arXiv:2602.01923v1 [cond-mat.stat-mech] 2 Feb 2026

朗之万分裂方案中的内部轨迹与观测效应

BettinaG. Keller[a)] *Department of Biology, Chemistry, Pharmacy, Freie Universität Berlin, Arnimallee 22, D-14195 Berlin, Germany*（日期：2026年2月3日）

基于算子分裂的朗之万积分器广泛应用于分子动力学。本研究从内部轨迹和观测点的角度考察朗之万分裂方案，以补充现有的基于生成元的分析。通过对基本更新算子进行合并、拆分和循环置换，可以根据轨迹相同或密切相关的情况，将形式上不同的方案归为一组。我们量化了动量更新和观测点所导致的精度差异，并考察其对构型采样、自由能估计和跃迁速率的影响。尽管现代朗之万积分器在标准模拟条件下表现出卓越的稳定性，但在摩擦系数和时间步长较大时，仍会出现细微但系统性的偏差。这些结果阐明了分裂方案之间的精度差异在实践中何时会产生影响，并为理解观测效应提供了直观的框架。

I. 引言

分子动力学（MD）是模拟原子系统的有力工具，但要进行真实的模拟，通常需要控制温度。在分子动力学积分器中，通过修改动量来控制温度。从概念上讲，动量与热浴耦合，使所得的动量统计特性符合目标温度下的麦克斯韦–玻尔兹曼分布[1,2]。恒温器算法既有确定性变体，也有随机变体[3]。恒温器算法既有确定性变体，也有随机变体。

在随机变体中，朗之万恒温器尤为特殊，因为它们可以在随机微分方程层面进行表述，并具有定义明确的生成元，其离散化可直接导出实用的积分方案。

这一特点对于 Dellago等人[4–6]提出的过渡路径采样，以及轨迹重加权技术[7], 尤其重要，因为在这些方法中，分子动力学轨迹本身成为统计分析的对象。在这类方法中，恒温器决定了底层动力学模型及其对应的路径概率测度，而轨迹层面的可观测量可能对这一选择高度敏感[8–10]。对于朗之万动力学，无论在连续时间下，还是在数值积分器所生成的相应离散时间动力学下，路径测度都有明确的定义，因此能够显式构造路径概率和重加权因子[11–13]。

朗之万恒温器方案的推导起点多种多样[14–24]。一类特别有用的方法基于算子分裂[18,19,23,25,26], ：将动力学的生成元分解为若干加性项，并使用贝克–坎贝尔–豪斯多夫展开[27]近似传播算子。朗之万分裂方案在每个积分步中只使用来自单个时间层的力信息，不过，也有人提出了蛙跳式非分裂变体[24,28,29]。尽管推导起点各异，已有研究证明，若干朗之万方案彼此等价——这种等价可能是严格的，也可能是在适当意义下成立——这表明看似不同的算法能够产生相同或密切相关的动力学[13, 29–31]。此外，朗之万积分器可根据恒温器步骤在积分周期中的位置进行分类[32], ，近期进展也已在一篇专门的综述中加以总结[33]。下文将重点讨论朗之万分裂方案，因为这类方案已得到相当详尽的分析[13,23,30,34–37] ，并且特别适合显式构造和分析路径作用量。

对朗之万方案进行严格分析——涵盖遍历性、时间可逆性和收敛性等性质——需要从概率分布及其时间演化的层面加以表述。这引出了一个基于李乌维尔方程和福克–普朗克方程的框架，能够深入揭示确定性与随机动力学的结构。与此同时，大多数分子动力学从业者从单个粒子的运动方程出发来理解积分格式。标准的分子动力学课程进一步强化了这一视角：其中通常通过运动方程的泰勒展开来介绍积分格式。更重要的是，在分子动力学软件的开发、实现和维护过程中，人们会直接处理更新规则本身。这就要求深入理解这些更新规则如何转化为轨迹。

尽管从分布层面描述朗之万方案对于全面理解这些算法至关重要，但许多与实际应用相关的收敛性问题，仅从积分器方程本身的层面就能直接理解。在实际模拟中，位置和动量很少会在每个积分步都写入磁盘；通常会在输出帧之间执行数百或数千个积分步。从这一角度看，写出点之间生成的内部轨迹发挥着核心作用，却很少得到明确考察——

a)bettina.keller@fu-berlin.de

因此，在这项工作中，我着重分析和比较这些内部轨迹，并表明这一视角有助于深入理解不同朗之万分裂方案的行为和精度。

II. 理论

A. 从朗之万动力学到更新算子

考虑一个质量为 m 的粒子，在一维位置空间 $q \in \mathbb{R}$ 中按照欠阻尼朗之万动力学运动

$$\begin{pmatrix}\dot{q}\\ \dot{p}\end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix}p/m\\ 0\end{pmatrix}}_{A} + \underbrace{\begin{pmatrix}0\\ -\nabla_q V(q)\end{pmatrix}}_{B} + \underbrace{\begin{pmatrix}0\\ -\xi p + \sigma\,\eta(t)\end{pmatrix}}_{O}. \quad (1)$$

在式1中，$V(q)$是势能函数，$\nabla_q = \partial/\partial q$表示对位置坐标的梯度，$\xi$ 是碰撞率或摩擦率（单位为s^{-1}），$\sigma = \sqrt{2\xi k_B T m}$，其中 T 是温度，k_B 是玻尔兹曼常数。随机过程 $\eta \in \mathbb{R}$ 表示具有零均值和单位方差的高斯白噪声，$\langle \eta(t)\rangle = 0$ 以及 $\langle \eta(t)\eta(t')\rangle = \delta(t-t')$，其中 $\delta(t-t')$ 是狄拉克δ函数。我们用点记号表示时间导数：$\dot{q} = \partial q/\partial t$。$(q(t)\ p(t)) \subset \mathbb{R}^2$ 表示时刻 t的系统状态，它由位置 $q(t)$和动量 $p(t) = m\dot{q}(t)$组成。

式 1 将向量场分解为三项：A、B 和O。A 影响位置 q，而 B 和 O 影响动量 p，其中 O 包含随机过程$\eta(t)$。确定性部分 A和 B 表示具有解析解的常微分方程。随机部分 O 表示奥恩斯坦–乌伦贝克过程 $\dot{p} = -\xi p + \sigma\eta(t)$，同样可以精确求解[7]。利用这些解析解，可以构造以下基本更新算子[7]

$$\mathcal{A}\begin{pmatrix}q_k\\ p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_k + a p_k\\ p_k\end{pmatrix} \quad (2a)$$

$$\mathcal{B}\begin{pmatrix}q_k\\ p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_k\\ p_k + b(q_k)\end{pmatrix} \quad (2b)$$

$$\mathcal{O}\begin{pmatrix}q_k\\ p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_k\\ d\,p_k + f\,\eta_k\end{pmatrix}, \quad (2c)$$

参数为

$$a = \Delta t \frac{1}{m} \quad (3a)$$

$$b(q_k) = -\Delta t \nabla V(q_k) \quad (3b)$$

$$d = e^{-\xi \Delta t} \quad (3c)$$

$$f = \sqrt{k_B T m (1 - e^{-2\xi\Delta t})}, \quad (3d)$$

其中，Δt 为时间步长，η_k 为零均值 μ 、单位方差 σ^2的正态分布随机数，$\eta_k \sim \mathcal{N}(\mu,\ \sigma^2) = \mathcal{N}(0,\ 1)$。参数名 a和 b分别对应算子 $\mathcal{A}$ 和 $\mathcal{B}$，而d 和 f 表示 Ornstein–Uhlenbeck 步中的耗散和涨落。按照标准术语，$\mathcal{A}$更新称为漂移步，$\mathcal{B}$更新称为力步（或踢步），$\mathcal{O}$更新称为温控步。

