2020 年 11 月　　计 算 数 学　　第 42 卷第 4 期
Nov., 2020　　MATHEMATICA NUMERICA SINICA　　Vol.42, No.4

纪念冯康先生百年诞辰

关于辛算法稳定性的若干注记*1)

尚在久
(HLM, 中国科学院数学与系统科学研究院, 数学研究所, 北京 100190;
中国科学院大学数学科学学院, 北京 100049)

宋丽娜
(吉林大学数学学院, 长春 130012)

摘　要

我们讨论辛算法的线性稳定性和非线性稳定性, 从动力系统和计算的角度论述了研究辛算法的这两类稳定性问题的重要性, 分析总结了相关重要结果. 我们给出了解析方法的明确定义, 证明了稳定函数是亚纯函数的解析辛方法是绝对线性稳定的. 绝对线性稳定的辛方法既有解析方法 (如 Runge-Kutta 辛方法), 也有非解析方法 (如基于常数变易公式对线性部分进行指数积分而对非线性部分使用其它数值积分的方法). 我们特别回顾并讨论了 R. I. McLachlan, S. K. Gray 和 S. Blanes, F. Casas, A. Murua 等关于分裂算法的线性稳定性结果, 如通过选取适当的稳定多项式函数构造具有最优线性稳定性的任意高阶分裂辛算法和高效共轭校正辛算法, 这类经优化后的方法应用于诸如高振荡系统和波动方程等线性方程或者线性主导的弱非线性方程具有良好的数值稳定性. 我们通过分析辛算法在保持椭圆平衡点的稳定性, 能量面的指数长时间慢扩散和 KAM 不变环面的保持等三个方面阐述了辛算法的非线性稳定性, 总结了相关已有结果. 最后在向后误差分析基础上, 基于一个自由度的非线性振子和同宿轨分析法讨论了辛算法的非线性稳定性, 提出了一个新的非线性稳定性概念, 目的是为辛算法提供一个实际可用的非线性稳定性判别法.

关键词: 辛算法; 线性稳定性; 非线性稳定性; 向后误差分析; KAM 定理.

MR (2010) 主题分类: 65P10, 65P40, 65L05, 65L07.

1. 引　　言

上世纪八、九十年代冯康先后提出哈密尔顿系统的辛几何算法和动力系统几何算法 (亦称常微分方程的保结构算法或者几何数值积分), 在他生命的最后十年, 领导了动力系统几何算法这一新兴方向的研究, 完成了奠基性研究工作 [11–13]. 三十多年来, 冯康关于 “构造数值算法尽可能多地保持微分方程内在几何结构和物理守恒律” 的思想指导着这一方向的研究, 推动了常微分方程和动力系统计算方法的巨大发展, 在数学和相关应用领域产生了重要影响 [15, 24–26, 36].

本文讨论辛算法的稳定性. 考虑如下的哈密尔顿典则方程:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \tag{1.1}$$

* 2020 年 8 月 11 日收到.
1) 基金项目: 国家自然科学基金 (11671392) 资助.

其中 $q=(q_1,q_2,\cdots,q_n)$ 和 $p=(p_1,p_2,\cdots,p_n)$ 分别是质点系统构型空间的位置坐标和动量坐标, $H=H(p,q)$ 是相空间上的哈密尔顿函数 (如经典力学中的能量函数).

(1.1) 是 $\mathcal{R}^{2n}$ 上某区域上定义的一类特殊的常微分方程组, 描述耗散可忽略不计的物理过程. 一个典型的例子就是经典力学的牛顿 N 体问题 (假设每个天体的大小忽略不计, 第 i 个天体的质量为 m_i, 其在三维欧氏空间中的位置坐标行矢量为 r_i), 即[1)]

$$H(p,q)=T(p)+V(q),T(p)=\frac{1}{2}pM^{-1}p^{\intercal},V(q)=G\sum_{1\le i<j\le N}\frac{m_jm_j}{|r_i-r_j|},$$

其中 $q=(q_1,q_2,\cdots,q_{3N})=(r_1,r_2,\cdots,r_N)$, $p=(p_1,p_2,\cdots,p_{3N})$ 是相应于 q 的动量坐标矢量, $T(p)$ 是动能函数, $V(q)$ 是 N- 体的相对势能函数, $H(p,q)$ 是质点系统的总能量, 而

$$M=\begin{pmatrix} M_1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & M_2 & 0 & 0\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ 0 & 0 & 0 & M_N \end{pmatrix},M_i=\begin{pmatrix} m_i & 0 & 0\\ 0 & m_i & 0\\ 0 & 0 & m_i \end{pmatrix}.$$

对如上形式的哈密尔顿系统, 下面两条性质是基本的和重要的[2)] ：

(1) 哈密尔顿函数是一个自然的首次积分, 即：对 $t\in\mathcal{R},H(p(t),q(t))=H(p(0),q(0))$, 其中 $(p(t),q(t))$ 是 (1.1) 的解;

(2) 相流保持相空间的辛结构, 即：对 $t\in\mathcal{R}$, 有

$$\left(\frac{\partial g_H^t}{\partial z}\right)^{\intercal}J\left(\frac{\partial g_H^t}{\partial z}\right)=J, \tag{1.2}$$

其中 $g_H^t(z)=(p(t),q(t))$ 表示系统 (1.1) 的初值为 $z=(p,q)$ 的相流,

$$J=\begin{pmatrix} 0 & -I_n\\ I_n & 0 \end{pmatrix}.$$

自牛顿以来, 一个基本的问题是寻求微分方程给定初值的解. 由此出发发展了各种积分方法, 提出了可积性的概念, 即一组微分方程称为是可积的如果所有的解能够表达成一些首次积分和时间变量的函数 [4]. 庞加莱证明了一般情形的哈密尔顿系统是不可积的 [4, 35]. 就上述 N 体问题而言, 只有 $N=2$ 的情形才可积, 这是著名的开普勒二体问题. 在牛顿万有引力作用下二体的相对运动轨迹是平面圆锥曲线：椭圆 (圆是特殊的椭圆)、抛物线或者双曲线 (从双曲平衡点出发的射线可看作退化的双曲线). 其中轨道为椭圆的运动是稳定运动, 抛物线和双曲线是不稳定运动的典型形态. $N\ge 3$ 时, 牛顿运动方程不可能通过求首次积分的办法求得一般解, 除了已知的 10 个首次积分 (质心做匀速直线运动的六个积分常数, 能量守恒积分常数和角动量守恒的三个积分常数), 不存在其它独立的首次积分 [35], 于是近似求解成为必然. 随着科学和技术的发展, 在应用中行之有效的摄动法和基于泰勒展开和函数逼近论的数值积分方法得到了蓬勃发展, 积累了大量实用的算法格式和与之相适应的理论分析结果, 如龙格 - 库塔方法以及由 J. Butcher 发展起来的系统的算法构造理论和线性多步法以及由 G. Dahlquist

[1)] G 为万有引力常数.

