



Neumann 边界条件下 sine-Gordon 方程的高效保能量算法

洪旗^{1,4}, 王雨顺^{2,4}, 龚跃政^{3,4*}

1. 北京计算科学研究中心, 北京 100193;

2. 南京师范大学数学科学学院, 南京 210023;

3. 南京航空航天大学理学院, 南京 210016;

4. 江苏省大规模复杂系统数值模拟重点实验室, 南京 210023

E-mail: qhong@csrc.ac.cn, wangyushun@njnu.edu.cn, gongyuezheng@nuaa.edu.cn

收稿日期: 2020-08-10; 接受日期: 2020-11-21; 网络出版日期: 2021-03-26; * 通信作者

中国博士后科学基金 (批准号: 2020M670116)、江苏省大规模复杂系统数值模拟重点实验室 (批准号: 202001 和 202002)、江苏省自然科学基金 (批准号: BK20180413)、国家自然科学基金 (批准号: 11771213, 11801269 和 NSAF-U1930402) 资助项目

摘要 本文对 Neumann 边界条件下的 sine-Gordon 方程提出两类新的全离散高效保能量算法. 首先考虑在两种不同空间网格上应用 cosine 拟谱方法去发展空间保结构格式, 导出两个有限维 Hamilton 常微分方程系统. 然后, 将预估校正型的 Crank-Nicolson 格式和投影方法相结合, 得到一类全离散保能量算法. 另外, 本文对 sine-Gordon 方程引入一个补充变量, 将原始模型转化成一个松弛系统, 这使得保结构算法更容易被发展. 本文针对等价的松弛系统仍采用 cosine 拟谱方法和预估校正的 Crank-Nicolson 格式进行离散, 发展了另一类新的保能量算法. 本文提出的数值格式不仅保持系统的原始能量, 而且可以通过离散 cosine 变换进行高效快速求解. 最后, 数值实验验证了格式的数值精度、计算效率和优秀性态.

关键词 cosine 拟谱方法 保能量算法 投影方法 补充变量方法 sine-Gordon 方程

MSC (2020) 主题分类 65M06, 65M70

1 引言

本文考虑 Neumann 边界条件下不带阻尼项的二维 sine-Gordon (SG) 方程

$$\begin{cases} u_{tt} - \Delta u + \phi(x, y) \sin u = 0, & \mathbf{x} = (x, y) \in \Omega, \quad t \in (0, T], \\ u(\mathbf{x}, 0) = \phi_1(\mathbf{x}), \quad u_t(\mathbf{x}, 0) = \phi_2(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ \nabla u \cdot \mathbf{n} = 0, & (x, y) \in \partial\Omega, \quad t \in (0, T], \end{cases} \quad (1.1)$$

英文引用格式: Hong Q, Wang Y S, Gong Y Z. Efficient energy-preserving numerical approximations for the sine-Gordon equation with Neumann boundary conditions (in Chinese). Sci Sin Math, 2021, 51: 1–20, doi: [10.1360/SCM-2020-0695](https://doi.org/10.1360/SCM-2020-0695)

其中 $u(\mathbf{x}, t)$ 表示在位置 \mathbf{x} 和时刻 t 的波位移, 函数 $\phi(x, y)$ 表示 Josephson 电流密度, ϕ_1 和 ϕ_2 分别表示初始时刻波形和速度. 该方程在流体力学、凝聚态物理和非线性光学等众多领域有着广泛的应用 (参见文献 [1–3]).

特别重要的是, SG 方程具有典则 Hamilton 结构. 通过引入速度 $v = u_t$ 和变量 $z = (u, v)^T$, 原始系统可转化为

$$z_t = J \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta z}, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

其中

$$\mathcal{H}(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (v^2 + |\nabla u|^2 + 2\phi(1 - \cos u)) d\mathbf{x}$$

是 Hamilton 泛函, $\delta \mathcal{H} / \delta z$ 表示 \mathcal{H} 关于 z 的变分导数. Hamilton 系统 (1.2) 具有两个重要的守恒律, 即辛守恒律

$$\frac{d}{dt} \omega = 0, \quad \omega = \int_{\Omega} (du \wedge dv) d\mathbf{x} \quad (1.3)$$

和能量守恒律

$$\frac{d}{dt} \mathcal{H}(t) = 0. \quad (1.4)$$

关于辛守恒律 (1.3) 的具体推导在此不作详述, 可参见文献 [4–6]. 本文主要关注 SG 模型的能量守恒律 (1.4). Hamilton 系统拥有重要的能量守恒性质, 因此人们自然希望构造出的数值格式也能够在离散意义下保持这种性质. 如果数值方法能够遵循某些物理性质或数学结构, 则原始模型的动力学信息将会被长期而准确地捕捉. 这种数值格式被称为几何数值积分子或保结构算法 [5, 6].

已经有相当多的文献讨论如何发展数值方法来求解 SG 方程, 如有限差分方法 [7–9]、有限元方法 [10, 11]、无网格方法 [12, 13]、谱方法或拟谱方法 [14, 15] 等. 在这些数值方法中, 一些工作仅关注算法的代数属性, 如稳定性和收敛性等, 却忽略了问题的物理属性, 如能量守恒性. 值得注意的是, 保结构算法在保持保守量 (如系统能量) 的情形下, 往往表现出优异的长期计算稳定性.

一直以来, 保结构算法在求解保守动力系统尤其是 Hamilton 系统方面取得了巨大成功 [6]. 人们针对 SG 方程已经发展了许多保结构算法, 如辛算法和多辛算法 [4, 16–18]. 随着保结构算法的发展, 保能量算法也引起越来越多的注意. 许多技术被用于开发设计保能量算法, 如离散变分导数方法 [19, 20]、离散梯度方法 [21]、平均向量场方法 [22]、投影方法 [6, 23]、时间有限元方法 [24]、Hamilton 边界值方法 [25]、保能量指数积分方法 [26] 和指数配置方法 [27] 等. 与此同时, 保能量算法已被广泛应用于求解各种 Hamilton 偏微分方程系统, 如 Schrödinger 方程 [28]、KdV (Korteweg-de Vries) 方程 [29] 和 Maxwell 方程 [30] 等. 特别地, 关于 SG 方程的保能量算法工作, 可参见文献 [22, 31–34]. 然而, 针对 SG 模型的几乎所有保能量算法要么是非线性全隐格式, 要么是基于能量二次化技术构造的保持修正能量的线性隐格式. 因此, 研究计算效率高且保原始能量守恒律的数值格式是一个重要的研究课题, 对于数值求解 SG 方程具有重要的意义和价值.