在式 2a 至 2c 中，初始状态 $(q(t)\ p(t)) = (q_k, p_k)$在时间区间 Δt内演化。基本更新算子可以按不同顺序串联，从而得到一系列称为朗之万分裂方案的分子动力学积分器[19,23,30,32,34–36]。如果基本更新算子只执行半个时间步长$\frac{\Delta t}{2}$，则用撇号表示，例如

$$\mathcal{A}'\begin{pmatrix}q_k\\ p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_k + \frac{\Delta t}{2}\frac{1}{m}p_k\\ p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_k + a' p_k\\ p_k\end{pmatrix}. \quad (4)$$

相应地，将方程 3a–3d 中的 Δt 替换为 $\frac{\Delta t}{2}$，即可得到 a'、b'、d' 和 f'。

B. 基于 ABO 更新算子的朗之万积分器

在生成元表述中，对特定更新算子序列的推导和分析最为严谨。在这一框架下，随机微分方程（方程 1）与其（向后）Kolmogorov生成元 $\mathcal{L} = \mathcal{L}_A + \mathcal{L}_B + \mathcal{L}_O$ 相关联，其中 $\mathcal{L}_A$、$\mathcal{L}_B$ 和 $\mathcal{L}_O$ 分别是对应于向量场 A、B 和 O 的生成元。这种分解是精确的，但相应的时间演化算子 $\exp(\Delta t\,\mathcal{L})$ 通常无法精确地分解为各个传播子的乘积。因此，采用 Lie-Trotter 和 Trotter-Strang分裂来构造对 $\mathcal{L}$ 的系统近似。这些算子分裂可直接转化为作用于单条轨迹 [13、18、37–39] 的具体更新算子序列。

在本研究中，我有意将讨论限定在显式更新算子以及分子动力学模拟中执行的操作这一层面，并考察能否直接从这种表示中获得更多洞见。单个分子动力学积分步的一般方程为

$$\mathcal{U}_{\text{scheme}}\begin{pmatrix}q_k\\ p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_{k+1}\\ p_{k+1}\end{pmatrix} \quad (5)$$

其中，$\mathcal{U}_{\text{scheme}}$ 表示完整分子动力学步的更新算子，下标“scheme”表示该算子所依据的分裂方案。k 表示积分步的索引，因此时间为 $t = k\Delta t$。*a. 一阶 ABO 方案* 一阶积分方案对应于在一个完整时间步长 Δt 内依次应用三个更新算子 A、B 和 O。例如，ABO 方案对应的更新算子为

$$\mathcal{U}_{\text{ABO}}\begin{pmatrix}q_k\\ p_k\end{pmatrix} = \mathcal{O}\mathcal{B}\mathcal{A}\begin{pmatrix}q_k\\ p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_{k+1}\\ p_{k+1}\end{pmatrix} \quad (6)$$

ABO方案				AP方案
对称		非对称	一阶	对称
$\mathcal{U}_{BAOAB} = \mathcal{B}'\mathcal{A}'\mathcal{O}\mathcal{A}'\mathcal{B}'$	$\mathcal{U}_{OABAO} = \mathcal{O}'\mathcal{A}'\mathcal{B}\mathcal{A}'\mathcal{O}'$	$\mathcal{U}_{BAOA} = \mathcal{A}'\mathcal{O}\mathcal{A}'\mathcal{B}$	$\mathcal{U}_{ABO} = \mathcal{O}\mathcal{B}\mathcal{A}$	$\mathcal{U}_{APA} = \mathcal{A}'\mathcal{P}\mathcal{A}'$
$\mathcal{U}_{ABOBA} = \mathcal{A}'\mathcal{B}'\mathcal{O}\mathcal{B}'\mathcal{A}'$	$\mathcal{U}_{OBABO} = \mathcal{O}'\mathcal{B}'\mathcal{A}\mathcal{B}'\mathcal{O}'$	$\mathcal{U}_{ABOB} = \mathcal{B}'\mathcal{O}\mathcal{B}'\mathcal{A}$	$\mathcal{U}_{AOB} = \mathcal{B}\mathcal{O}\mathcal{A}$	$\mathcal{U}_{PAP} = \mathcal{P}'\mathcal{A}\mathcal{P}'$
$\mathcal{U}_{BOAOB} = \mathcal{B}'\mathcal{O}'\mathcal{A}\mathcal{O}'\mathcal{B}'$	$\mathcal{U}_{AOBOA} = \mathcal{A}'\mathcal{O}'\mathcal{B}\mathcal{O}'\mathcal{A}'$	$\mathcal{U}_{BOAO} = \mathcal{O}'\mathcal{A}\mathcal{O}'\mathcal{B}$		

表 I. 朗之万分裂方案

基本更新算子按从右到左的顺序应用，而方案名称则从左到右读取。因此，对于非对称方案，算子的顺序与方案名称中的字母顺序相反。这类方案对应于李–特罗特分裂，在弱意义下具有一阶精度。

原则上，更新算子有 $3! = 6$ 种不同的排列。不过，给定序列的循环置换会产生等价方案，因为它们仅对应于沿周期性重复的算子序列移动起点（或“读帧”）：

$$\begin{aligned}(ABO)(ABO)(ABO)\ldots &= A(BOA)(BOA)BO\ldots \\ &= AB(OAB)(BOA)O\ldots \end{aligned} \quad (7)$$

这表明 ABO、BOA 和 OAB 仅在算子序列的循环移位上有所不同。因此，$\mathcal{A}$、$\mathcal{B}$ 和 $\mathcal{O}$ 的六种可能排列可归为两类不同的一阶积分器等价类（见图 1d 和表 I）。

b. 非对称*ABO*方案。非对称二阶方案源自形式为 $XY'ZY'$ 和 $ZY'XY'$ 的 Strang 型复合，其中X，Y，$Z \in \{\mathcal{A},\mathcal{B},\mathcal{O}\}$, $X \neq Y \neq Z$，撇号表示半步。两种序列类型与 $3! = 6$ 种可能的算子分配共得到 12 种方案。由于每个四算子序列都有四种循环置换（例如 $BAOA \sim AOAB \sim OABA \sim ABAO$），因此可归为三类不同的等价类（表 I）。*c.* 对称*ABO*方案。对称二阶方案源自形式为$X'Y'ZY'X'$的 Strang 型复合，其中 X，Y，$Z \in \{\mathcal{A},\mathcal{B},\mathcal{O}\}$, $X \neq Y \neq Z$，撇号表示半步。形式上，此类复合共有 $3! = 6$ 种（表 I）。OBABO 积分方案可视为 Bussi–Parrinello恒温器的一种极限情形，其中恒温器独立地作用于每个自由度[19]。

C. 基于 AP更新算子的朗之万积分器

分解方程 1 的另一种方法是将其拆分为一个向量场 A，它控制位置的时间演化；以及一个向量场 P，它控制动量的时间演化[20]

$$\begin{pmatrix}\dot{q}\\ \dot{p}\end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix}p/m\\ 0\end{pmatrix}}_{A} + \underbrace{\begin{pmatrix}0\\ -\nabla_q V(q) - \xi p + \sigma\,\eta(t)\end{pmatrix}}_{P}. \quad (8)$$