[2)] 本文讨论的函数 H 都假设为具有二阶连续偏导数且方程 (1.1) 的解有存在区间 $(-\infty,\infty)$.

提出和发展的稳定性理论 [19,20]. 这两个理论曾长期主导着常微分方程数值方法的研究. 冯康提出并倡导的动力系统几何算法使这个领域焕发了新的生机.

数值方法的稳定性是一个至关重要的概念, 稳定的算法应该能够避免数值解严重背离精确解的情况发生. Dahlquist 的稳定性从属于李雅普诺夫的运动稳定性理论, 本质上是针对耗散系统的, 因此不适用于哈密尔顿系统这样的守恒系统. 辛算法保持相空间的辛结构, 它应用于哈密尔顿系统是相空间上一个逼近相流的离散的单参数辛映射族 (参数为时间步长). 根据向后误差分析理论, 它是一个 "形式的哈密尔顿系统" 的 "形式相流" 的插值 [11]. 因此数值解没有任何内生的耗散, 辛算法能够保持哈密尔顿系统的守恒特性. Dahlquist 关于时间积分方法的稳定性理论不足以分析辛算法 (一个简短的论述见文献 [13]的第 13 章引言).

2. 辛算法的线性稳定性

2.1. 平衡点及其稳定性

动力系统最基本的运动状态是平衡态, 即系统处于相对静止的状态. 就哈密尔顿系统 (1.1) 而言, 哈密尔顿函数在相空间上的临界点就代表了系统的平衡态, 亦称平衡点, 即 $z^*=(p^*,q^*)$ 是一个平衡点, 如果

$$\frac{\partial H}{\partial z}(z^*)=0, \quad \text{即} \quad \frac{\partial H}{\partial q}(p^*,q^*)=0, \quad \frac{\partial H}{\partial p}(p^*,q^*)=0,$$

此时 $p(t)=p^*, q(t)=q^*$ 是系统 (1.1) 的解. 研究系统在平衡点附近的动力学及其在系统摄动下的稳定性是重要的, 这个问题与平衡点的性质密切相关. 哈密尔顿系统的平衡点可区分为下面几种基本情况 (设 $z^*=(p^*,q^*)$ 是平衡点):

(1) 椭圆平衡点: (1.1) 在 z^* 的线性化矩阵只有非零纯虚特征值且可对角化;

(2) 双曲平衡点: (1.1) 在 z^* 的线性化矩阵的特征值实部非零;

(3) 混合型平衡点: z^* 既不是椭圆平衡点也不是双曲平衡点.

根据上述定义, 混合型平衡点包括退化情形: 即 (1.1) 在平衡点处的线性化矩阵具有零特征值. 考虑系统 (1.1) 在平衡点处的一次逼近 (称之为线性化), 即在 (1.1) 中取函数 H 在 z^* 处的二阶泰勒多项式. 不妨假设 H 在平衡点取值为零, 因此此二阶泰勒多项式是关于 $z-z^*$ 的二次齐次多项式, 不妨仍记为 H. 根据运动稳定性的定义1) [2,34,44]和辛矩阵的性质 [2], 椭圆平衡点是线性稳定的2) , 双曲平衡点或非退化的混合型平衡点是线性不稳定的. 在退化平衡点处, 如果线性化矩阵只有零特征值和纯虚特征值且可对角化, 则平衡点是线性稳定的, 否则是线性不稳定的. 我们进一步考虑系统 (1.1) 的运动在平衡点处的强线性稳定性 (或者参数线性稳定性)3) , 即保持平衡点的摄动系统的运动仍然是线性稳定的性质. 这一系列稳定性概念可平行地推广到离散系统情形, 即相空间上辛映射定义的动力系统, 其中连续系统的时间参数 t 用整数 n 代替, 离散系统的动力学轨道就是初值在映射迭代下的离散点集, 平衡点是

1) 系统 (1.1) 的运动在平衡点 $z^*=(p^*,q^*)$ 处是稳定的 (亦称 Lyapunov 稳定的), 如果对任意的 $\varepsilon>0$, 存在 $\delta>0$ 使得对任意的 $z\in\mathcal{R}^{2n}$, 只要 $\|z-z^*\|<\delta$, 就有 $\|g_H^t(z)\|<\varepsilon$ 对任意实数 $t\in\mathcal{R}$ 都成立.

2) 系统 (1.1) 的平衡点是线性稳定的, 如果在其平衡点处的线性化系统的运动在平衡点处是稳定的.

3) 系统 (1.1) 在平衡点 $z^*=(p^*,q^*)$ 处是强线性稳定的 (或者参数线性稳定的), 如果存在 $\delta>0$ 使得对任意的 $\tilde{H}\in\mathcal{C}^2(\mathcal{B}_\delta(z^*),\mathcal{R})$, 只要 z^* 是 $\tilde{H}$ 的临界点, $\|\tilde{H}-H\|_{\mathcal{C}^2(\mathcal{B}_\delta(z^*),\mathcal{R})}\le\delta$, 则 z^* 是系统 (1.1) 当 $H=\tilde{H}$ 时的线性稳定的平衡点. 这里 $\mathcal{B}_\delta(z^*)$ 表示 $\mathcal{R}^{2n}$ 中以 z^* 为中心, 以 δ 为半径的闭球体, $\mathcal{C}^2(\mathcal{B}_\delta(z^*),\mathcal{R})$ 表示定义域为 $\mathcal{B}_\delta(z^*)$ 的二阶连续可微实值函数的集合; $\|\cdot\|$ 表示相应的范数或者模.

映射的不动点, 相应地, 椭圆平衡点、双曲平衡点和混合平衡点有类似的定义[1)]. 我们知道只有在椭圆平衡点处系统才可能是强线性稳定的, 在其它平衡点处都不是强线性稳定的. 就哈密尔顿系统的情况, 我们知道在椭圆平衡点附近必存在线性辛变换 $T:(\xi,\eta)\to(p,q)$ 使得：$T(0,0)=(p^*,q^*)$ 且哈密尔顿函数在辛坐标 (ξ,η) 下的二次齐次部分为 [34, 44]

$$K(\xi,\eta)=H(T(\xi,\eta))=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}\beta_k(\xi_k^2+\eta_k^2), \tag{2.1}$$

其中 $\beta_k\neq 0, k=1,2,\cdots,n$ 为系统在椭圆平衡点的 n 个特征频率, 相应的相流的特征指数在复平面的单位圆上. 椭圆平衡点是强线性稳定的当且仅当 [34]

$$\beta_j\neq 0(j=1,2,\cdots,n),\quad \beta_k\neq-\beta_j(1\leq k\neq j\leq n). \tag{2.2}$$

强线性稳定的平衡点一定是线性稳定的. 如果 $\beta_j>0(j=1,2,\cdots,n)$, 则椭圆平衡点不仅是强线性稳定的, 而且是稳定的, 这种情况对应于能量函数在平衡点处取到极小值, 且哈密尔顿函数在平衡点的二次齐次部分是正定的.