本文对 Neumann 边界条件下的 SG 方程提出了两类新的保能量算法. 为了发展空间保结构算法, 我们分别在单元中心网格和节点网格上系统地研究了 cosine 拟谱方法, 得到了 SG 方程的两种保能量的空间逼近. 导出的半离散系统可以写成典则的 Hamilton 系统, 因此在空间半离散意义下保

持能量守恒性质. 然后, 在时间上采用预估校正型 Crank-Nicolson 格式和投影方法离散, 从而发展了一类求解 SG 方程的全离散保能量算法. 另一种构造 SG 方程的保能量算法是通过补充变量方法 (supplementary variable method, SVM), 将原始模型转化成一个松弛系统, 并使用 cosine 拟谱方法和预估校正型 Crank-Nicolson 格式分别离散空间和时间, 得到另一类新的保能量数值格式.

总而言之, 本文提出的数值格式具有以下优点:

(1) 在 Neumann 边界条件下, SG 模型的高阶空间半离散系统仍然是一个典则 Hamilton 系统.

(2) 与文献 [34] 基于 SAV (scalar auxiliary variable) 方法构造的保修正能量的线性隐格式相比, 本文构造的数值格式保原始能量守恒律.

(3) 与 EQ (energy quadratization) 方法和 SAV 方法构造的数值格式相比, 本文提出的数值格式不需要能量的非线性部分有下界限制.

(4) 与传统的保结构算法进行数值比较, 本文提出的数值格式计算效率大大提高. 另外, SVM 提供了一种全新的视角发展保结构算法. 最后, 数值结果表明了算法的数值精度和计算效率.

本文余下内容的结构如下: 第 2 节详细介绍 cosine 拟谱方法在两种空间网格下离散 SG 方程以及 cosine 拟谱微分矩阵和 DCT (discrete cosine transform) 变换的关系. 第 3 和 4 节推导两类新的全离散保能量算法, 包括投影方法和 SVM. 第 5 节给出数值实验. 第 6 节对全文进行总结.

2 空间保结构算法

本节主要提出齐次 Neumann 边界条件下 SG 方程的 cosine 拟谱空间离散方法. 矩形区域 $\Omega = [a, b] \times [c, d]$ 被一致剖分, 网格尺寸 $h_x = (b - a)/N_x$ 和 $h_y = (d - c)/N_y$, 其中 N_x 和 N_y 是两个正整数.

2.1 在单元中心网格上的空间离散

本小节考虑下列单元中心网格上的 cosine 拟谱方法:

$$\Omega_h^c = \left\{ (x_j, y_k) \mid x_j = a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h_x, y_k = c + \left(k + \frac{1}{2}\right)h_y, 0 \leq j \leq N_x - 1, 0 \leq k \leq N_y - 1 \right\}.$$

设 $V_h^c = \{u = (u_{j,k}) \mid (x_j, y_k) \in \Omega_h^c\}$ 是定义在 Ω_h^c 上的单元中心网格函数空间. 对任意两个网格函数 $u, v \in V_h^c$, 定义下列离散 L^2 内积和相应的范数:

$$(u, v)_h = h_x h_y \sum_{j=0}^{N_x-1} \sum_{k=0}^{N_y-1} u_{j,k} v_{j,k}, \quad \|u\|_h = \sqrt{(u, u)_h}. \quad (2.1)$$

定义插值空间 [35–38]

$$S_N = \{X_j(x)Y_k(y) \mid j = 0, \dots, N_x - 1, k = 0, \dots, N_y - 1\},$$

其中 $X_j(x)$ 和 $Y_k(y)$ 是插值基函数, 即

$$X_j(x) = \frac{2}{N_x} \sum_{m=0}^{N_x-1} \frac{1}{a_m} \cos(m\mu_x(x_j - a)) \cos(m\mu_x(x - a)),$$

$$Y_k(y) = \frac{2}{N_y} \sum_{m=0}^{N_y-1} \frac{1}{b_m} \cos(m\mu_y(y_k - c)) \cos(m\mu_y(y - c)),$$

这里 $\mu_x = \pi/(b-a)$, $\mu_y = \pi/(d-c)$ 且

$$a_m = \begin{cases} 2, & m = 0, \\ 1, & m \neq 0, \end{cases} \quad b_m = \begin{cases} 2, & m = 0, \\ 1, & m \neq 0. \end{cases}$$

定义下列插值算子 $I_N : C(\Omega) \rightarrow S_N$:

$$I_N u(x, y) = \sum_{j=0}^{N_x-1} \sum_{k=0}^{N_y-1} u_{j,k} X_j(x) Y_k(y), \quad (2.2)$$

其中 $u_{j,k} = u(x_j, y_k)$. 基于 (2.2), 可得二阶 cosine 拟谱微分矩阵 D_2^x 和 D_2^y , 对应矩阵元素为

$$(D_2^x)_{j,m} = \frac{d^2 X_m(x_j)}{dx^2}, \quad (D_2^y)_{k,m} = \frac{d^2 Y_m(y_k)}{dy^2}.$$

引理 2.1 ^[38] 对二阶 cosine 拟谱微分矩阵 D_2^α ($\alpha = x$ 或 $\alpha = y$), 有下式成立:

$$D_2^\alpha = C_{N_\alpha} \Lambda_2^\alpha C_{N_\alpha}^{-1}, \quad (2.3)$$

其中 C_{N_α} 表示离散 cosine 变换 (DCT-3), 其矩阵元素为

$$(C_{N_\alpha})_{j,m} = \sqrt{\frac{2}{N_\alpha a_m}} \cos \frac{m(j + \frac{1}{2})\pi}{N_\alpha},$$

且

$$\Lambda_2^\alpha = \text{diag}(\lambda_{D_2^\alpha, 0}, \lambda_{D_2^\alpha, 1}, \dots, \lambda_{D_2^\alpha, N_\alpha-1}), \quad \lambda_{D_2^\alpha, j} = -(j\mu_\alpha)^2.$$

另外, 下式也成立:

$$C_{N_\alpha}^T = C_{N_\alpha}^{-1}.$$

注 2.1 在实际数值计算中, 我们不需要知道矩阵 D_2^x 和 D_2^y 的具体元素, 而是根据 (2.3), 利用 DCT-3 快速算法计算空间导数.