A 的更新算子由方程 2a 给出。向量场 P 将 B向量场和 O向量场合并为一个关于动量的随机微分方程：

$$\dot{p} = -\nabla_q V(q) - \xi p + \sigma\,\eta(t)\,. \quad (9)$$

式 9 描述了一个奥恩斯坦–乌伦贝克过程，其中还包含一个由保守力产生的确定性漂移项。在一次 $\mathcal{P}$ 更新期间，位置保持不变，因此 $-\nabla_q V(q)$ 在整个区间 $[t, t+\Delta t]$ 内为常数。在此条件下，式 9 可得出以下精确更新？：

$$\mathcal{P}\begin{pmatrix}q_k\\ p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_k\\ \frac{1-d}{\xi\Delta t}\,b(q_k) + d p_k + f\,\eta_k\end{pmatrix}, \quad (10)$$

其中，$\eta_k \sim \mathcal{N}(0,\ 1)$ 是一个零均值、单位方差的正态分布随机数，参数 $b(q_k)$、d 和 f 定义见式 3b、3c 和 3d。与前文一样，撇号表示该更新算子以半个时间步长执行。

对向量场进行 AP 分裂可得到两种对称格式（表 I）。方案 APA 是随机位置 Verlet 积分方法，而方案 PAP 是随机速度 Verlet 积分方法 [20]。

D. 循环置换

分子动力学轨迹通常以稀疏的间隔记录，例如每 100 或 1000 个积分步记录一次。因此，有必要区分内部轨迹（即积分器生成的中间步骤）与记录轨迹（即写入磁盘的轨迹）。给定算子序列的循环置换不会改变内部轨迹，而是会产生两种不同的影响：(*i*) 将进入周期性重复的积分周期的起点沿有限数量的更新操作平移；(*ii*) 将记录位置和动量的周期内时刻平移。式 7 展示了这一点：算子序列 $(\mathcal{O}\mathcal{B}\mathcal{A})^n$和 $\mathcal{O}\mathcal{B}(\mathcal{A}\mathcal{O}\mathcal{B})^{n-1}\mathcal{A}$ 是相同的。第一种影响可以解释为初始条件[2,30]的有限平移。具体而言，如果将 $(q_0,\ p_0)$ 用作 ABO 方案的初始条件，那么对于 BOA 方案，若选择 $\mathcal{A}(q_0,\ p_0)^\top$ 作为初始条件，在采用相同随机数序列的情况下，将得到相同的内部轨迹[31]。对于随机积分

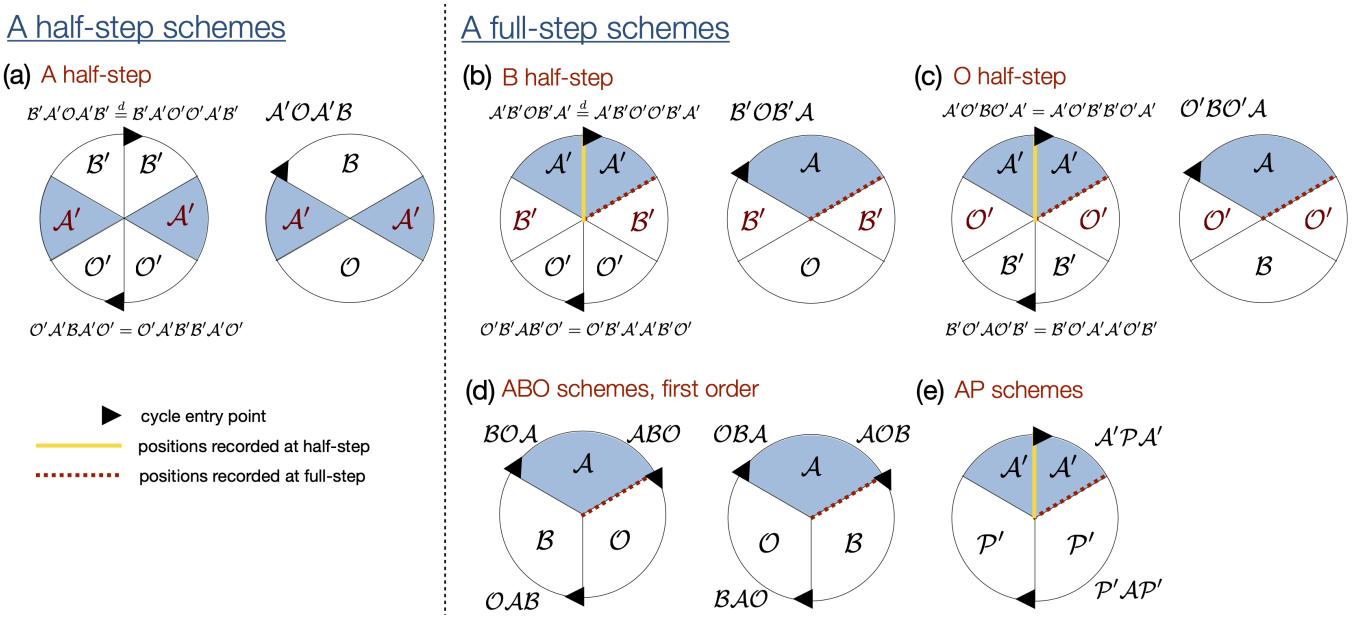


图 1. 可视化与分类　　朗之万分裂算子的分类。基本更新算子从右向左应用。

格式，对初始条件进行此类有限平移不会影响收敛性质或长时间统计量[39]。因此，第一种影响不会改变方案的精度。然而，第二种影响涉及积分周期内的观测点，却可能显著影响测量量的精度，并将在第 IIIF 节中详细分析。

III. 结果

图 1 对表 I 中的 13 种朗之万积分方案进行了可视化。这些方案根据其更新算子序列分组。

A. 基本更新算子的合并与分裂

在内部轨迹层面上分析朗之万方案时，一个有用的观察是：将基本更新算子（$\mathcal{A}$、 $\mathcal{B}$、 $\mathcal{O}$或 $\mathcal{P}$）作用于一个完整时间步长，与以一半时间步长作用两次得到相同结果。对于位置更新 $\mathcal{A}$ 和保守力更新 $\mathcal{B}$，这一等价关系精确成立（见补充信息）

$$\mathcal{A}'\mathcal{A}' = \mathcal{A}, \quad \mathcal{B}'\mathcal{B}' = \mathcal{B}. \tag{11}$$

对于恒温步骤 $\mathcal{O}$ 而言，这一点并不显而易见，因为两个半步更新需要两个随机数，而整步更新只使用一个随机数。对于两个半步，可得到

$$\mathcal{O}'\mathcal{O}'\begin{pmatrix} q_k \\ p_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_k \\ d\,p_k + f'\left(d'\,\eta_k^{(1)} + \eta_k^{(2)}\right) \end{pmatrix} \tag{12}$$

其中 $\eta_k^{(1)}, \eta_k^{(2)} \sim \mathcal{N}(0,1)$ 是相互独立且服从正态分布的随机变量。只要整步噪声 η_k 满足 $f\eta_k = f'\left(d'\,\eta_k^{(1)} + \eta_k^{(2)}\right)$，该更新在统计上就等价于单个整 $\mathcal{O}$ 步（公式 2c）。因此， η_k 可以写成加权和

$$\eta_k = \frac{f'}{f}d'\,\eta_k^{(1)} + \frac{f'}{f}\,\eta_k^{(2)}. \tag{13}$$

由于 $\eta_k^{(1)}$ 和 $\eta_k^{(2)}$ 是相互独立的标准正态随机变量， η_k 也服从正态分布，其

$$\mu = 0, \qquad \sigma^2 = \left(\frac{f'}{f}d'\right)^2 + \left(\frac{f'}{f}\right)^2 = 1. \tag{14}$$

