显式与高阶多辛几何数值格式

姜珊珊

摘要

本论文主要讨论无穷维 Hamilton 系统的多辛几何算法。与辛几何算法的主要差别是，多辛算法不仅在一定的边界条件下保持系统的离散空间上的辛形式之和，而且能够保持局部的辛形式，从而多辛几何算法更多的是体现在系统局部的守恒性质，更能体现系统的本质特征。目前已有的多辛几何算法主要建立在 Bridges 基于 Hamilton 系统和 MPS(Marsden, Patrick, Shkoller) 基于 Lagrange 系统分别提出的多辛形式之上。这两种不同的角度提出多辛多辛形式有着共同的特点，那就是它们把孤立子方程的时间方向与空间方向等同的来看待。相应的，在构造多辛格式时，也采用这一观点，使得时间方向与空间方向同时离散，从而产生最终的全离散格式，而如此产生的多辛格式在时间方向与空间方向都分别保持一个辛结构。我们在本论文中给出的所有多辛几何算法都是基于 Bridges 意义下的多辛形式的理论基础。

无穷维 Hamilton 系统中 Klein-Gordon-Schrödinger 方程是一个重要的模型，它是由一个 Klein-Gordon 方程与一个 Schrödinger 方程耦合而成。它不仅具有 Hamilton 系统所特有的多辛结构，而且具有能量守恒律、动量守恒律等，甚至自身还具有特殊的 Charge 守恒律。针对 Klein-Gordon-Schrödinger 方程的这些特殊性质，我们给出经典的多辛几何算法 (中心 Box 算法) 的离散能量递推公式，并说明该算法也保持 Charge 守恒律，同时给出非线性全局收敛性分析，给出具体的误差估计式。这方面的研究目前处于起步阶段，主要是由于非线性项的影响，造成很多数值结果不如预想中的好，收敛性无法保证。

进一步地，根据 Klein-Gordon-Schrödinger 方程在时间方向与空间方向都存在二阶偏导数的特殊特点，利用 Runge-Kutta 类方法特别是 Runge-Kutta-Nyström 方法构造出新的显式差分格式，并给出其多辛性的代数条件。并证明新构造的格式保持离散 Charge 守恒律。而且给出二阶多辛格式的具体表达式，并指出由该途径构造出来的格式是一族具有一个自由变量的多辛格式，而不仅仅是一个格式。在数值试验中，与其他的非多辛格式同阶格式相比较，新构造的多辛格式不仅能够保持离散 Charge 守恒律，而且在保持全局能量、全局动量方面也毫不逊色，甚至更好。我们采用同样的途径构造出时间高阶、空间高阶甚至时间与空间

同时高阶的显式多辛格式。大量数值实验表明，当提高格式的精度时，格式不仅能保持离散 Charge 守恒律，甚至全局能量守恒律也能够达到机器精度。在数值试验方面，我们分别从单孤立波情形，与波立波碰撞等不同情形分别给出数值格式的试验结果比较。

波动方程也是经典的无穷维 Hamilton 系统，而且波动方程具有在时间方向与空间方向分别为二阶方程的显著特点，从而可以利用 Runge-Kutta-Nyström 方法同时对时间方向与空间方向进行离散。我们证明在一定的代数条件下，构造出的格式是多辛格式。我们给出如何构造一族具有两个自由变量的显式二阶多辛格式的途径，并在理论上给出了线性稳定性的证明，从而保证了该格式的可行性。并具体给出其算法设计。在数值试验中，与其他非多辛格式比较，表现出长时间模拟的稳定性，以及在保持局部与全局能量方面的优越性。

关键词: 哈密顿系统，多辛格式，显式方法，高阶格式，误差分析