接下来在单元中心网格上采用 cosine 拟谱方法离散方程 (1.1):

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} u = v, \\ \frac{d}{dt} v = \Delta_h u - \phi \sin u, \end{cases} \quad (2.4)$$

其中 $u, v, \phi \in V_h^c$, $\Delta_h u = D_2^x u + u(D_2^y)^T \in V_h^c$. 设 \mathbf{u} 、 \mathbf{v} 和 ϕ 分别是矩阵变量 u 、 v 和 ϕ 按列排列形成的长度为 $N_x \times N_y$ 的列向量. 半离散系统 (2.4) 可以写成一个典则 Hamilton 结构, 即

$$\frac{d}{dt} \mathbf{z} = \mathbf{J} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{H}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

其中 $\mathbf{z} = (\mathbf{u}, \mathbf{v})^T$, Hamilton 能量表达式为

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{v}^T \mathbf{v} - \mathbf{u}^T \mathbf{D} \mathbf{u} + 2\phi^T (1 - \cos \mathbf{u})), \quad (2.6)$$

且 $D = I_y \otimes D_2^x + D_2^y \otimes I_x$. 因为 D_2^x 和 D_2^y 都是对称矩阵, 所以 D 也是一个对称矩阵. 众所周知, 半离散 Hamilton 系统 (2.5) 具有能量守恒律

$$\frac{d}{dt} \mathbf{H} = (\nabla_z \mathbf{H})^T \frac{d}{dt} \mathbf{z} = (\nabla_z \mathbf{H})^T \mathbf{J} \nabla_z \mathbf{H} = 0. \quad (2.7)$$

定义 SG 模型的半离散能量

$$\mathcal{H}_h = \frac{1}{2} \|v\|_h^2 - \frac{1}{2} (u, \Delta_h u)_h + (\phi, 1 - \cos u)_h = h_x h_y \mathbf{H}. \quad (2.8)$$

这表明半离散系统 (2.4) 保持能量守恒律.

2.2 在节点网格上的空间离散

本小节考虑下列节点网格上的 cosine 拟谱方法:

$$\Omega_h^v = \{(x_j, y_k) \mid x_j = a + jh_x, y_k = c + kh_y, 0 \leq j \leq N_x, 0 \leq k \leq N_y\}.$$

设 $V_h^v = \{u = (u_{j,k}) \mid (x_j, y_k) \in \Omega_h^v\}$ 是定义在 Ω_h^v 上的节点网格函数空间. 定义插值空间

$$\bar{S}_N = \text{span}\{\bar{X}_j(x) \bar{Y}_k(y) \mid j = 0, \dots, N_x, k = 0, \dots, N_y\},$$

其中 $\bar{X}_j(x)$ 和 $\bar{Y}_k(y)$ 表示式为

$$\begin{aligned} \bar{X}_j(x) &= \frac{2}{N_x} \sum_{m=0}^{N_x} \frac{1}{a_m a_j} \cos(m\mu_x(x_j - a)) \cos(m\mu_x(x - a)), \\ \bar{Y}_k(y) &= \frac{2}{N_y} \sum_{m=0}^{N_y} \frac{1}{b_m b_k} \cos(m\mu_y(y_k - c)) \cos(m\mu_y(y - c)), \end{aligned}$$

这里 $\mu_x = \pi/(b-a)$, $\mu_y = \pi/(d-c)$ 且

$$a_m = \begin{cases} 2, & m = 0 \text{ 或 } m = N_x, \\ 1, & \text{其他}, \end{cases} \quad b_m = \begin{cases} 2, & m = 0 \text{ 或 } m = N_y, \\ 1, & \text{其他}. \end{cases}$$

相似地, 定义插值算子 $I_N : C(\Omega) \rightarrow \bar{S}_N$:

$$I_N u(x, y) = \sum_{j=0}^{N_x} \sum_{k=0}^{N_y} u_{j,k} \bar{X}_j(x) \bar{Y}_k(y). \quad (2.9)$$

对应的二阶 cosine 拟谱微分矩阵 \bar{D}_2^x 和 \bar{D}_2^y 的表达式分别为

$$(\bar{D}_2^x)_{j,m} = \frac{d^2 \bar{X}_m(x_j)}{dx^2}, \quad (\bar{D}_2^y)_{k,m} = \frac{d^2 \bar{Y}_m(y_k)}{dy^2}.$$

不难证明, \bar{D}_2^x 和 \bar{D}_2^y 是非对称矩阵. 然而, 通过一个简单变换, 它们可以转换成对称矩阵.

引理 2.2 ^[38] 对二阶拟谱微分矩阵 \bar{D}_2^α ($\alpha = x$ 或 $\alpha = y$), 下式成立:

$$\mathbf{T}_\alpha^{-1} \bar{D}_2^\alpha \mathbf{T}_\alpha = \mathbf{C}_{N_\alpha} \mathbf{\Lambda}_2^\alpha \mathbf{C}_{N_\alpha}^{-1}, \quad (2.10)$$

其中 $\mathbf{T}_\alpha = \text{diag}(\sqrt{a_j})_{j=0}^{N_\alpha}$, \mathbf{C}_{N_α} 表示离散 cosine 变换 (DCT-1), 对应的元素为

$$(\mathbf{C}_{N_\alpha})_{j,m} = \sqrt{\frac{2}{N_\alpha a_j a_m}} \cos \frac{jm\pi}{N_\alpha},$$

且

$$\mathbf{\Lambda}_2^\alpha = \text{diag}(\lambda_{\overline{\mathbf{D}}_2^\alpha,0}, \lambda_{\overline{\mathbf{D}}_2^\alpha,1}, \dots, \lambda_{\overline{\mathbf{D}}_2^\alpha,N_\alpha}), \quad \lambda_{\mathbf{D}_2^\alpha,j} = -(j\mu_\alpha)^2.$$

另外, 下式也成立:

$$\mathbf{C}_{N_\alpha}^T = \mathbf{C}_{N_\alpha} = \mathbf{C}_{N_\alpha}^{-1}.$$

注 2.2 类似地, 根据 (2.10), 我们可以利用 DCT-1 算法快速计算导数.