因此， $\eta_k \sim \mathcal{N}(0,\ 1)$。

这一构造表明，用于半步更新的两个相互独立的高斯随机变量可以映射为完整一步中的单个高斯随机变量，反之亦然。尽管在单条轨迹层面上，两次半步更新与一次完整步更新并不相同，但它们生成相同的动量分布。因此，在分布层面上，

$$\mathcal{O}'\mathcal{O}' \overset{d}{=} \mathcal{O}, \tag{15}$$

其中 $\overset{d}{=}$ 表示分布相等。（这一论证也可以用时间演化算子[29]来表述。）

图2显示，公式15中的关系在数值实验中成立。测试粒子是一个碳原子，其质量为 $m = 12\text{g/mol}$，温度为 300 K。在模拟中，使用相同的初始动量 p_0初始化一组轨迹。动量分布

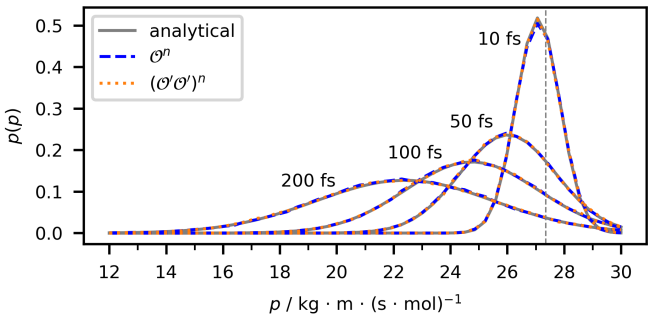


图2. 在 $T = 300$K 下，以完整 O步和半 O步进行传播得到的质量为 $m = 12.0$g/mol 的动量分布，以及解析动量分布。竖直虚线表示初始条件 p_0。

通过整步更新 $\mathcal{O}^n$ （蓝色虚线）传播轨迹得到的分布，与通过半步更新（$\mathcal{O}'\mathcal{O}'$）^{n} （橙色点线）传播轨迹得到的分布完全一致，其中 n 是迭代次数。此外，这两种分布都与解析分布（灰线）重合。

根据类似的论证（见补充信息），两个半步 $\mathcal{P}$ 更新在分布上等价于一次完整步更新。

$$\mathcal{P}'\mathcal{P}' \stackrel{d}{=} \mathcal{P}. \tag{16}$$

简言之，合并或拆分基本更新步不会改变该方案的统计性质。

B. 对称与非对称 ABO 方案 es

上一节的直接推论是，六种对称ABO方案可以分为三对，每一对执行相同的积分子步序列，因此会生成相同的内部轨迹。图1a以 BAOAB 和 OABAO 这一对为例进行了说明。由于拆分基本更新算子不会改变算子序列的统计性质，中央的完整更新可以替换为连续的两个半步更新：$\mathcal{B}'\mathcal{A}'\mathcal{O}\mathcal{A}'\mathcal{B}' \stackrel{d}{=} \mathcal{B}'\mathcal{A}'\mathcal{O}'\mathcal{O}'\mathcal{A}'\mathcal{B}'$ 以及类似地 $\mathcal{O}'\mathcal{A}'\mathcal{B}\mathcal{A}'\mathcal{O}' \stackrel{d}{=} \mathcal{O}'\mathcal{A}'\mathcal{B}'\mathcal{B}'\mathcal{A}'\mathcal{O}'$。由此可见，BAOAB 和 OABAO 通过对算子序列进行循环置换相互关联，因此二者的差别仅在于进入周期性重复积分周期的起点不同。在图1.a中，BAOAB 从顶部进入该周期，而 OABAO 从底部进入。除了起点的这一偏移外，两种方案执行完全相同的更新操作序列，因此会生成相同的内部轨迹。

类似地，ABOBA 是 OB- ABO 的循环置换（图 1.b），BOAOB 是 AOBOA 的循环置换（图 1.c）。

每一对对称ABO方案都可以通过合并周期边界处连续的两个半步更新，与一个非对称方案联系起来。例如，在 BAOAB 方案中（图 1.a），将第 $(k-1)$ 次迭代的最后一个 $\mathcal{B}'$ 更新与第 k 次迭代的初始$\mathcal{B}'$ 更新合并，可得到 BAOA 方案：$\ldots\mathcal{B}'\ \mathcal{B}'\mathcal{A}'\mathcal{O}\mathcal{A}'\mathcal{B}'\ \mathcal{B}'\ldots = \ldots\mathcal{B}\mathcal{A}'\mathcal{O}\mathcal{A}'\ \mathcal{B}\ldots$。依照同样的论证，ABOBA 和 OBABO 方案等价于 ABOB 方案，而 BOAOB 和 AOBOA 方案等价于 BOAO 方案（图 1b 和 c）。（这些等价关系也可以在时间演化算子[2,30]的层面推导得出。）

这一观察为二阶朗之万积分器建立了一种自然且系统的分类方法，依据是迭代时哪个更新算子仍保留半步特征：$\mathcal{A}$ 半步方案（图 1.a）、 $\mathcal{B}$ 半步方案（图 1.b）和 $\mathcal{O}$ 半步方案（图 1.c）。

C. A 全步方案

图 1b 和 c 中的方案与 $\mathcal{A}$半步方案不同，因为它们实际上迭代的是完整的位置更新和完整的动量更新。也就是说，它们的更新序列可写成通用形式（$\mathcal{A}\mathcal{P}_{\text{gen}}$）^{n}，其中 $\mathcal{P}_{\text{gen}}$ 表示通用动量更新算子。从这个意义上说，它们与图 1d 所示的一阶格式密切相关，后者同样迭代完整的位置和动量更新。

同样，对称格式 APA 和 PAP 是彼此的循环置换，并具有相同的更新结构（$\mathcal{A}\mathcal{P}$）^{n}。

因此，图 1b–d 中的所有方案在结构上等价，因为它们通过交替进行位置空间和动量空间中的完整更新来生成轨迹。它们的区别仅在于动量更新的构造方式。

D. 线性势中的动量更新

在图 1.b-d 中，动量更新由 $\mathcal{B}$-更新和 $\mathcal{O}$-更新组合而成。由此得到的完整步长动量更新如下（见补充信息）：

$$\mathcal{B}'\mathcal{O}\mathcal{B}'\begin{pmatrix}q_k\\p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_k\\ \frac{d+1}{2}b(q_k) + dp_k + f\eta_k\end{pmatrix} \tag{17a}$$

$$\mathcal{O}'\mathcal{B}\mathcal{O}'\begin{pmatrix}q_k\\p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_k\\ d'b(q_k) + dp_k + f\eta_k\end{pmatrix} \tag{17b}$$

$$\mathcal{B}\mathcal{O}\begin{pmatrix}q_k\\p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_k\\ b(q_k) + dp_k + f\eta_k\end{pmatrix} \tag{17c}$$

$$\mathcal{O}\mathcal{B}\begin{pmatrix}q_k\\p_k\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}q_k\\ db(q_k) + dp_k + f\eta_k\end{pmatrix} \tag{17d}$$

