多步共轭辛算法与 Krylov 延迟修正高阶辛算法研究

丰全东

摘要

论文内容分为两部分: 多步共轭辛算法的研究、Krylov 延迟修正高阶辛算法的构造及数值实验。

第一部分包含前两章。在第一章，我们由葛忠和冯康、Eirola 和 Sanz-Serna, 以及冯康和唐贻发先后给出的有关线性多步辛算法的两种不同定义，唐贻发有关线性多步辛算法、多步共轭辛算法的结果，引出 Hairer 有关多步共轭辛算法唯一性的一个问题。

第二章阐述作者在多步算子及多步共轭辛算法方面所获得的结果。我们以最少参数 (6 个，5 个) 分别给出一阶、二阶线性多步算法在冯康定义下的步推算子到 $O(\tau^6)$，$O(\tau^7)$(τ 是步长) 的 B- 级数展开式，并给出二阶辛算子到 $O(\tau^7)$ 的展开式表达式；我们证明：在共轭关系式 $G_3^{\lambda\tau} \circ G_1^{\tau} = G_2^{\tau} \circ G_3^{\lambda\tau}$ 中，若 G_1^{τ} 代表线性多步算子，则 (1) 无论 G_3^{τ} 代表任何 B- 级数，G_2 的精度都不会超过 G_1 的精度，(2) 若 G_2^{τ} 是辛算子，而 G_3^{τ} 是线性多步算子，则 G_1, G_2 和 G_3 的精度分别为 2, 2 和 1, 且它们形如 $G^{\tau}(Z) = \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{\tau^i}{i!} Z^{[i]} + \tau^{s+1}A_1 + \tau^{s+2}A_2 + \tau^{s+3}A_3 + \tau^{s+4}A_4 + O(\tau^{s+5})$ 的展开式分别与梯形格式、欧拉中点格式、欧拉向前格式的展开式只相差一个参数 θ(当 $\theta = 1$ 时完全相同)。这个结果也在一定程度上解决了 Hairer 提出的问题。特别地我们指出：对称的二阶蛙跳格式不可能通过线性多步格式而共轭辛。

高阶辛算法的使用往往会产生一个隐式方程组，随着阶数的增高，求解这个方程组的难度也随之增大。在第二部分，基于 Dutt, Greengard 和 Rokhlin 提出的谱延迟修正方法，我们通过引入了 Newton-Krylov 子空间的概念，给出了 Krylov 延迟修正辛算法，从而避免了谱延迟修正方法 (1) 在处理刚性问题时出现的降阶现象，(2) 对某些系统 (尤其是微分代数系统) 迭代时出现的发散现象。并且这个方法能高效、高精确度地求解所产生的隐式方程组。我们通过对三个典型例子的数值实验对比说明：相对于低阶辛算法与高阶非辛算法，高阶辛算法在求解效率及对系统首次积分保持方面具有明显的优势。

关键词: 线性多步算法，多步共轭辛算法，高阶辛算法，Krylov 延迟修正方法。