时间有限元法、连续级 Runge-Kutta 法及保结构算法

唐文生

摘　要

动力系统的保结构算法是能够保持系统内在结构特征的数值计算方法，它的理论基础是微分几何,近年来逐渐成为国内外计算数学与科学工程计算相关领域的研究热点。本博士论文研究了时间有限元法、连续级龙格-库塔法，并建立了其与经典龙格-库塔法、保结构算法之间的关系；通过研究时空局部间断 Galerkin 解法对哈密顿偏微分系统提出了高阶多辛时空有限元法，并建立了其与高阶分块多辛数值方法之间的关系。

本文的主要研究成果包括:

1、通过考察时间有限元法的变分形式对四种有限元离散格式建立了一个统一的 Galerkin 描述框架，结合相应的数值求积公式建立了有限元离散、配置法和经典龙格-库塔法之间的关系;研究了时间有限元法的线性稳定性和超收敛性。

2、针对具有特殊结构的动力系统我们发展了时间有限元解法，特别是对哈密顿系统，我们构造了两类严格保持辛结构的 Garlerkin 有限元解法，同时基于系统的能量守恒律我们研究了连续有限元法的保能量特性,并建立了其与广泛使用的三种保能量算法之间的紧密联系，由此揭示了时间有限元法的保结构特点。

3、研究了 Butcher 于 1987 年提出的连续级龙格-库塔法，并在此框架下推广了由 Wanner 和 Hairer 提出的构造隐式龙格-库塔法的经典 W-变换。通过推广的 W-变换，我们不仅可以构造新型的辛几何算法，而且还可构造保持其他结构特点的高阶数值方法如保能量算法、对称算法及（拟）共扼辛算法等。

4、基于时间有限元法的研究，我们通过在空间方向使用局部间断 Galerkin 法对哈密顿偏微分方程发展了时空有限元法;对具有特殊形式的哈密顿多辛系统我们证明了通过时空有限法建立的全离散方法等价于高阶的时空分块龙格-库塔方法; 我们将基于时空有限元法构造的多辛算法用于求解非线性薛定谔方程，从理论和数值两方面考察了多辛结构、模方守恒律的保持以及数值解的收敛性。

本论文的主要创新点是:（1）对常微分方程的初值问题建立了相应的 Galerkin 变分形式，结合数值通量的不同选取发展了相应的时间有限元法，并揭示了其与源于不同构造思路的经典龙格-库塔法之间的紧密关系;（2）对具有特殊结构的系统应用时间有限元法,结合相应的数值求积公式揭示了时间有限元法的保结构特点;（3）时间有限元法为求解常微分方程初值问题的数值方法提供了理论框架,从而为构造新型的、满足计算需要的数值方法提供了理论基础;（4）通过发展哈密顿偏微分方程的时空有限元解法我们提供了高阶多辛分块龙格-库塔法的 Galerkin 变分解释,从而有助于对高阶多辛龙格-库塔方法的理解和进一步高效应用。

关键词：时间有限元法，连续级龙格-库塔法，局部间断 Galerkin 法，保结构算法，首次积分，辛结构，对称算法，共轭辛算法