这些复合动量算子都以通常的形式定义完整步长的动量更新

$$p_{k+1} = c\cdot b(q_k) + dp_k + f\eta_k \tag{18}$$

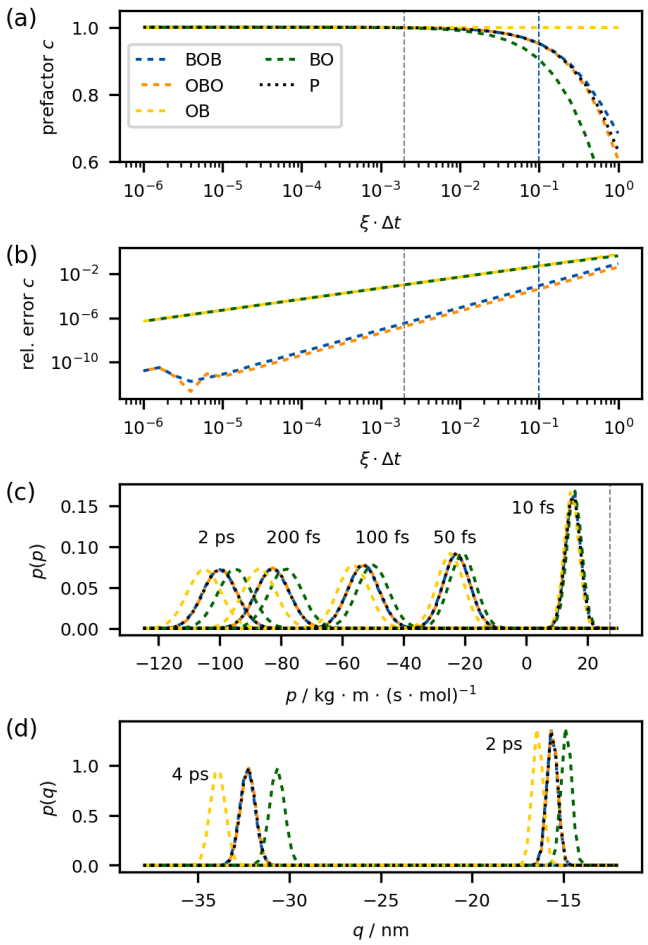


图 3. a）公式 18 中的前因子 c，它缩放公式 17a–17d 中的力踢；与 $\mathcal{P}$（公式 10）中的精确力踢前因子进行比较。b） c 相对于 $\mathcal{P}$ 的相对误差。竖直虚线表示 $\xi\Delta t = 0.002$，对应于典型的分子动力学设置： $\Delta t = 2\,\text{fs}$ 和 $\xi = 1\ \text{ps}^{-1}$。c）采用模拟参数 $m = 12\ \text{g/mol}$、$T = 300\ \text{K}$、$\xi = 10\ \text{ps}^{-1}$、$\Delta t = 10\ \text{fs}$、$\kappa = 1000\ \text{kJ/(mol·nm)}$ 时动量分布的时间演化。竖直虚线表示初始条件 p_0。d）位置分布的时间演化。

其中， $\mathcal{O}$步贡献项 $dp_k + f\eta_k$，而前因子 c 调节力踢（$\mathcal{B}$ 步）的相对强度。不同方案中的此前因子各不相同。

为评估四种动量更新方案的准确性，可以将它们与恒力作用下奥恩斯坦-乌伦贝克过程（公式 9）的精确更新进行比较，该更新由 $\mathcal{P}$ 更新算子（公式 10）给出。在 $\mathcal{P}$ 更新中，恒温步骤还会贡献一项 $dp_k + f\eta_k$，而力踢则以因子 $(1-d)/(\xi\Delta t)$ 加入。

图3a和b显示了前因子 c以及相对于 $\mathcal{P}$ 的误差随 $\xi\Delta t$ 在数个数量级上的变化。对于BOB和OBO动量更新，前因子差值（$c_{\text{scheme}} - c_P$），其中 c_P 是 $\mathcal{P}$的前因子，相对于 $\xi\Delta t$ 为二阶（见SI）。因此，即使在 $\xi\Delta t$取值很大时，它们的前因子仍与精确更新 $\mathcal{P}$的前因子非常接近。这种行为符合预期，因为BOB和OBO对应于动量更新的Strang分裂[40] 。

相比之下，BO 和 OB 动量更新的相对误差比对称动量更新大几个数量级。由于 BO 和 OB 动量更新会引入显著误差，由这些更新构造的方案（图 1d）相比其对称版本（图 1b 和 c）精度相应较低。

不过，对于 Δt 和 ξ 的典型取值（图 3 中的竖直灰线），非对称动量更新的相对误差仍然很小，只有 10^{-4} 量级。这促使我们进一步分析动量更新在精度上的这些差异如何影响最终的动量分布。

考虑线性势 $V(q) = \kappa q$。此处，力踢 $b(q_k) = -\Delta t\,\kappa$ 与位置无关，因此动量更新也与 q_k 无关，可以独立于位置更新进行分析。给定初始条件 p_0，经过一般动量更新（见公式 18）迭代 n 次后，动量服从正态分布（见补充信息）： $p_n \sim \mathcal{N}(\mu_n,\ \sigma_n^2)$，其中

$$\mu_n = d^n p_0 - c\cdot\kappa\Delta t\frac{1-d^n}{1-d},\quad \sigma_n^2 = f^2\,\frac{1-d^{2n}}{1-d^2}. \tag{19}$$

因此，目前讨论过的所有动量更新方案都会产生相同的含时方差 σ_n^2，并收敛至麦克斯韦-玻尔兹曼分布的方差 $\sigma_{n\to\infty}^2 = k_B T m$。

随着系统沿线性势加速，其沿力的方向上的平均动量不断增加，直至达到终端值

$$\mu_{n\to\infty} = c\cdot\kappa\Delta t\frac{1}{1-d}. \tag{20}$$

图3.c展示了这一点。模拟采用了与图2相同的测试粒子和初始条件。2 ps时的分布对应于终端动量分布 $p_n \sim \mathcal{N}(\mu_{n\to\infty},\ \sigma_{n\to\infty}^2)$。P、BOB 和 OBO 更新得到的分布与解析解几乎无法区分，而 BO 分布则滞后，OB 分布则超前。由于位置更新基于这些动量分布，BO 和 OB 的位置分布随时间推移与精确结果的偏差越来越大（图3.d）

轨迹系综沿线性势向下漂移的不同速度，在参考文献 13 中称为终端漂移。该研究建议重新缩放 A 更新和 B更新中的时间步长，以校正终端漂移的差异。

在 $\Delta t = 2\text{fs}$和 $\xi = 1\,\text{ps}^{-1}$的典型分子动力学设置下（图 3.a和b中的灰色竖线），不同朗之万方案之间终端漂移的差异过小，无法可视化。因此，图3c和d采用更大的设置（图3.a和b中的蓝色竖线），以获得清晰