因此在椭圆平衡点处哈密尔顿系统的线性化是 n 个独立的简谐振子的直积, 其运动是 $2n$ 维相空间中 n 维环面上的周期运动 (如果只有一个独立频率) 或拟周期运动 (如果有 2 个或两个以上的独立频率), 其中 n 是系统的自由度数. 如果 n 个频率都是独立的, 即对任意不全为零的整数 $k_1,k_2,\cdots,k_n$, 有 $\sum_{j=1}^n k_j\beta_j\neq 0$, 则拟周期运动 ($n=1$ 时为周期运动) 在 n 维环面上稠密, 因此关于环面上的勒贝格测度是遍历的. 遍历系统的相轨线具有统计不变性: 即一个可观测量在此轨线上的时间平均等于其在环面上关于某物理测度的空间平均. 一个辛算法应用于这样的系统产生一个离散系统, 一般也是 n 个简谐振动方程离散化的直积. 于是研究辛算法的线性稳定性只需要研究其应用于一个自由度的简谐振动方程的稳定性即可.

2.2. 辛算法的线性稳定性

我们考虑如下的试验方程

$$\dot{p}=-q,\quad \dot{q}=p. \tag{2.3}$$

一个辛格式 (或称辛积分), 记为 Φ, 应用于上述试验方程一般产生相平面上一个线性辛映射

$$L_\Phi^h:\begin{pmatrix}p^+\\ q^+\end{pmatrix}=L_\Phi(h)\begin{pmatrix}p\\ q\end{pmatrix}, \tag{2.4}$$

其中 $L_\Phi(h)$ 是一个 2×2 实辛矩阵, h 是时间步长. 对于一个 s 阶辛格式, $L_\Phi(h)$ 自然是旋转矩阵

$$R(h)=\begin{pmatrix}\cos h & -\sin h\\ \sin h & \cos h\end{pmatrix} \tag{2.5}$$

的一个 s 阶近似, 即

$$L_\Phi(h)=R(h)+\mathcal{O}(h^{s+1}), h\to 0. \tag{2.6}$$

[1)] 一个离散系统的平衡点 $z^*=(p^*,q^*)$ 被称为：(1) 椭圆的, 如果定义此离散系统的映射在该点的线性化矩阵可对角化且特征值均在复平面的单位圆周上; (2) 双曲的, 如果该映射的线性化矩阵的特征值都不在复平面的单位圆上; (3) 混合型的, 如果此平衡点既不是椭圆的也不是双曲的.

旋转矩阵 $R(t)$ 定义了谐振子系统 (2.3) 的相流 $g^t : (p^+, q^+)^\intercal = R(t)(p, q)^\intercal$. 下面我们讨论辛方法的线性稳定性, 即应用于稳定的线性系统仍然产生稳定的数值解的性质.

定义 1. 称矩阵 $L_\Phi(h)$ 为辛格式 Φ 的稳定矩阵; 称集合

$$S = \Big\{h \in \mathcal{R} | \text{矩阵 } L_\Phi(h) \text{ 可对角化且其特征值在复平面 } C \text{ 的单位圆周上}\Big\} \tag{2.7}$$

为 Φ 的线性稳定域.

显然 $0 \in S$, 故 $S \neq \emptyset$. 因为 $L_\Phi(h)$ 是辛矩阵, 故其行列式等于 1, 从而其特征方程为

$$\lambda^2 - 2b(h)\lambda + 1 = 0, \tag{2.8}$$

其中 $b(h) = \frac{1}{2}tr(L_\Phi(h)) = \cos h + \mathcal{O}(h^{s+1}), h \sim 0$, 称为格式 Φ 的稳定函数. 辛格式的线性稳定域完全由其稳定函数决定, 即

$$S = \Big\{h \in \mathcal{R} || b(h)| \leq 1, \text{且当 } |b(h)| = 1 \text{ 时, 矩阵 } L_\Phi(h) \text{ 可对角化}\Big\}. \tag{2.9}$$

对于龙格 - 库塔辛方法或者分块龙格 - 库塔辛方法以及在这些方法基础上经分裂组合技术构造的辛方法, 其线性稳定性已有诸多讨论 [6, 8, 29, 30, 33, 53].

在文 [14]中首次提到 “解析方法” 的概念, 即解析依赖于向量场的时间积分方法. 我们给出如下定义:

定义 2. 考虑由向量场 $a : \mathcal{R}^m \to \mathcal{R}^m$ 确定的系统

$$\dot{y} = a(y), \quad y \in \mathcal{R}^m \tag{2.10}$$

和一个时间积分方法 Φ_a^h(不妨视其为这个时间积分方法所确定的步推映射, 对于多步法即是在 Kirchgraber 意义下的单步步推映射 [11, 18]). 如果对任意解析向量场 a, Φ_a^h 可展开成如下的形式幂级数 (不考虑收敛性)

$$\Phi_a^h = \sum_{k=0}^{\infty} h^k a_k, \tag{2.11}$$

其中 $a_0(y) = y$, $a_1 = a$, $a_k (k \geq 2)$ 是 a 的基本微分 [18]在实数域上的有限线性组合, 则称此时间积分方法为解析方法.

容易看出, 龙格 - 库塔方法和线性多步法是解析方法. 分块方法, 如辛欧拉方法和 Lobatto IIIA-IIIB 对, 一般不是解析方法. B- 级数方法是解析方法, 但解析方法不一定是 B- 级数方法 (如解析的显式方法中 a_k 包含高于 k 阶的基本微分). 解析辛方法的线性稳定性完全归于 Dahlquist 的线性稳定性理论, 这时简谐振子试验方程用复平面上系数为纯虚数的一阶线性齐次微分方程代替.

令 $z = p + iq$. 则相平面上的谐振子系统 (2.3) 等价于复平面上的数量方程

$$\dot{z} = iz, \quad i = \sqrt{-1}, \tag{2.12}$$

相应地, 相流 g^t 在复平面上的表示为 $z(t) = \exp(it)z$, 其中指数函数 $\exp(ih)$ 是旋转矩阵 (2.5) 的复表示.

于是一个解析辛方法应用于 Dahlquist 试验方程 (2.12) 时产生一个步推映射

$$y_1 = \phi(z)y, z = ih,$$

其中 h 是时间步长, $\phi(z)$ 是 Dahlquist 稳定函数, 我们有下面的一般性定理.