下面将在节点网络上展示 cosine 拟谱方法离散方程 (1.1):

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}u = v, \\ \frac{d}{dt}v = \overline{\Delta}_h u - \phi \sin u, \end{cases} \quad (2.11)$$

其中 $u, v, \phi \in V_h^v$, $\overline{\Delta}_h u = \overline{\mathbf{D}}_2^x u + u(\overline{\mathbf{D}}_2^y)^T \in V_h^v$. 令

$$\mathbf{U} = \mathbf{T}_x^{-1} u \mathbf{T}_y^{-1}, \quad \mathbf{V} = \mathbf{T}_x^{-1} v \mathbf{T}_y^{-1}.$$

设 \mathbf{U} 和 \mathbf{V} 是矩阵变量 U 和 V 按照列排列组成的长度为 $(N_x + 1) \times (N_y + 1)$ 的列向量. 方程 (2.11) 两边同时乘以 \mathbf{T}_x^{-1} 和 \mathbf{T}_y^{-1} , 则

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\mathbf{U} = \mathbf{V}, \\ \frac{d}{dt}\mathbf{V} = \overline{\mathbf{D}}\mathbf{U} - \nabla_{\mathbf{U}}F, \end{cases}$$

其中 $\overline{\mathbf{D}} = \mathbf{I}_y \otimes (\mathbf{C}_{N_x} \mathbf{\Lambda}_2^x \mathbf{C}_{N_x}^{-1}) + (\mathbf{C}_{N_y} \mathbf{\Lambda}_2^y \mathbf{C}_{N_y}^{-1}) \otimes \mathbf{I}_x$ 且

$$F(\mathbf{U}) = \sum_{j=0}^{N_x} \sum_{k=0}^{N_y} \left(\frac{1}{(\mathbf{T}_x)_{j,j} (\mathbf{T}_y)_{k,k}} \right)^2 \phi_{j,k} (1 - \cos((\mathbf{T}_x)_{j,j} (\mathbf{T}_y)_{k,k} U_{j,k})).$$

因此, 半离散系统 (2.11) 也可以写成一个典则 Hamilton 系统结构

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{V} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_{\mathbf{U}} H \\ \nabla_{\mathbf{V}} H \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

其中 Hamilton 能量表达式为

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \mathbf{V}^T \mathbf{V} - \frac{1}{2} \mathbf{U}^T \overline{\mathbf{D}} \mathbf{U} + F(\mathbf{U}). \quad (2.13)$$

显然, 系统 (2.12) 满足下面的能量守恒:

$$\mathbf{H}(t) \equiv \mathbf{H}(0).$$

注 2.3 对节点网格, 定义下列离散内积和相应的范数:

$$\langle u, v \rangle_T = h_x h_y \sum_{j=0}^{N_x} \sum_{k=0}^{N_y} \left(\frac{1}{(T_x)_{j,j} (T_y)_{k,k}} \right)^2 u_{j,k} v_{j,k}, \quad \|u\|_T = \sqrt{\langle u, u \rangle_T}. \quad (2.14)$$

事实上, 这里的离散内积可以通过梯形求积公式得到. 定义 SG 模型的半离散能量如下:

$$\mathcal{H}_h = \frac{1}{2} \|v\|_T^2 - \frac{1}{2} \langle u, \bar{\Delta}_h u \rangle_T + \langle \phi, 1 - \cos u \rangle_T. \quad (2.15)$$

容易验证 $\mathcal{H}_h = h_x h_y \mathbf{H}$. 因此, 半离散系统 (2.11) 也满足能量守恒律.

注 2.4 两种不同网格下的半离散系统 (2.4) 和 (2.11) 都可以写成一个典则 Hamilton 系统. 因此, 所有的辛积分和保能量算法都可以用于构造保结构算法. 但是, 现有的这些保结构算法往往是非线性隐式的, 计算代价相当高. 本文的目的是研究一些新的保能量算法, 从而使计算效率大大提高.

3 基于投影方法的保能量算法

上一节展示了由 cosine 拟谱方法离散 SG 方程得到的常微分方程系统具有能量守恒律, 这为投影方法的应用提供了先决条件. 本节侧重于为半离散系统 (2.4) 和 (2.11) 发展投影型保能量算法, 它们分别被命名为 PEPM-M 和 PEPM-R.

为了简单起见, 引入如下记号: 时间步长 $\tau = T/N_t$, 时间剖分 $t_n = n\tau$, $0 \leq n \leq N_t$, 其中 N_t 为正整数. 令

$$\begin{aligned} \delta_t^+ u^n &= \frac{1}{\tau} (u^{n+1} - u^n), \quad u^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (u^{n+1} + u^n), \\ \hat{u}^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} (\hat{u}^{n+1} + u^n), \quad \bar{u}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (3u^n - u^{n-1}). \end{aligned}$$

我们结合预估校正型 Crank-Nicolson 格式和投影策略求解半离散系统 (2.4) 和 (2.11), 得到下列全离散保能量格式.