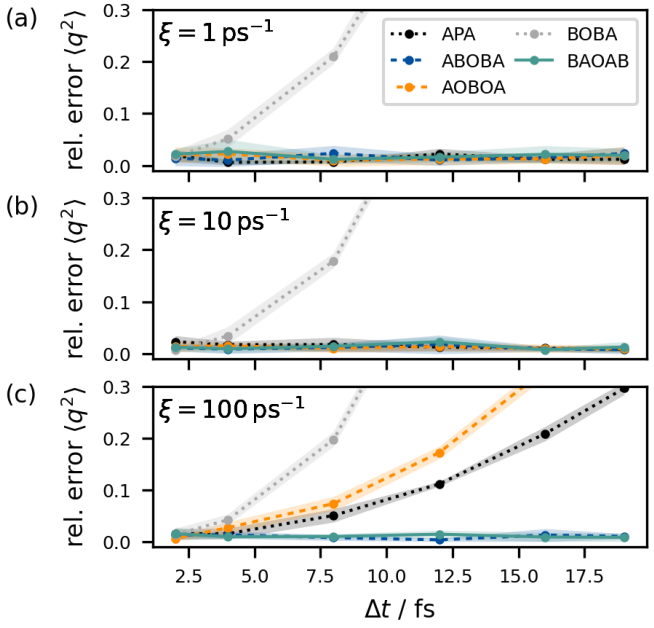


图 4. $\langle q^2 \rangle$ 在谐势 $V(q) = \frac{1}{2}\kappa x^2$ $\kappa = 1.2 \cdot 10^5$ / · ²) (kJ (mol nm)) 中的相对误差，模拟参数为： $m = 12\,\mathrm{g/mol}$、 $T = 300\mathrm{K}$，以及 (a)： $\xi = 1\,\mathrm{ps}^{-1}$、(b)： $\xi = 10\,\mathrm{ps}^{-1}$、(c)： $\xi = 100\,\mathrm{ps}^{-1}$。

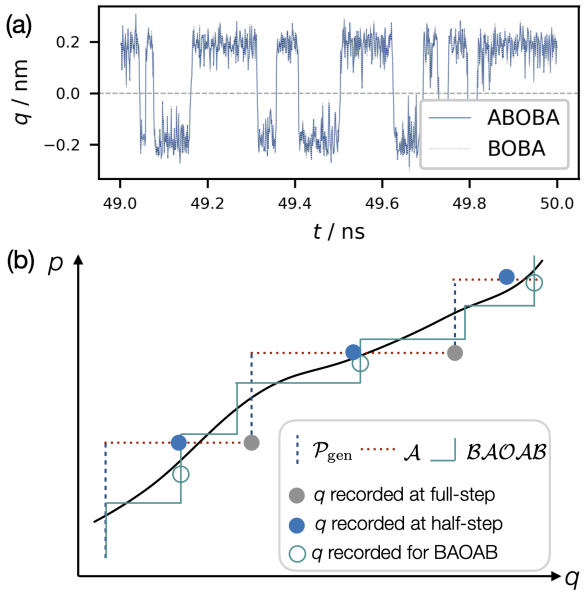


图 5. (a) ABOBA 和 BOBA 产生的轨迹。该系统为图 6 所示无倾斜双阱势中的粒子。(b) $\mathcal{A}$-半步和 $\mathcal{A}$-半步方案在相空间中的路径示意图。

可见的漂移。该力常数可代表键振动中出现的力。

E. 谐势中的动量更新

线性势代表一般势的一阶局部近似。在更高阶近似中，动量更新与位置更新耦合，因此动量更新中的误差会直接传播到位置动力学中。对于线性势表现已经不佳的一阶 ABO 方案，在更真实的情形下不太可能可靠。因此，下面将讨论重点放在二阶 ABO 方案上。首先，我考虑整步方案，这类方案在半时间步记录位置，即 $\mathcal{A}'\mathcal{P}_{\mathrm{gen}}[\mathcal{A}\mathcal{P}_{\mathrm{gen}}]^{n-1}\mathcal{A}' = [\mathcal{A}'\mathcal{P}_{\mathrm{gen}}\mathcal{A}']^n$，其中动量更新 $\mathcal{P}_{\mathrm{gen}}$ 通过 P、BOB 或 OBO 计算。测试系统仍为一个处于 300 K、在谐势 $V(q) = \kappa q^2$ with$\kappa = 1.2 \cdot 10^5 \mathrm{kJ/(mol \cdot nm^2)}$ 中运动的单个碳原子。这对应于一个相对较硬的谐势，代表共价 C–C 键的伸缩模式。

势能极小值附近的二阶近似就是谐势。对于朗之万积分器而言，这种势能是一个严格的压力测试，因为离散时间积分器所诱导的稳态分布可以通过解析方法计算，并与精确的连续分布直接比较。推导稳态矩 $\langle q^2 \rangle$、$\langle p^2 \rangle$ 和 $\langle qp \rangle$ 的一般过程见文献 30 和 2。具体结果文献 13 总结了朗之万分裂方案的相关结果。图 4 展示了 $\langle q^2 \rangle$ 的数值结果。

在低摩擦和中等摩擦下（图 4a 和 b）， $[\mathcal{A}'\mathcal{P}_{\mathrm{gen}}\mathcal{A}']^n$ 形式的方案在很宽的时间步长范围内都能产生极为准确的位置分布。在数值精度范围内， $\langle q^2 \rangle$ 中的误差基本为零。时间步长可以增大至力计算的稳定性极限，而不会明显损失精度。然而，在高摩擦下，这些方案之间出现了定性差异。APA 和 AOBOA 方案的误差会增大，而 ABOBA 方案仍持续表现出趋于零的误差。

$[\mathcal{A}'\mathcal{P}_{\mathrm{gen}}\mathcal{A}']^n$ 形式的方案隐含地假设，动量更新期间力保持恒定。对于线性势，这一假设完全成立，因此 P 更新是精确的。然而，对于更一般的势，力取决于位置，并且会在动量更新期间发生变化。在势能极小值附近，力近似与位置成线性关系，对应于谐势。对于这种情况，可以证明，BOB 动量更新能够保持正确的平稳构型分布[13,23,30]。

公式 18 从另一个角度说明了动量更新如何影响位置分布。在一个线性势中，前因子 c 的变化会有效地改变势的斜率，从而影响漂移。在一个谐势中，前因子会有效地改变势的刚度，因此，不同的动量更新方案会在曲势中产生不同的稳态分布。

F. 位置更新

到目前为止，我主要讨论了动量更新；现在转而讨论位置更新。由于位置更新算子只有一个基本形式，因此在这一层面上不存在其他组合方式。然而，事实证明，在积分周期中的哪个时点记录位置起着重要作用。

图 1b 和 c 中的对称算法与其非对称对应方案仅有一处不同：在半步位置更新后将位置写入文件（黄色线），而在非对称方案中，则在完整时间步长处记录位置（红色虚线）。然而，改变观测点会显著降低所测位置分布的准确性。图 4（灰色线）展示了 BOBA 方案中的这一效应。

这一结果令人惊讶，因为 ABOBA 和 BOBA 生成相同的内部轨迹。图 5.a 展示了双阱势中一个粒子的两条 50 ns 轨迹的最后一纳秒，这两条轨迹分别由 ABOBA 和 BOBA 方案生成。时间步长为$\Delta t = 40$ fs，每 1 ps 记录一次位置，且两次模拟使用相同的随机数序列。即使时间步长较大、模拟时间较长且多次穿越势垒，两次模拟仍无法区分。

因此，测得的分布在精度上的差异并非源于积分格式本身的不同，而是来自不同的观测点。尽管记录的轨迹之间的差异小于图中的视觉分辨率，但这些差异具有系统性，因此会导致测得的分布产生系统性偏差。

通过可视化朗之万格式在相空间中生成的时间离散路径，可以理解这一点（图 5.b）。黑色曲线表示时间步长趋于零时得到的参考路径。ABOBA 和 BOBA 方案通过交替进行动量空间中的完整更新（蓝色虚线段）和位置空间中的完整更新（红色点线段）来近似这条路径。

