0; i < N; i++){
    p = p - q * dt;
    q = q + p * dt;
}
printf("%f %f %f\n", N*dt, p, q);
```

实测输出结果:

100.000000 0.506013 0.865060

稍稍换一下次序

```
int N = 10000;
double dt = 0.01, p = 0, q = 1;
for(int i = 0; i < N; i++){
    q = q + p * dt;
    p = p - q * dt;
}
printf("%f %f %f\n", N*dt, p, q);
```

实测输出结果:

100.000000 0.506013 0.860000



前面两段代码为何会给出不同的结果？

蛙跳法

跟严格解 $p(100) = -\sin 100 = 0.5063656$,
 $q(100) = \cos(100) = 0.86231887$ 做比较, 我们发现结果还算是相当不错的。

这种用哈密顿方程交替更新 p, q 的方法叫做“蛙跳法” (leapfrog method)。它通常能够用很低的内存消耗和算法复杂度给出较好近似结果。

思考题



用级数展开大法证明:

$$e^{(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\Delta t} \approx e^{\frac{\hat{H}_1\Delta t}{2}} e^{\hat{H}_2\Delta t} e^{\frac{\hat{H}_1\Delta t}{2}}$$

误差至多是 $O(\Delta t^3)$ 的量级。

(推导时要注意 \hat{H}_1, \hat{H}_2 一般是不对易的, 即 $\hat{H}_1\hat{H}_2 \neq \hat{H}_2\hat{H}_1$)

蛙跳法的原理



把谐振子的哈密顿量拆成两部分的和 $H = H_1 + H_2$ ，其中 $H_1 = \frac{1}{2}p^2$ ， $H_2 = \frac{1}{2}q^2$ 。然后利用前面的近似

$$e^{(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\Delta t} \approx e^{\frac{\hat{H}_1\Delta t}{2}} e^{\hat{H}_2\Delta t} e^{\frac{\hat{H}_1\Delta t}{2}}$$

求解谐振子的 (p, q) 的演化。

如果取 $H_2 = \frac{1}{2}p^2$ ， $H_1 = \frac{1}{2}q^2$ ，结果会怎样？

(注意：用 H_1 和 H_2 单独作为哈密顿量时，程序其实在进行严格求解。也就是误差完全来自于上述算符等式的 $O(\Delta t^3)$ 误差。)

蛙跳法的原理

当你把很多步连起来的时候,

$$e^{(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\Delta t} e^{(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\Delta t} e^{(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\Delta t} \dots \approx e^{\frac{\hat{H}_1 \Delta t}{2}} e^{\hat{H}_2 \Delta t} e^{\hat{H}_1 \Delta t} e^{\hat{H}_2 \Delta t} e^{\hat{H}_1 \Delta t} \dots$$

这就是数值计算中的蛙跳法。

思考题



你能把前面的程序加以简单改进，使得在几乎完全相同的计算量下，结果的精度得以大大改善吗？

最后：请欣赏下6阶3重蛙跳

$$\begin{aligned}
 e^{(\hat{A}+\hat{B}+\hat{C})dt} &= e^{c_3\hat{A}dt/2} e^{c_3\hat{B}dt/2} e^{c_3\hat{C}dt} e^{c_3\hat{B}dt/2} e^{(c_3+c_2)\hat{A}dt/2} \\
 &\quad \times e^{c_2\hat{B}dt/2} e^{c_2\hat{C}dt} e^{c_2\hat{B}dt/2} e^{(c_2+c_1)\hat{A}dt/2} \\
 &\quad \times e^{c_1\hat{B}dt/2} e^{c_1\hat{C}dt} e^{c_1\hat{B}dt/2} e^{(c_1+c_0)\hat{A}dt/2} \\
 &\quad \times e^{c_0\hat{B}dt/2} e^{c_0\hat{C}dt} e^{c_0\hat{B}dt/2} e^{(c_0+c_1)\hat{A}dt/2} \\
 &\quad \times e^{c_1\hat{B}dt/2} e^{c_1\hat{C}dt} e^{c_1\hat{B}dt/2} e^{(c_1+c_2)\hat{A}dt/2} \\
 &\quad \times e^{c_2\hat{B}dt/2} e^{c_2\hat{C}dt} e^{c_2\hat{B}dt/2} e^{(c_2+c_3)\hat{A}dt/2} \\
 &\quad \times e^{c_3\hat{B}dt/2} e^{c_3\hat{C}dt} e^{c_3\hat{B}dt/2} e^{c_3\hat{A}dt/2} \\
 &\quad + O(dt^7),
 \end{aligned}$$

$$c_1 = -1.17767998417887\dots,$$

$$c_2 = 0.235573213359357\dots,$$

$$c_3 = 0.784513610477560\dots,$$

$$c_0 = 1 - 2(c_1 + c_2 + c_3).$$