格式 3.1 (PEPM-M) 已知 $u^{n-1}, u^n, v^n \in V_h^c$, $\forall n \geq 1$, 通过以下两步更新 $u^{n+1}, v^{n+1} \in V_h^c$:

(1) 通过预估校正型 Crank-Nicolson 格式计算 \hat{u}^{n+1} 和 \hat{v}^{n+1} :

$$\begin{cases} \frac{\hat{u}^{n+1} - u^n}{\tau} = \hat{v}^{n+\frac{1}{2}}, \\ \frac{\hat{v}^{n+1} - v^n}{\tau} = \Delta_h \hat{u}^{n+\frac{1}{2}} - \phi \sin \bar{u}^{n+\frac{1}{2}}, \\ \frac{\hat{u}^{n+1} - u^n}{\tau} = \frac{\hat{v}^{n+1} + v^n}{2}, \\ \frac{\hat{v}^{n+1} - v^n}{\tau} = \Delta_h \frac{\hat{u}^{n+1} + u^n}{2} - \phi \sin \hat{u}^{n+\frac{1}{2}}. \end{cases} \quad (3.1)$$

(2) 通过投影法 [6] 更新数值解 u^{n+1} 和 v^{n+1} :

$$\begin{cases} u^{n+1} = \hat{u}^{n+1} + \lambda (-\Delta_h \hat{u}^{n+1} + \phi \sin \hat{u}^{n+1}), \\ v^{n+1} = \hat{v}^{n+1} + \lambda \hat{v}^{n+1}, \\ \mathcal{H}_h(u^{n+1}, v^{n+1}) = \mathcal{H}_h(u^0, v^0), \end{cases} \quad (3.2)$$

其中 λ 是一个 Lagrange 乘子并且 \mathcal{H}_h 是离散能量, 即

$$\mathcal{H}_h(u, v) = \frac{1}{2} \|v\|_h^2 - \frac{1}{2} (u, \Delta_h u)_h + (\phi, 1 - \cos u)_h. \quad (3.3)$$

格式 3.2 (PEPM-R) 已知 $u^{n-1}, u^n, v^n \in V_h^v, \forall n \geq 1$, 通过以下两步计算 $u^{n+1}, v^{n+1} \in V_h^v$:

(1) 通过预估校正型 Crank-Nicolson 格式计算 \tilde{u}^{n+1} 和 \tilde{v}^{n+1} :

$$\begin{cases} \frac{\tilde{u}^{n+1} - u^n}{\tau} = \tilde{v}^{n+\frac{1}{2}}, \\ \frac{\tilde{v}^{n+1} - v^n}{\tau} = \bar{\Delta}_h \tilde{u}^{n+\frac{1}{2}} - \phi \sin \bar{u}^{n+\frac{1}{2}}, \\ \frac{\tilde{u}^{n+1} - u^n}{\tau} = \frac{\tilde{v}^{n+1} + v^n}{2}, \\ \frac{\tilde{v}^{n+1} - v^n}{\tau} = \bar{\Delta}_h \frac{\tilde{u}^{n+1} + u^n}{2} - \phi \sin \tilde{u}^{n+\frac{1}{2}}. \end{cases} \quad (3.4)$$

(2) 通过投影法更新 u^{n+1} 和 v^{n+1} :

$$\begin{cases} u^{n+1} = \tilde{u}^{n+1} + \lambda(-\bar{\Delta}_h \tilde{u}^{n+1} + \phi \sin \tilde{u}^{n+1}), \\ v^{n+1} = \tilde{v}^{n+1} + \lambda \tilde{v}^{n+1}, \\ \mathcal{H}_h(u^{n+1}, v^{n+1}) = \mathcal{H}_h(u^0, v^0), \end{cases} \quad (3.5)$$

其中

$$\mathcal{H}_h(u, v) = \frac{1}{2} \|v\|_T^2 - \frac{1}{2} \langle u, \bar{\Delta}_h u \rangle_T + \langle \phi, 1 - \cos u \rangle_T.$$

注 3.1 上述格式中, \tilde{u}^{n+1} 和 \tilde{v}^{n+1} 可以通过 DCT 显式地快速计算. 格式的第 2 步可以通过消去 u^{n+1} 和 v^{n+1} 得到一个关于 λ 的非线性代数方程, 它可以通过选取初始值为 0 的 Newton 迭代法快速求解.

4 补充变量方法 (SVM)

本节将提出关于 SG 模型构造保能量算法的一个新的思想. 首先将能量守恒看作是 SG 方程的一个约束, 即

$$\mathcal{H}[u(\mathbf{x}, t), v(\mathbf{x}, t)] \equiv \mathcal{H}[u(\mathbf{x}, 0), v(\mathbf{x}, 0)], \quad \mathcal{H}[u, v] = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (v^2 + |\nabla u|^2 + 2\phi(1 - \cos u)) d\mathbf{x}. \quad (4.1)$$

需要指出的是, 方程 (1.1) 和约束条件 (4.1) 组成了一个过定的系统. 为了求解它们, 我们通过引入一个时间依赖的补充变量 $\beta(t)$ 和用户提供的函数 $g[u, v]$ 来修正 SG 模型 (1.1), 得到如下松弛系统:

$$\begin{cases} u_t = v, \\ v_t = \Delta u - \phi \sin u + \beta(t)g[u, v], \\ \mathcal{H}[u(\mathbf{x}, t), v(\mathbf{x}, t)] = \mathcal{H}[u(\mathbf{x}, 0), v(\mathbf{x}, 0)], \end{cases} \quad (4.2)$$

其中 $g[u, v]$ 是一个已知函数且可以依赖 u 和 v 及它们的导数. 如何通过补充变量方法松弛 SG 模型有许多灵活的方式. 除特殊说明外, 本文只考虑 $g[u, v] = \phi \sin u$.

在空间和时间离散上, 本文分别用两种不同网格的 cosine 拟谱方法和预估校正型 Crank-Nicolson 格式离散系统 (4.2), 这将导出两个新的保能量算法, 分别记为 SVM-M 和 SVM-R.