定理 1. 若一个解析辛方法的稳定函数是亚纯函数, 则其线性稳定域是整个实数轴.

证明. 因为 $\phi(z)$ 是辛方法的稳定函数, 故对实数 $h\sim 0$, $\det\phi(hJ))=1$. 对矩阵 J, 存在 2×2 酉矩阵 U 使得

$$U^*\begin{pmatrix} i & 0\\ 0 & -i\end{pmatrix}U=J.$$

对上式左右两边先乘实数 h 再作用实解析函数 ϕ, 且由于 $\phi(hJ)$ 是辛矩阵, 故

$$|\phi(ih)|^2=\det\left[U^*\phi\left(\begin{pmatrix} hi & 0\\ 0 & -hi\end{pmatrix}\right)U\right]=\det\left(\phi(hJ)\right)=1$$

对实数 $h\sim 0$ 成立. 因为 $\phi(z)$ 是亚纯函数, 可以表达为两个整函数的分数形式, 除了可能的孤立极点外在复平面上处处解析, 分子和分母都可在原点展开成整个复平面上收敛的幂级数, 故 $|\phi(ih)|=1$ 对任意实数 h 都成立, 这说明此辛方法的线性稳定域是整个实数轴.

我们称一个辛方法是绝对线性稳定的1), 如果其线性稳定域是整个实数轴. 龙格 - 库塔方法是解析方法且其稳定函数是有理函数, 由定理 1 知这类辛方法是绝对线性稳定的 [53]. 实际上, 龙格 - 库塔方法应用于哈密尔顿系统是辛算法的条件恰好是其在 Dahlquist 意义下绝对线性稳定的条件. 一般的线性多步辛方法 (即应用于哈密尔顿系统其单步步推映射是辛映射) 的稳定函数不是亚纯函数, 涉及到多项式方程求根, 其线性稳定域一般是有界集. Dahlquist 于 1963 年证明 [20]: 绝对线性稳定的线性多步法其阶数最多等于 2, 本质上就是梯形公式, 梯形公式通过欧拉显式公式共轭于隐式中点公式. 唐贻发于 1993 年证明 [52]: 线性多步法中如果有辛算法, 则其阶数最多等于 2, 因此本质上就是梯形公式, 共轭于隐式中点公式, 这个结果被 E. Hairer 和 P. Leone 推广到一般线性多步法 [18]. 不论是龙格 - 库塔方法还是线性多步法, 其绝对线性稳定性与其应用于哈密尔顿系统保持辛结构是一致的. 因此大致可以推测, 在相同的算法类中, 辛算法是具有更好数值稳定性的方法.

容易看出, 解析辛方法 (如龙格 - 库塔辛方法) 是全隐式方法, 求解高维度、非线性和具坏条件数等问题效率不高. 一些特殊的实际应用问题可以构造半隐式甚至显式辛算法等计算效率更高的方法, 如分块龙格 - 库塔辛方法 [1,16,22,49,50]和基于分裂 - 组合技巧构造的辛方法 [12,13,32,51,57]. 这类辛方法一般不是绝对线性稳定的, 其线性稳定域是实数轴上的一个非空闭子集. 如果稳定函数 $b(h)$ 是非常值有理函数2), 那么相应的辛方法的线性稳定域, 即满足条件 $|b(h)|\le 1$ 的实数 h 构成的集合, 是有限个闭区间的并集, 例如通过第二类生成函数和哈密尔顿 - 雅可比方程构造的辛欧拉类方法的线性稳定域是一个闭区间, 我们猜测随着阶数的增长而逐步缩小, 可以证明其极限是 $[-\pi/2,\pi/2]$ [43]; $2s$ 阶 Lobatto IIIA-IIIB 对的线性稳定域是 $2s-1$ 个闭区间且关于数轴的原点对称, 通过考察 $s=1,2,3,4,5$ 等的情况发现, 随着阶数的增长而扩大 [53], 很自然可以猜测这个结论具有一般性. 文 [33] 证明其极限是集合 $(-\infty,\infty)\setminus\{k\pi,k\in Z\}$. 第二类生成函数对可分系统可以构造显式格式, 但 Lobatto IIIA-IIIB 总是隐式的. 对于求解如波动方程这样的偏微分方程的长时间问题, 由于 CFL 条件的限制, 同

1) 又称 I- 稳定 [20], 或 H- 稳定 [12], 或 P- 稳定 [23].

2) 龙格 - 库塔辛方法、分块龙格 - 库塔辛方法以及在这类方法基础上通过分裂 - 组合技巧构造的辛方法的稳定函数都是非常值有理函数.

时涉及高频解, 寻求具有更大线性稳定域的显式时间积分算法是很重要的. 一般来说, 确定一个非解析辛方法的线性稳定域是一件有趣但具挑战性的工作.

对于特定问题构造具有尽可能大的线性稳定域的高阶显式或者部分隐式辛格式具有重要的应用价值 [5, 7, 23, 29, 30, 32, 33, 46, 47]. M. A. López-Marcos 等 [29]和 R. I. McLachlan 等 [30]首先针对形如 $H(p,q)=T(p)+V(q)$ 的可分哈密尔顿系统先后分别构造了具有最大线性稳定域的四阶和高阶显式分裂辛格式和计算效率更高的共轭校正辛格式 (通过构造可迭代的共轭处理子提升低阶对称格式的阶同时优化算法误差). S. Blanes 等 [6]进一步推广完善了这项研究, 给出了更为系统深入的结果. 此类辛方法的稳定矩阵 $K(h)=\begin{pmatrix} K_1(h) & K_2(h) \\ K_3(h) & K_4(h) \end{pmatrix}$ 满足

(1) $K_1(h), K_4(h)$是逼近 $\cos h$ 的偶数次多项式;
(2) $K_2(h), K_3(h)$是逼近 $\sin h$ 的奇数次多项式;
(3) $\det K(h)=1$.

S. Blanes 等证明: 任何分裂辛格式由满足上述性质的稳定矩阵唯一确定, 此稳定矩阵有如下形式的因式分解:

$$K(h)=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -b_k h & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & a_k h \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\cdots\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -b_1 h & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & a_1 h \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{2.13}$$

其中 $a_i, b_i \in \mathcal{R}$ 是单步分裂辛格式的内插结点系数. 对于任意给定的满足如下逼近条件的稳定多项式函数

$$b(h)=\frac{1}{2}(K_1(h)+K_4(h))=\cos h+\mathcal{O}(h^{2s+2}), \text{当 } h\sim 0 \text{ 时}; \quad b(-h)=b(h), \tag{2.14}$$

S. Blanes 等同时给出了具有最优线性稳定性的 $2s$ 阶时间可逆分裂辛格式和对线性问题误差最优效率更高的共轭校正辛格式的构造方法. 因此构造具有良好线性稳定性和良好逼近性质的分裂辛算法的关键归结于逼近 $\cos h$ 的稳定多项式函数 $b(h)$ 的构造. 此类分裂方法被应用于天体轨道计算和时间依赖的线性薛定谔方程的计算等问题中具有优秀的数值表现 [5, 7, 10, 15, 30, 47].