当时间步长足够小时，离散更新仍接近参考路径；而随着步长增大，偏差也随之增大。重要的是，经过细化（更精细）离散化后的步进点位于较粗离散化的步进点之内。因此，在半步处记录位置，相当于在每个离散更新周期内居中的点上采样轨迹；而在整步处记录位置，则相当于对位置更新进行右端点近似。

图 5.b 并非数学证明，但它提供了直观的几何图像，有助于解释观察到的收敛行为。

G. $\mathcal{A}$半步方案

前文已经证明，基本更新算子可以拆分和合并，而不改变最终得到的积分器（式 XX）。下面将讨论基本更新算子是否也可以重新排序。

对两个更新算子重新排序会改变算法的内部结构，除非相应的算子彼此对易。例如，先执行恒温步骤 $\mathcal{O}$，再进行力更新 $\mathcal{B}$，所得结果与反向执行这些步骤不同；比较式 17d 和 17c 即可看出这一点。因此，对易子 $[\mathcal{B}, \mathcal{O}] = \mathcal{B}\mathcal{O} - \mathcal{O}\mathcal{B}$ 不为零。所有其他不同的基本更新算子对也同样如此（见补充信息）。

因此，无法对位置和动量更新通过有效半步推进的算法（图 1a）重新排序，使两个位置更新连续进行并构成一个有效的整步更新（图 1b 和 d）。所以，$\mathcal{A}$半步方案与 $\mathcal{A}$全步方案确实不同。

特别是，$\mathcal{A}$半步方案 BAOAB 被发现具有很高的精度。图 4 验证了这一点：在所有考察的时间步长和摩擦区间内，$\langle q^2 \rangle$ 中的数值误差实际上为零。通过可视化该方案在相空间中生成的时间离散路径（图 5.b 中的青绿色实线），可以理解 BAOAB 的高精度。从内部来看，BAOAB 交替进行位置的半步更新，以及 $\mathcal{B}$ 和 $\mathcal{O}$ 算子的整步更新。与相同时间步长下的 ABOBA 算法相比，这实际上相当于以一半的步长分辨轨迹。无论是在起始处（BAOA）还是在 $\mathcal{B}$ 更新的中点（BAOAB）将位置写入文件，都不会影响测得的位置分布的精度，因为 B 步只更新动量。不过，众所周知，这会影响测得的动量分布的精度。

H. 双阱势

这自然引出了一个问题：在典型的分子动力学应用中，这些精度差异是否重要？图 4 和图 5 展示了朗之万分裂方案的一个显著特点。尽管与精度很高的 ABOBA 方案相比，BOBA 方案测得的位置分布精度明显较低，但两种算法生成的内部轨迹相同。因此，极小值内的涨落以及跨越势垒的转变均不受影响。具体而言，两种方案在势垒两侧停留的时间相同，这意味着自由能估计在很大程度上不受算法选择的影响。此外，由于 ABOBA 的构型精度基本上与时间步长无关，因此 BOBA 在自由能层面也继承了这种稳健性

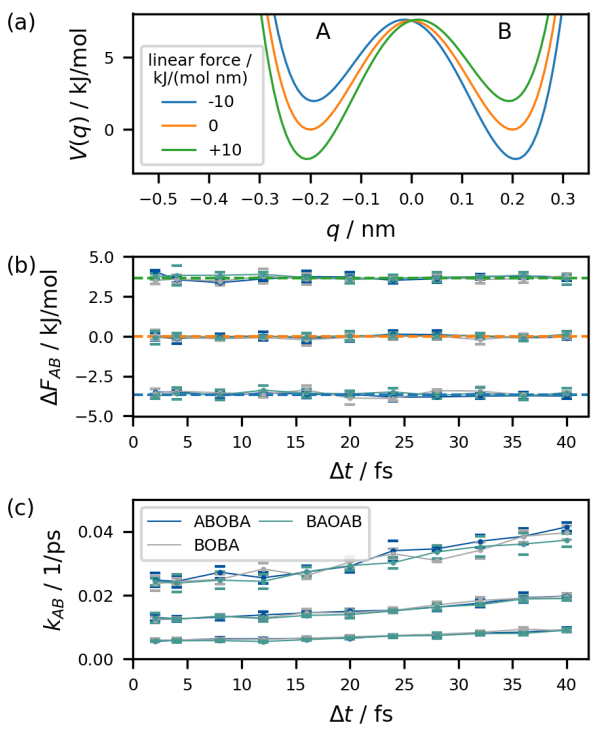


图 6. (a) 倾斜双阱势。模拟参数为 $m = 12\,\mathrm{g/mol}$、$T = 300$ K 和 $\xi = 100\mathrm{ps}^{-1}$。(b) 状态 A 与状态 B 之间的自由能差。(c) A $\to$ B 的跃迁速率常数。

，因此即使时间步长相对较大，自由能仍然稳定且准确。

数值实验中确实观察到了这一行为。图 6.a 展示了三种双阱势：一种未倾斜（橙色），一种向左倾斜（绿色），另一种向右倾斜（蓝色）。极小值位于约 ± 0.2nm 处；作为参考，碳的范德华半径为 0.17 nm。对于未倾斜的势，势垒高度约为 $3\,k_B T$；测试粒子仍为温度 300 K 的碳原子。摩擦系数设为较大的 $\xi = 100\mathrm{ps}^{-1}$。

图 6.b 展示了使用 ABOBA、BOBA 和 BAOAB 方案得到的左右极小值之间自由能差的估计值，时间步长范围为 2 fs 至 40 fs。在整个时间步长范围内，这些估计值均保持稳定，并与解析参考值（虚线）高度吻合。

跃迁速率与过渡态区域的占比呈线性关系，而自由能则与平衡概率呈对数关系。因此，跃迁速率本质上对采样位置分布中的微小误差更加敏感[30]。这种敏感性增强体现在图 6.c 中：随着时间步长增加，双阱系统的跃迁速率估计值出现了轻微的系统性漂移。与前文一样，只有在刻意采用较大的摩擦系数和时间步长时，这种效应才会变得明显；在标准分子动力学条件下，则不会观察到这种漂移。（请注意，跃迁速率是根据直接跃迁计数而非跨越势垒的通量估算的，因此反映的是采样位置分布的准确性，而非动量分布的准确性。）

IV. 结论

本文从更新算子所生成的内部轨迹 角度比较了朗之万分裂方案。在这一层面上，合并或拆分相同的基本更新算子不会改变方案，而对不同步骤重新排序则会改变朗之万格式。这些观察自然地引出了一种按照迭代后仍保留半步特性的算子对二阶分裂进行分类的方法，由此得到三种结构类别（$\mathcal{A}$-、 $\mathcal{B}$-和 $\mathcal{O}$-半步方案）。 $\mathcal{B}$-和 $\mathcal{O}$-半步方案通过在位置空间中迭代整步更新、在动量空间中进行整步更新来遍历相空间，因此可以通过分析其动量更新的精度来比较。算子序列等价、因而产生相同内部轨迹的算法，可能在循环中将位置写入文件的观测点上有所不同；观测点的差异会影响测得的分布。

本文的分析主要关注采样位置的精度。对动量也可以进行类似的分析。一般而言，在恒温步骤之后立即观测动量时，动量分布最接近麦克斯韦–玻尔兹曼分布。

总体而言，现代朗之万积分器在标准分子动力学条件下具有很高的稳定性，而这类精度差异通常只有在刻意采用较大的时间步长和摩擦系数时才会显现。

致谢

本研究由大众汽车基金会通过 Momentum资助资助。

补充材料

补充材料包含额外的推导内容以及有关计算方法的详细信息。

参考文献

[1]D. Frenkel 和 B. Smit, *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications* 2023 （爱思唯尔，）。