格式 4.1 (SVM-M) 已知 $u^{n-1}, u^n, v^n \in V_h^c, \forall n \geq 1$, 通过以下两步更新 $u^{n+1}, v^{n+1} \in V_h^c$:

(1) 预估步: 通过一个高效的二阶格式预估 \hat{u}^{n+1} 和 \hat{v}^{n+1} :

$$\begin{cases} \frac{\hat{u}^{n+1} - u^n}{\tau} = \hat{v}^{n+\frac{1}{2}}, \\ \frac{\hat{v}^{n+1} - v^n}{\tau} = \Delta_h \hat{u}^{n+\frac{1}{2}} - \phi \sin \bar{u}^{n+\frac{1}{2}}. \end{cases} \quad (4.3)$$

(2) 校正步:

$$\begin{cases} \delta_t^+ u^n = v^{n+\frac{1}{2}}, \\ \delta_t^+ v^n = \Delta_h u^{n+\frac{1}{2}} - \phi \sin \hat{u}^{n+\frac{1}{2}} + \beta^{n+\frac{1}{2}} g[\hat{u}^{n+\frac{1}{2}}, \hat{v}^{n+\frac{1}{2}}], \\ \mathcal{H}_h[u^{n+1}, v^{n+1}] = \mathcal{H}_h[u^0, v^0], \end{cases} \quad (4.4)$$

其中

$$\mathcal{H}_h[u, v] = \frac{1}{2} \|v\|_h^2 - \frac{1}{2} (u, \Delta_h u)_h + (\phi, 1 - \cos u)_h.$$

格式 4.2 (SVM-R) 已知 $u^{n-1}, u^n, v^n \in V_h^v, \forall n \geq 1$, 通过下列两步更新 $u^{n+1}, v^{n+1} \in V_h^v$:

(1) 预估步: 通过下列的格式预估 \hat{u}^{n+1} 和 \hat{v}^{n+1} :

$$\begin{cases} \frac{\hat{u}^{n+1} - u^n}{\tau} = \hat{v}^{n+\frac{1}{2}}, \\ \frac{\hat{v}^{n+1} - v^n}{\tau} = \bar{\Delta}_h \hat{u}^{n+\frac{1}{2}} - \phi \sin \bar{u}^{n+\frac{1}{2}}. \end{cases} \quad (4.5)$$

(2) 校正步:

$$\begin{cases} \delta_t^+ u^n = v^{n+\frac{1}{2}}, \\ \delta_t^+ v^n = \bar{\Delta}_h u^{n+\frac{1}{2}} - \phi \sin \hat{u}^{n+\frac{1}{2}} + \beta^{n+\frac{1}{2}} g[\hat{u}^{n+\frac{1}{2}}, \hat{v}^{n+\frac{1}{2}}], \\ \mathcal{H}_h[u^{n+1}, v^{n+1}] = \mathcal{H}_h[u^0, v^0], \end{cases} \quad (4.6)$$

其中

$$\mathcal{H}_h[u, v] = \frac{1}{2} \|v\|_T^2 - \frac{1}{2} \langle u, \bar{\Delta}_h u \rangle_T + \langle \phi, 1 - \cos u \rangle_T.$$

接下来考虑如何高效地求解 SVM-R 格式, 而 SVM-M 格式可类似求解. 根据 (4.5), 可得

$$\hat{u}^{n+\frac{1}{2}} = \left(\mathbf{I} - \frac{\tau^2}{4} \bar{\Delta}_h \right)^{-1} \left(u^n + \frac{\tau}{2} v^n - \frac{\tau^2}{4} \phi \sin \bar{u}^{n+\frac{1}{2}} \right), \quad \hat{v}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{2}{\tau} (\hat{u}^{n+\frac{1}{2}} - u^n). \quad (4.7)$$

设

$$\begin{aligned} \tilde{u}^{n+1} &= \left(\mathbf{I} - \frac{\tau^2}{4} \bar{\Delta}_h \right)^{-1} \left(\left(\mathbf{I} + \frac{\tau^2}{4} \bar{\Delta}_h \right) u^n + \tau v^n - \frac{\tau^2}{2} \phi \sin \hat{u}^{n+\frac{1}{2}} \right), \\ \tilde{v}^{n+1} &= \frac{2}{\tau} (\tilde{u}^{n+1} - u^n) - v^n, \\ \omega^n &= \frac{\tau^2}{2} \left(\mathbf{I} - \frac{\tau^2}{4} \bar{\Delta}_h \right)^{-1} g[\hat{u}^{n+\frac{1}{2}}, \hat{v}^{n+\frac{1}{2}}], \quad \gamma^n = \frac{2}{\tau} \omega^n. \end{aligned}$$

由 (4.6) 可得

$$u^{n+1} = \tilde{u}^{n+1} + \beta^{n+\frac{1}{2}} \omega^n, \quad (4.8)$$

$$v^{n+1} = \tilde{v}^{n+1} + \beta^{n+\frac{1}{2}}\gamma^n. \quad (4.9)$$

将 (4.8) 和 (4.9) 代入 (4.6) 最后一个方程得

$$\mathcal{H}_h[\tilde{u}^{n+1} + \beta^{n+\frac{1}{2}}\omega^n, \tilde{v}^{n+1} + \beta^{n+\frac{1}{2}}\gamma^n] = \mathcal{H}_h[u^0, v^0]. \quad (4.10)$$

这是一个关于 $\beta^{n+\frac{1}{2}}$ 的非线性标量方程. 一般情况下, 这个方程有多个解, 但是我们寻找的是, 当 $\tau \rightarrow 0$ 时, $\beta^{n+\frac{1}{2}}$ 逼近 0 的解. 因此, 我们选择 0 作为初始值的 Newton 迭代法去求解这个非线性标量方程, 当时间步长 τ 不是很大时, 它的解一般趋近于 0. 一旦获得 $\beta^{n+\frac{1}{2}}$, 便可以通过 (4.8) 和 (4.9) 更新 u^{n+1} 和 v^{n+1} .

注 4.1 SVM 可以看作是对偏微分方程模型的扰动或投影. 在 SVM 中, 补充函数 $g[u, v]$ 的选择是非常灵活的并且数值格式也证实了这个事实. SVM 思想已被用于求解耗散系统 [39–41]. 总而言之, SVM 提供了一种完全崭新的视角研究保结构数值格式.

5 数值实验

本节主要呈现一些数值实验, 验证数值格式的收敛率和保能量性质. 在数值格式中, 如果用 u^n 代替 $\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}$, 则会得到一个两层格式. 在数值实现中, 我们用这个两层格式去计算初始数据. 除了特别说明外, 非线性代数方程的迭代终止条件设置为 $\text{Tol} = 1.0 \times 10^{-14}$.