另外很多应用问题需要求解线性微分方程主导的哈密尔顿系统 (比如高振荡问题和波动问题). 在线性部分基本解 (指数积分子) 的基础上运用常数变易公式, 得到等价于微分方程的积分方程, 由此出发基于对线性部分进行指数积分或龙格 - 库塔积分, 对非线性部分应用过滤函数或者龙格 - 库塔方法等其它方法得到诸如 Gautschi 型方法、Deuflhard 三角形算法 [21]和 Runge-Kutta-Nyström 算法、ARKN, ERKN, Symplectic ERKN 等方法 [54–56]是绝对线性稳定的. 指数积分的稳定函数是超越函数, 不是有理函数, 在算法格式的具体执行中涉及到超越函数的近似计算, 因此对多自由度大规模问题不如上述分裂算法效率更高. 对于哈密尔顿系统来说, 由于其稳定性处于临界状态, 因此辛方法 (特别是非解析辛方法) 的非线性稳定性的研究更加重要 [11, 13, 18, 27, 28, 31, 37–40, 46].

一个辛算法应用于频率为 ω 的单自由度谐振子系统, 数值轨道是稳定的当且仅当时间步长满足 $h\omega\in S$; 如果应用于形如 (2.1) 的线性稳定的哈密尔顿系统, 数值轨道是稳定的当且仅当 $h\omega_j\in S, j=1,2,\cdots,n$, 这里 S 是该辛算法的线性稳定域. 因此如果一个辛算法的线性稳定域是有界集, 则计算高频问题势必要求时间步长足够小才行.

3. 辛算法的非线性稳定性

传统数值方法的稳定性理论服从 Lyapunov 的运动稳定性, 适用于具有耗散结构和渐近稳定的系统. 一般情形 (即经得起摄动的情形) 的渐近稳定系统其在平衡点处线性化矩阵的特征值都具有负实部, 在平衡点的某邻域系统与其在平衡点处的线性化系统拓扑等价 (Grobman-Hartman 定理), 因此在 Dahlquist 意义下线性稳定的算法原则上能够以任意给定的精度正确计算系统的精确轨道和平衡态解. 但是哈密尔顿系统是守恒系统, 其解不具有渐近稳定性, 在稳定的平衡点处线性化矩阵的特征值实部等于零 (对应于相流和映射的情况在稳定的平衡点处线性化矩阵的特征值落在复平面的单位圆周上), 当系统的自由度数大于 1 时, 在平衡点的邻域内系统一般不可积, 其运动具有复杂的动力学行为, 一般不与其线性化系统拓扑等价, 线性稳定性不足以保证数值方法能够正确模拟系统的运动轨道. 因此研究哈密尔顿系统的数值方法必须考虑其非线性稳定性, 即能够正确模拟非线性系统那些典型的稳定运动的性质.

非线性哈密尔顿系统平衡点的稳定性归于著名的 KAM 理论的研究范畴 [2,4,44]. KAM 定理表明, n 个自由度的非退化或者等能非退化的完全可积哈密尔顿系统 (完全可积哈密尔顿系统的解都是周期解或者拟周期解, 其在相空间或者等能面上的拓扑闭包是不变环面) 的大多数 n 维不变环面在系统的哈密尔顿摄动下不被破坏, 只是发生了小的形变, 此形变环面仍然是摄动后的哈密尔顿系统 (称之为近可积系统) 的不变环面, 其上出发的轨线是具有 n 个有理无关的频率的拟周期解, 这些 n 维不变环面在相空间 (非退化条件下) 或者等能面 (等能非退化条件下) 上构成无处稠密的闭集, 其余集的相对测度随着摄动趋于零而趋于零. 由于一个自由度的自治哈密尔顿系统是可积的, 因此椭圆平衡点自然是稳定的. 两个自由度的自治哈密尔顿系统椭圆平衡点的稳定性依赖于平衡点处的特征值 (比如不满足某些共振条件) 和相应的 Birkhoff 标准形的系数. KAM 定理保证在一定的条件下这样的系统在平衡点处的任何邻域内都存在二维不变环面, 由于二维环面把三维等能面分割成不连通的两个区域, 平衡点邻域内的任何初值被约束在两个不变环面之间, 从此初值出发的相轨线永远在这两个环面之间运动 (解的存在唯一性定理保证), 因此保证了平衡点的稳定性. 但是当自由度数 $n > 2$ 时, KAM 定理应用于 n 个自由度的哈密尔顿系统的椭圆平衡点的邻域, 也能保证在一定条件下在平衡点的任意邻域内都存在 n 维不变环面, 但因为 n 维环面不分割 $2n-1$ 维等能面为两个不连通的部分, 因此不能保证平衡点邻域内不变环面外的初值出发的相轨线永远在平衡点附近, 相反在平衡点的任何邻域有可能存在由此邻域出发的轨线扩散到指定的邻域外 (这个现象被称为 Arnold 扩散) [3,4]. 因此一般来说 $n > 2$ 个自由度的哈密尔顿系统的椭圆平衡点在 Lyapunov 意义下是不稳定的. 但如上节所述, 如果哈密尔顿函数在平衡点处是正定的, 则平衡点一定是稳定的 [34,44].

辛算法应用于 $n \geq 1$ 个自由度数的非退化的完全可积哈密尔顿系统时, 只要哈密尔顿函数充分光滑, 且时间步长充分小, 大多数 n 维不变环面也得以保持, 仍然是数值离散系统的不变环面, 初值在其上的数值轨道是在此环面上的一个拟周期迭代点列, 在环面上稠密分布, 而且数值不变环面与连续系统相应不变环面的 Haussdorff 距离与算法的截断误差具有同阶精度. 这个结果表明, 辛算法可以计算一般可积系统的大多数不变环面, 这说明从充分大测度的集合出发的数值轨道是稳定 [9,41]. 对于连续系统某个不变环面, 只要其频率满足强非共振条件, 则辛算法应用于该系统就存在具有相同频率的数值不变环面, 不过这时时间步长会发生共振. 当时间步长落在实数轴坐标原点邻域内一个在原点密度为 1 的无处稠密的闭集中时 (称之为给定频率不变环面的强非共振步长集), 数值不变环面是存在的 [42]. 对于共振频率, 数值

结果也显示了一定程度的稳定性[9]和不稳定性[11]. E. Hairer 和 C. Lubich 证明了辛算法的有效稳定性 (亦称指数稳定性)[17]: 对于充分靠近 KAM 不变环面的初值出发的数值轨道在指数长时间内 (比如 $\sim \exp(b/h^a)$, 其中 a, b 是正常数) 仍然在此不变环面附近 (比如与连续系统的不变环面的 Hausdorff 距离 $\sim h^s$, 其中 h 是算法的时间步长, s 是算法的阶). 计算不变环面的时间步长的这种微妙的复杂结构一般不可避免, 反映了哈密尔顿系统拟周期解的动力学复杂性和计算挑战性. 数值稳定性的研究是哈密尔顿系统数值方法的中心课题.

