带电粒子运动与多体问题的稳定高效几何算法研究

涂雄标

摘　要

本文主要研究的是洛伦兹系统和可分哈密尔顿系统在稳定高效几何数值算法方面的工作. 洛伦兹系统是非典则哈密尔顿系统, 该系统是无源的, 其相流是保体积映射. 我们针对洛伦兹系统的这一性质构造能够保持体积不变的数值方法, 此外, 我们要求新方法在保体积的同时还是显式和时间对称的. 我们对新方法所具有的几何性质进行系统的分析, 重点考察方法的时间对称, 保体积, 辛和 K-辛等性质. 通过数值实验我们验证了所构造的方法在粒子追踪能力和全局能量保持方面具有很大的优势. 可分哈密尔顿系统在动力系统研究中具有很重要的地位, 例如, 分子动力学和天体力学中诸多问题可由可分哈密尔顿系统来刻画. 针对可分哈密尔顿系统我们使用第三类生成函数构造了一族多参数时间对称辛算法, 并应用我们提出的简化假设, 对方法的阶条件进行了有效的约化. 对一般可分哈密尔顿系统我们构造了一族 8 阶精度的时间对称数值方法, 特别地, 对动能为二次函数的可分哈密尔顿系统, 我们显式定义生成函数, 构造了一族 10 阶精度的时间对称 (半隐式) 辛算法. 本文主要安排如下:

前面两章我们对本文的研究背景, 研究动机和预备知识做了简单介绍.

在第三章, 我们为一般自治系统构造了一族时间对称数值方法, 特别地, 这族数值方法应用到洛伦兹系统是显式, 对称, 保体积的. 我们对所构造的这族新方法系统地分析了其所具有的几何性质, 如对称性, 保体积, 辛和 K-辛等. 针对等离子计算领域中已流行使用 40 多年的 Boris 算法, 我们指出其为多步法, 计算的初值不能精确给定, 这将产生寄生误差的缺陷. 通过数值实验我们将新方法与 Boris 算法以及 Runge-Kutta(RK3) 方法进行比较, 我们的新方法在相轨道的数值模拟和保持全局能量误差有界方面均优于 Boris 算法和 RK3 方法. 此外, 针对重要且复杂的导心系统, 寻找能长期追踪粒子轨迹的高效的数值方法一直是人们探索的课题. 我们将构造的这族新方法应用

于导心系统, 数值结果表明新方法具有长时间追踪粒子轨迹和保持全局能量误差有界的性质.

针对一般可分哈密尔顿系统我们在第四章系统地构造了一族高阶精度辛方法. 我们针对可分哈密尔顿系统的特殊结构, 利用生成函数法, 使用第三类生成函数给出了一族多参数的辛算法. 通过逆自动微分技巧给出了生成函数梯度的有效计算方式. 随后, 我们考虑将所构造的算法应用到自治系统, 得到了一般化的数值格式.

根据上一章所得到的数值格式, 我们在第五章使用 P-级数展开等工具给出了新方法的阶条件. 通过使用我们给出的简化假设, 对所要求的阶条件进行了有效约化, 即对 $\widetilde{ST}$ 中的树构造了新的等价类, 使得等价双色根树对应的阶条件等价.

在第六章, 我们针对一般可分哈密尔顿系统我们得到了 12 个独立阶条件 (8 阶精度), 针对动能为二次函数的可分哈密尔顿系统我们得到了 20 个独立阶条件 (10 阶精度). 由此对一般可分哈密尔顿系统我们给出了 8 阶精度时间对称辛方法的具体例子, 对动能为二次函数的可分哈密尔顿系统, 我们对生成函数进行显式定义, 给出了一族 10 阶精度时间对称 (半隐式) 辛方法. 通过数值实验我们验证了所构造的方法拥有预期的收敛阶, 并成功应用这一族时间对称辛方法对太阳系行星轨道进行高精度数值模拟.

最后, 我们对本文进行简单的总结, 并对今后的研究作出相应的规划.

关键词：带电粒子, 多体问题, 保体积, 辛算法, 高精度