[2]B. Leimkuhler 和 C. Matthews，《分子动力学：跨学科应用数学》（2015）。[3]P. H. H¨unenberger，《分子动力学模拟的恒温器算法》，《高级计算机模拟：软物质科学方法 I》，105–149（2005）。[4] C. Dellago、P. G. Bolhuis 和 D. Chandler，《高效过渡路径采样：应用于 Lennard-Jones 簇的重排》，《化学物理学杂志》108，9236–9245（1998）。[5]C. Dellago、P. G. Bolhuis、F. S. Csajka 和 D. Chandler，《过渡路径采样与速率常数的计算》，《化学物理学杂志》108，1964–1977（1998）。[6]P. G. Bolhuis、D. Chandler、C. Dellago 和 P. L. Geissler，《过渡路径采样：在黑暗中将绳索抛过崎岖的山口》，《物理化学年度评论》53，291–318（2002）。[7]B. G. Keller 和 P. G. Bolhuis，《偏置稀有事件模拟的动力学重加权》，《物理化学年度评论》75，137–162（2024）。[8]R. Van Zon、H. Van Beijeren 和 C. Dellago，《低密度多粒子系统的最大李雅普诺夫指数》，《物理评论快报》80，2035（1998）。[9]C. Dellago 和 H. Posch，《恒温随机洛伦兹气体的李雅普诺夫谱与共轭配对规则：数值模拟》，《物理评论快报》78，211（1997）。[10]M. Ceriotti、D. E. Manolopoulos 和 M. Parrinello，《利用广义朗之万方程加速路径积分动力学的收敛》，《化学物理学杂志》134（2011）。[11]L. Donati 和 B. G. Keller，《元动力学模拟的吉尔萨诺夫重加权》，《化学物理学杂志》149，072335（2018）。[12]S. Kieninger 和 B. G. Keller，《朗之万动力学的路径概率比——精确与近似》，《化学物理学杂志》154，094102（2021）。[13]D. A. Sivak、J. D. Chodera 和 G. E. Crooks，《时间步长重缩放可恢复非平衡系统离散时间朗之万积分的连续时间动力学性质》，《物理化学杂志B》118，6466–6474（2014）。[14]A. Br¨unger、C. L. Brooks III 和 M. Karplus，《ST2水分子动力学模拟的随机边界条件》，《化学物理快报》105，495–500（1984）。[15]W. F. Van Gunsteren 和 H. J. Berendsen，《随机动力学的蛙跳算法》，《分子模拟》1，173–185（1988）。[16]R. W. Pastor、B. R. Brooks 和 A. Szabo，《朗之万算法与分子动力学算法精度分析》，《分子物理学》65，1409–1419（1988）。[17]J. A. Izaguirre、D. P. Catarello、J. M. Wozniak 和 R. D. Skeel，《分子动力学的朗之万稳定化》，《化学物理学杂志》114，2090–2098（2001）。[18]N. Bou-Rabee 和 H. Owhadi，《随机变分积分器》，《IMA 数值分析杂志》29，421–443（2009）。[19]G. Bussi 和 M. Parrinello，《利用朗之万动力学实现精确采样》，《物理评论E：统计、非线性与软物质物理》75，056707（2007）。[20]S. Melchionna，《朗之万动力学准辛传播子的设计》，《化学物理学杂志》127（2007）。[21]J. A. Izaguirre、C. R. Sweet 和 V. S. Pande，《利用正规模朗之万研究大分子的多尺度动力学》，《太平洋生物计算研讨会》，240–251（2010）。[22]N. Goga、A. Rzepiela、A. De Vries、S. Marrink 和 H. Berendsen，《朗之万动力学与耗散粒子动力学的高效算法》，《化学理论与计算杂志》8，3637–3649（2012）。[23]B. Leimkuhler 和 C. Matthews，《用于分子采样的随机数值方法的有理构造》，《应用数学研究快报》48，278（2012）。[24]N. Grønbech-Jensen，《用于正确朗之万模拟的完整随机Verlet型恒温器集合》，《分子物理学》118，e1662506（2020）。[25]J. C. Sexton 和 D. H. Weingarten，《混合蒙特卡罗算法的哈密顿演化》，《核物理B》380，665–677 (1992). [26]M. Tuckerman, B. J. Berne, and G. J. Martyna，《可逆多重时间尺度分子动力学》，《化学物理学杂志》**97**, 1990–2001 (1992). [27]M. Suzuki，《广义 Trotter 公式以及指数算子和内导子的系统近似及其在多体问题中的应用》，《数学物理通讯》**51**, 183–190 (1976). [28]L. F. G. Jensen and N. Grønbech-Jensen，《离散时间朗之万系统中精确的构型与动能统计》，《分子物理学》**117**, 2511–2526 (2019). [29]J. Finkelstein, C. Cheng, G. Fiorin, B. Seibold, and N. Grønbech-Jensen，《使离散时间朗之万分裂方法与热力学相一致》，《化学物理学杂志》**155** (2021). [30]B. Leimkuhler and C. Matthews，《通过朗之万动力学实现稳健高效的构型分子采样》，《化学物理学杂志》**138**, 174102 (2013). [31]S. Kieninger and B. G. Keller，《GROMACS 随机动力学与 BAOAB 是等价的构型采样算法》，《化学理论与计算杂志》**18**, 5792–5798 (2022). [32]Z. Zhang, X. Liu, K. Yan, M. E. Tuckerman, and J. Liu，《通过分子动力学实现适用于具有完整约束或等动能约束的正则系综的统一高效恒温器方案》，《物理化学杂志 A》**123**, 6056–6079 (2019). [33]S. Agarwal, S. V. Sukhomlinov, M. Honecker, and M. H. M¨user，《高级朗之万恒温器：性质、在流变学中的扩展以及精简的动量守恒方法》，arXiv 预印本 arXiv:2506.15579 (2025). [34]N. Bou-Rabee and H. Owhadi，《随机背景下变分积分器的长期精度》，《SIAM 数值分析杂志》**48**, 278–297 (2010). [35]D. A. Sivak, J. D. Chodera, and G. E. Crooks，《利用非平衡涨落定理理解并纠正离散朗之万动力学平衡与非平衡模拟中的误差》，《物理评论 X》**3**, 011007 (2013). [36]J. Fass, D. A. Sivak, G. E. Crooks, K. A. Beauchamp, B. Leimkuhler, and J. D. Chodera，《量化复杂分子系统朗之万模拟中的构型采样误差》，《熵》**20**, 318 (2018). [37]T. Lelievre and G. Stoltz，《分子动力学中的偏微分方程与随机方法》，《数值学报》**25**, 681 880 2016– ( ). [38]N. Bou-Rabee and E. Vanden-Eijnden，《随机微分方程 Metropolis 化积分器的逐路径精度与遍历性》，《纯粹与应用数学通讯》：库朗数学科学研究所发行的期刊**63**, 655–696 (2010). [39]B. Leimkuhler, C. Matthews, a nd G. Stoltz，《从平衡与非平衡朗之万分子动力学计算平均值》，《IMA 数值分析杂志》**36**, 13–79 (2016). [40]G. Strang，《差分格式的构造与比较》，《SIAM 数值分析杂志》**5**, 506–517 (1968).