一般来说现有的数值方法都保持系统的平衡点, 但不能保证保持平衡点的类型. 辛算法能够保持哈密尔顿系统的椭圆平衡点 (只要时间步长在其线性稳定域内)[8,43,53]. R. D. Skeel 等[45] 基于 Moser 平面环域保面积扭转映射的不变闭曲线的存在性定理及其在椭圆平衡点的一个推广应用结果, 分析了辛算法在椭圆平衡点的非线性稳定性. 对一个自由度的具椭圆平衡点的哈密尔顿系统, 当时间步长在线性稳定域内, 除了个别的共振情形 (比如 3 阶和 4 阶共振), 辛算法保持椭圆平衡点的稳定性: 即在椭圆平衡点的充分小邻域内出发的数值轨道永远保持在此邻域内; 在共振情形数值解一般是不稳定的. 这个结论虽然是针对可分哈密尔顿系统和 Newmark 辛算法族的 (包括了蛙跳格式、Stömer-Verlet 格式、Numerov 格式、隐式中点公式和梯形公式等), 但结论具有一般性. 这个结果对于辛算法应用于多个自由度且在平衡点处正定的哈密尔顿系统也自然成立.

R. I. McLachlan 等[31]基于向后误差分析理论和能量面分析法研究了辛算法的非线性稳定性. 以非线性振子为例, 证明了只要时间步长充分小, 在不包含临界点的紧能量面上出发的数值轨道在关于时间步长指数长时间内仍然是有界的 (即基本在能量面周围运动, 即便逃离能量面也非常缓慢). 对于隐式中点公式而言甚至对包含临界点的紧能量面结论也成立, 但对蛙跳公式不成立. 注意到隐式中点公式是绝对线性稳定的, 而蛙跳公式不是绝对线性稳定的. 对于解析方法, 可以预期线性稳定性好的算法也有良好的非线性稳定性. 此文也提出了一个新的非线性稳定性概念, 称之为辛算法的拓扑稳定性: 在什么条件下, 辛算法的修正哈密尔顿能量面与系统的哈密尔顿能量面拓扑等价. 对于严格凸的哈密尔顿函数, 有理由猜测：当时间步长充分小时, 辛算法在此意义下是拓扑稳定的. 对于一般情形的哈密尔顿函数, 如果能量面单连通, 除了例外的能量值 (比如临界值), 只要时间步长充分小, 辛算法的拓扑稳定性在一定程度上是能够保证的.

辛算法的上述两种非线性稳定性分析方法都有较大的局限性. 平衡点分析法可以考虑大时间步长, 原则上只要在线性稳定域内避免相应的共振即可, 但是因为只考虑平衡点的局部动力学行为, 初值只能在平衡点的充分小邻域内选取. 基于向后误差分析理论和能量面分析法的非线性稳定性方法是一种大范围的分析方法, 不过一般要求时间步长充分小, 原则上远远小于线性稳定域的界. 保持可积系统的大多数 KAM 不变环面是辛算法的一个基本的普适性质, 但要求的时间步长一般更小, 而且由于共振, 只能在一个无处稠密具正测度的康托集上选取, 对于实际计算而言, 更不具有可执行性. 但正如冯康所指出的[11]: 辛算法的行为应该而且能够在 KAM 理论范围通过考察不变环面的保持和破裂来理解和分析. 一个辛算法应用于一个可积或者近可积系统, 随着时间步长的增大, 那些接近共振的数值不变环面逐个破裂, 具有更强的非共振性质的不变环面得到保持, 直到所有的数值不变环面全部破裂, 这时的临界时间步长可以被用来度量辛算法的非线性稳定性. 本文作者之一在她的博士论文中就此问题进行了初步的研究[48]. 考虑辛算法应用于一个自由度的非线性振子的情况, 基于向后误差分析理论, 通过考察同宿轨及其包围的椭圆平衡点来分析不变闭曲线的保持和破裂从而给出一个新的非线性稳定性判据. 以辛欧拉算法和隐式中点公式为例, 如果形式哈密尔顿函数的 $m(m \geq 1)$ 阶

截断系统具有同宿轨, 则此同宿轨一定包含系统的椭圆平衡点, 因此截断系统具有包围椭圆平衡点的不变闭曲线, 从而截断系统是非线性稳定的. 对于固定的 m, 随着 $h \to 0$, 此同宿轨逼近非线性振子的同宿轨; 但随着 h 增大, 同宿轨会破裂, 设同宿轨破裂的时间步长的临界值为 $h_m = h_m(\Phi)$, 其中 Φ 表示相应的辛方法. 一般来说, h_m 随着 m 的增大而减小. 这个结论对于一般的辛算法也应该成立.

给定辛算法 Φ, 令

$$h_*(\Phi) = \inf_{m \geq 1} h_m(\Phi). \tag{3.1}$$

我们猜测:

(1) $h_*(\Phi) > 0$;

(2) 若 $0 < h < h_*(\Phi)$, 则辛算法 Φ 在时间步长为 h 时应用于上述非线性振子存在同宿于双曲平衡点的同宿轨, 且此同宿轨包围椭圆平衡点.

如果此猜测成立, 我们就称 $h_*(\Phi)$ 为辛算法 Φ 的非线性稳定域的界 (以上述非线性振子为试验系统). 此时, Φ 的非线性稳定域包含区间 $(0, h_*(\Phi))$. 如果 Φ 是时间可逆的辛算法, 则其非线性稳定域就是 $(-h_*(\Phi), h_*(\Phi))$. 结合向后误差分析理论, 这个非线性稳定性判据具有实际可执行性.