例 5.1 (网格加密测试) 考虑下列一维 SG 方程:

$$u_{tt} - u_{xx} + \sin u = 0,$$

该方程有一个解析解 [42]

$$u(x, t) = 4 \arctan(c^{-1} \sin(ckt) \text{sech}(\kappa x)),$$

其中 $\kappa = 1/\sqrt{1+c^2}$. 其初始条件为

$$u(x, 0) = 0, \quad u_t(x, 0) = 4\kappa \text{sech}(\kappa x).$$

这个解称为 SG 方程的通解, 表示脉冲型孤子. 取计算区域 $\Omega = [-20, 20]$ 以及参数 $c = 0.5$. 当测试空间精度时, 为了避免时间方向上的误差造成影响, 我们选取时间步长 $\tau = 1.0 \times 10^{-4}$, 然后空间网格剖分从 $N_x = N = 16, 32, 64, 128$ 到 256 进行加密. 图 1 展示了 $t = 1$ 时刻的 L^2 误差和 L^∞ 误差. 数值结果表明数值格式在空间上具有谱精度.

对于时间方向的精度测试, 我们固定 $N = 256$. 图 2 给出了在 $t = 1$ 时刻时间方向上的离散 L^2 误差和 L^∞ 误差. 数值结果表明数值格式在时间上具有二阶精度. 由图 3 可知, 补充变量 β 和 Lagrange 乘子 λ 的数值精度具有二阶精度和三阶精度. 总而言之, 这些数值结果验证了数值格式的正确性.

本节也与文献 [34] 中数值格式 (SAV-M, SAV-R) 和文献 [22] 中数值格式 (AVF-M, AVF-R) 进行比较, 并且所有的数值格式都用 cosine 拟谱方法离散空间. 表 1 总结了相应的离散 L^2 误差和最大模误差. 这些数值结果表明我们的格式具有很好的数值精度. 而 PEPM-M 格式数值精度比 SVM-M 格式在单位中心网格上表现得要好.

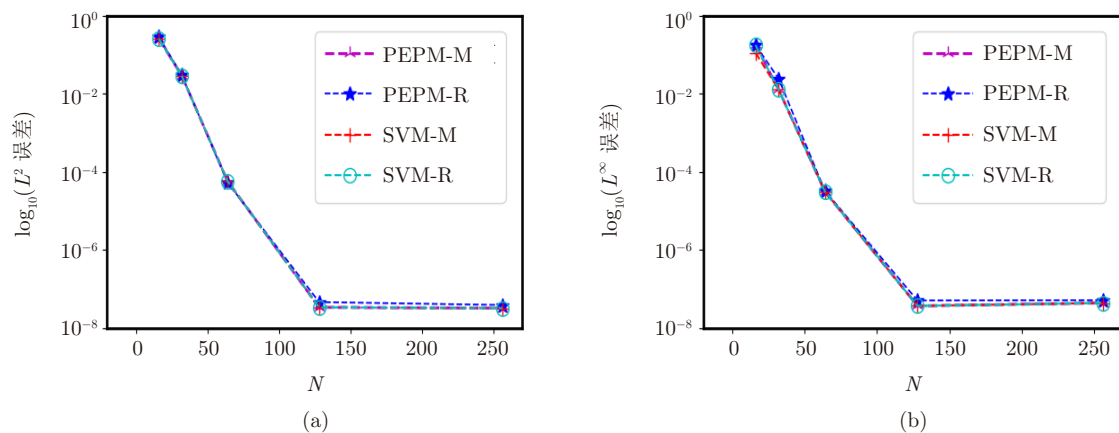


图 1 (网络版彩图) 例 5.1: 固定时间步长 $\tau = 1.0\text{E}-4$, 计算空间方向数值精度. 数值结果表明空间方向具有谱精度. (a) 空间方向数值解的 L^2 误差; (b) 空间方向数值解的 L^∞ 误差

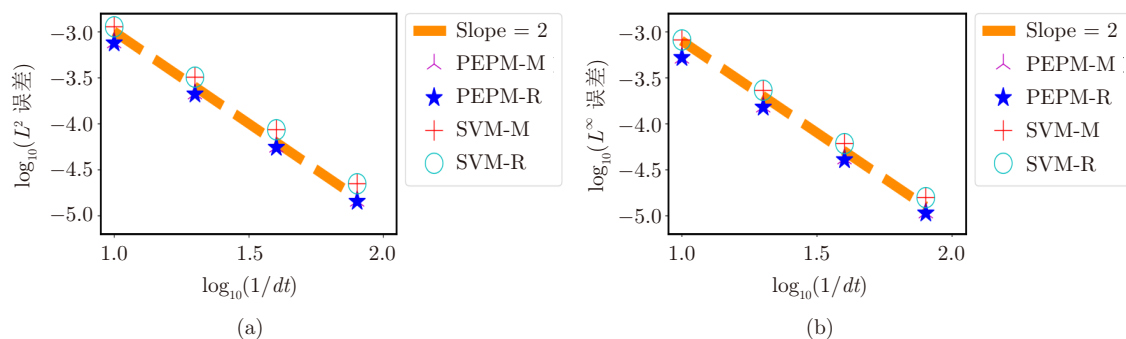


图 2 (网络版彩图) 例 5.1: 固定空间网格 $N = 256$, 计算时间方向数值精度. 数值结果表明时间方向具有二阶精度. (a) 时间方向数值解的 L^2 误差; (b) 时间方向数值解的 L^∞ 误差