4. 结　　论

本文讨论了辛算法的线性稳定性和非线性稳定性, 从动力系统和计算的角度论述了研究辛算法的这两类稳定性问题的重要性, 分析总结了相关重要结果. 给出了解析算法的明确定义, 证明了稳定函数是亚纯函数的解析辛算法是绝对线性稳定的. 绝对线性稳定的辛算法既有解析算法 (如 Runge-Kutta 辛算法), 也有非解析辛算法 (如 Gautschi 型方法、Deuflhard 三角形算法和 Runge-Kutta-Nyström 算法、ARKN, ERKN, Symplectic ERKN 等方法). 但绝对线性稳定的方法都是隐式方法, 在针对特定问题的实际应用中更受欢迎的是显式方法, 为此我们特别回顾并讨论了 R. I. McLachlan, S. K. Gray 和 S. Blanes, F. Casas, A. Murua 等关于分裂算法的线性稳定性结果, 如通过选取适当的稳定多项式函数构造具有最优线性稳定性的任意高阶分裂辛算法和高效共轭校正辛算法, 这类经优化后的方法应用于诸如高振荡系统和波动方程等线性方程或者线性主导的弱非线性方程具有良好的数值稳定性. 我们通过分析辛算法在保持椭圆平衡点的稳定性, 能量面的指数长时间慢扩散和 KAM 不变环面的保持等三个方面阐述了辛算法的非线性稳定性, 总结了相关已有结果. 最后在向后误差分析基础上, 基于一个自由度的非线性振子和同宿轨分析法讨论了辛算法的非线性稳定性, 提出了一个新的非线性稳定性判据, 这方面的研究起始于作者之一的博士论文, 更深入的研究有待进一步开展.

作者感谢审稿人的中肯意见和建议.

参 考 文 献

[1] Abias L, Sanz-Serna J M. Partitioned Runge-Kutta methods for separable Hamiltonian problems[J]. Math. Comput., 1993, 60: 617–634.

[2] Arnold V I. Mathematical Methods of Classical Mechanics[M]. GTM 60, Springer-Verlag, New York, 1978.

[3] Arnold V I. Instability of dynamical systems with several degrees of freedom[J]. Soviet Math. Dokl., 1964, 5: 581–585.

[4] Arnold V I, Kozlov V V, Neishtadt A I. Mathematical Aspects of Classical and Celestial Mechanics (Third Edition)[M]. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.

[5] Blanes S, Casas F, Farrés A, Laskar J, Makazaga J, Murua A. New families of symplectic splitting methods for numerical integration in dynamical astronomy[J]. Appl. Numer. Math., 2013, 68: 58–72.

[6] Blanes S, Casas F, Murua A. On the linear stability of splitting methods. Found[J]. Comput. Math., 2008, 8: 357–393.

[7] Blanes S, Casas F, Murua A. Error analysis of splitting methods for the time dependent Schrödinger equation[J]. SIAM J. Sci. Comput., 2011, 33: 1525–1548.

[8] Ding X H, Liu H Y, Shang Z J, Sun G. Preservation of stability properties near fixed points of linear Hamiltonian systems by symplectic integrators[J]. Applied Mathematics and Computation, 2011, 217: 6105–6114. [arXiv:0802.2121v1 [math.NA] 14 Feb 2008].

[9] Ding Z D, Shang Z J. Numerical invariant tori of symplectic integrators for integrable Hamiltonian systems[J]. Science China: Mathematics, 2018, 61(9): 1567–1588.

[10] Dujardin D, Faou E. Normal form and long time analysis of splitting schemes for the linear Schrödinger equation with small potential[J]. Numer. Math., 2007, 108(2): 223–262.

[11] 冯康. 冯康文集 (II)[M]. 北京: 国防工业出版社, 1995.

[12] 冯康, 秦孟兆. 哈密尔顿系统的辛几何算法 [M]. 杭州: 浙江科学技术出版社, 2003.

[13] Feng K, Qin M Z. Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems. Zhejiang Science and Technology Publishing House[M], Hangzhou and Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2010.

[14] Feng K, Shang Z J. Volume-preserving algorithms for source-free dynamical systems[J]. Numer. Math., 1995, 71(4): 451–463.

[15] Gauckler L, Hairer E, Lubich C. Dynamics, numerical analysis, and some geometry[J]. Proc. of the International Congress of Mathematians — Rio de Janeiro 2018, Vol. I, Plenary lectures, 523–550.

[16] Hairer E. Backward analysis of numerical integrators and symplectic methods[J]. Annals of Numerical Mathematics, 1994, 1: 107–132.

[17] Hairer E, Lubich C. The life-span of backward error analysis for numerical integrators[J]. Numer. Math., 1997, 76: 441–462.

[18] Hairer E, Lubich C, Wanner G. Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving algorithms for Ordinary Differential Equations (Second Edition)[M]. Springer Series in Computational Mathematics 31, Springer-Verlag Berlin New York, 2006.

[19] Hairer E, Nørsett S P, Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations I (Second Revised Edition)[M]. Springer Series in Computational Mathematics 8, Springer-Verlag Berlin, 1993.

[20] Hairer E, Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II (Second Revised Edition)[M]. Springer Series in Computational Mathematics 14, Springer-Verlag Berlin, 1996.

[21] Hochbruck M, Lubich C. A Gautschi-type method for oscillatory second-order differential equations[J]. Numer. Math., 1999, 83: 403–426.

[22] Jay L O. Symplectic partitioned Runge-Kutta methods for constrained Hamiltonian systems[J]. SIAM J. Numer. Anal., 1996, 33(1): 368–387.

[23] Jay L O, Petzold L R. Highly Oscillatory Systems and Periodic Stability. Preprint 95-015, Army High Performance Computing Research Center, Stanford, CA, 1995.

[24] Jordan M I. Dynamical, symplectic and stochastic perspectives on gradient-based optimization[J].

Proceedings of the International Congress of Mathematicians-Rio de Janeiro 2018. Vol.I. Plenary lectures, 523–550.

[25] Laskar J. "Is the solar system stable?"[J] In: Chaos. Vol. 66. Prog. Math. Phys. Birkhäuser/Springer, Basel, 2013, 239–270.

[26] Laskar J, Gastineau M. Existence of collisional trajectories of Mercury, Mars and Venus with the Earth[J]. Nature Letters, Vol. June 2009, 459.

[27] Leimkuhler B, Matthews C, Stoltz G. The computation of averages from equilibrium and nonequilibrium Langevin molecular dynamics[J]. IMA J. Numer. Anal, 2016, 36(1): 13–79.

[28] Leimkuhler B, Reich S. Simulating Hamiltonian Dynamics[M]. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics 14. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.

[29] López M A, Sanz-Serna J M, Skeel R D. An explicit symplectic integrator with maximal stability interval[J]. in: Numerical Analysis, A. R. Mitchel 75th Birthday Volume (D. F. Grifiths and G. A. Watson, eds.), World Scientific, Singapore, 1996, 163–176.

[30] McLachlan R I, Gray S K. Optimal stability polynomials for splitting methods, with applications to the time-dependent Schrödinger equation[J]. Appl. Mumer. Math., 1997, 25: 275–286.

[31] McLachlan R I, Perlmutter M, Quispel G R W. On the nonlinear stability of symplectic integrators[J]. BIT Numerical Mathematics, 2004, 44: 99–117.

[32] McLachlan R I, Quispel G R W. Splitting methods[J]. Acta Numerica, 2002, (11): 341–434.

[33] McLachlan R I, Sun Y J, Tse P S P. Linear stability of partitioned Runge-Kutta methods[J]. SIAM J. Numer. Anal. 2011, 49(1): 232–263.

[34] Moser J. New aspects in the theory of stability of Hamiltonian systems[J]. Commun. Pure Appl. Math., 1958, XI: 81–114.

[35] Poincaré H. Sur le probléme des trois corps et les équations de la dynamique[J]. Acta Math., 1890, 13: 1–271.

[36] Qin H, Guan X. Variational symplectic integrator for long time simulations of the guiding-certer motion of charged particles in general mananetic fields[J]. Phys. Rev. Lett., 2008, 100: 035006.

[37] Sanz-Serna J M. Two topics in nonlinear stability[J]. Advances in Numerical Analysis, W. Light, ed., Clarendon Press, Oxford, 1991, 147–174.

[38] Sanz-Serna J M, Calvo M P. Numerical Hamiltonian problems[M]. Vol. 7. Applied Mathematics and Mathematical Computation. London: Chapman & Hall, 1994.

[39] Sanz-Serna J M, Vadillo F. Nonlinear instability, the dynamic approach[J]. Numerical Analysis, D. F. Griffiths and G. A. Watson, eds., Pitman Res. Notes Math. Ser. 140, Longman Scientific and Technical, Harlow, UK, 1986, 187–199.

[40] Schlick T, Mandziuk M, Skeel R D, Srinivas K. Nonlinear resonance artifacts in molecular dynamics simulations[J]. J. Comput. Phys., 1998, 139: 1–29.

[41] Shang Z J. KAM theorem of symplectic algorithms for Hamiltonian systems[J]. Numer. Math., 1999, 83: 477–496.

[42] Shang Z J. Resonant and Diophantine step sizes in computing invariant tori of Hamiltonian systems[J]. Nonlinearity, 2000, 13: 299–308.

[43] Shang Z J. Stability analysis of symplectic integrator[R]. Report at the Oberwolfach Workshop on Geometric Numerical Integration, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, Germany, March 2006, 19–25.

[44] Siegel C L, Moser J K. Lectures on Celestial Mechanics[M]. Springer-Verlag, New York, Heidelberg, 1971.

[45] Skeel R D, Srinivas K. Nonlinear Stability Analysis of Area-Preserving Integrators[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 2000, 38(1): 129–148.

[46] Skeel R D, Zhang G, Schlick T. A family of symplectic integrators: Stability, accuracy, and molecular dynamics applications[J]. SIAM J. Sci. Comput., 1997, 18(1997): 203–222.

[47] Skokos Ch, Gerlach E, Bodyfelt J K, Papamikos G, Eggl S. High order three part split symplectic integrators: efficient techniques for the long time simulation of the disordered discrete nonlinear Schrödinger equation[J]. Phys. Lett. A, 2014, 378: 1809–1815.

[48] 宋丽娜. 哈密尔顿系统辛几何算法的稳定性及相关问题的研究 [D]. 博士学位论文, 中国科学院数学与系统科学研究院/中国科学院大学, 北京, 2009.

[49] Sun G. Symplectic partitioned Runge-Kutta methods[J]. J. Comput. Math. 1993, 11(4): 365–372.

[50] Sun G. Construction of high order symplectic PRK methods[J]. J. Comput. Math. 1995, 13(1): 40–50.

[51] Suzuki M. General theory higher order decomposition of exponential operators and symplectic integrators[J]. Phys. Lett. A, 1992, 165: 387–395.

[52] Tang Y F. The symplecticity of multi-step methods[J]. Computers Math. Applic., 1993, 25: 83–90.

[53] Wang L S, Wang Y. Preservation of equilibria for symplectic methods applied to Hamiltonian systems[J]. Acta Mathematicae Applicatae Sinica (English Series), 2010, 26(2): 219–228.

[54] Wu X Y, Liu K, Shi W. Structure-Preserving Algorithms for Oscillatory Differential Equations II [M]. Springer-Verlag Berlin Heidelberg and Science Press, Beijing, China, 2015.

[55] Wu X Y, Wang B. Recent Developments in Structure-Preserving Algorithms for Oscillatory Differential Equations [M]. Science Press Beijing and Springer Nature Singapore Pte Ltd. 2018.

[56] Wu X Y, You X, Wang B. Structure-Preserving Algorithms for Oscillatory Differential Equations[M]. Science Press Beijing and Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013.

[57] Yoshida H. Construction of higher order symplectic integrators[J]. Phys. Lett. A, 1990, 150: 262–268.

SOME NOTES ON THE STABILITY OF SYMPLECTIC METHODS

Shang Zaijiu

(*HLM, Institute of Mathematics, Academy of Mathematics and Systems Science, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;*
School of Mathematical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Song Lina

(*School of Mathematics, Jilin University, Changchun 130012, China*)

Abstract

In this paper we discuss the linear stability and nonlinear stability of symplectic methods. We illustrate the importance of studying these two types of stability in view of dynamics and its numerical computation and give a brief summary of some relevant results. We give a definition to the notion “analytic method” and show that an analytic symplectic method (e.g., Runge-Kutta symplectic methods) is absolutely linear stable if the stability function of the method is meromorphic on the complex plane. We notice that there are not only analytic methods (e.g., Runge-Kutta methods) but also non-analytic methods (e.g., various exponential integration methods based on constant variational formula) with absolutely linear stability. We review and discuss the main results, initiated by R. I. MacLachlan and S. K. Gray then further developed by S. Blanes, F. Casas and A. Murua, on the linear stability of splitting methods as well as on the construction of arbitrarily high order splitting symplectic methods and more efficient conjugate processed integrators with optimal linear stability by suitably choosing stability polynomial functions. Such optimized integrators show good numerical stability for linear dominated problems with weak nonlinear perturbations such as highly oscillatory systems and wave equations. We discuss the known results on nonlinear stability of symplectic methods by analyzing the stability of elliptic equilibrium, the exponentially slow diffusion of energy surface, and the preservation of the KAM invariant tori. At last we propose a new nonlinear stability notion by analyzing the homoclinic trajectories of the nonlinear oscillator of one degree of freedom on the basis of backward error analysis, to give a practically useful nonlinear stability criterion of symplectic methods.

Keywords: symplectic integrator; linear stability; nonlinear stability; backward error analysis; KAM theorem.

2010 Mathematics Subject Classification: 65P10, 65P40, 65L05, 65L07.