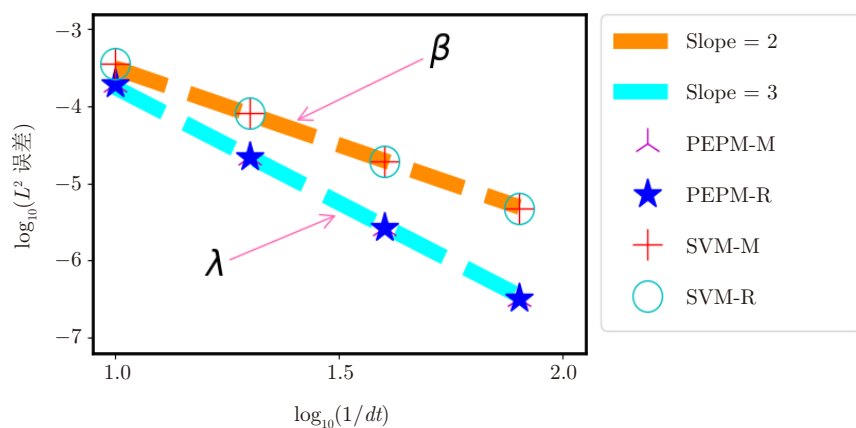


图 3 (网络版彩图) 例 5.1: 补充变量 β 和 Lagrange 乘子 λ 的误差图. 数值结果表明它们的斜率分别是 2 和 3

表 1 不同数值格式在 $t = 10$ 时刻的数值解误差, 其中 $\tau = 1.0\text{E}-2$ 和 $N = 128$

数值格式	SAV-M	AVF-M	PEPM-M	SVM-M
L^2 误差	1.50E-01	4.12E-05	9.20E-06	2.35E-05
L^∞ 误差	7.17E-02	2.14E-05	6.70E-06	1.20E-05
数值格式	SAV-R	AVF-R	PEPM-R	SVM-R
L^2 误差	1.50E-01	4.13E-05	3.35E-05	2.35E-05
L^∞ 误差	7.19E-02	2.08E-05	1.57E-05	1.15E-05

5.1 线孤子

例 5.2 (线孤子的摄动) 一个静止的线孤子摄动产生两个相互对称的凹陷, 这两个凹陷以不变的速度朝对方运动. 由文献 [43] 知, 凹陷碰撞后继续以原来的速度传播, 没有变化发生. 定义 $\phi(x, y) = 1$, 初始条件为

$$\begin{cases} u(\mathbf{x}, 0) = 4 \tan^{-1}[\exp(x + 1 - 2\text{sech}(y + 7)) - 2\text{sech}(y - 7)], \\ v(\mathbf{x}, 0) = 0. \end{cases}$$

选取计算区域 $\Omega = [-7, 7]$ 和 $N_x \times N_y = 128 \times 128$ 的空间网格进行数值模拟. 图 4 以 $\sin(u/2)$ 的方式展示了不同时刻的凹陷运动图, 包括初始时刻 $t = 0$ 的凹陷图、 $t = 7$ 时凹陷碰撞以及碰撞后凹陷继续

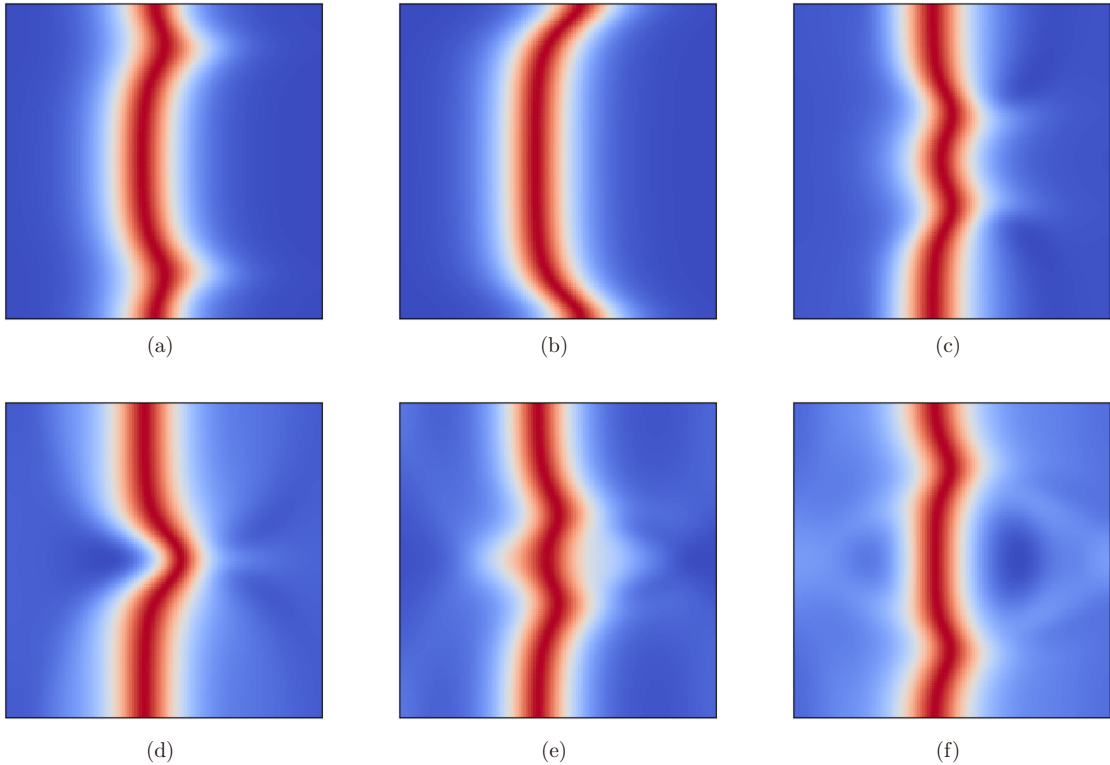


图 4 (网络版彩图) 例 5.2: 在 (a) $t = 0$; (b) $t = 2$; (c) $t = 5$; (d) $t = 7$; (e) $t = 9$; (f) $t = 11$ 时刻 $\sin(u/2)$ 的数值解

传播. 这些数值结果与文献 [43] 中的结论一致. 图 5(a) 表明我们的格式可以非常精确地保原始能量守恒. 图 5(b) 说明了补充变量 β 和 Lagrange 乘子 λ 在 0 附近振荡.

为了验证本文提出的数值格式的优势, 我们进一步将其与 SAV-M 格式、SAV-R 格式、AVF-M 格式和 AVF-R 格式进行比较. 图 6 和 7 分别展示了计算效率和原始能量误差. 在这些数值模拟中, 迭代终止条件 $\text{Tol} = 1.0 \times 10^{-12}$. 图 6 中的数据表明 SVM-M/-R 格式和 PEPM-M/-R 格式计算效率低于 SAV-M/-R 格式, 但是高于 AVF-M/-R 格式. 这是因为我们的数值格式在计算时仅要求解一个标量的非线性方程, 这个计算代价相比格式中的预估校正步是可以忽略不计的, 但是 AVF-M/-R 格式在每个时间步都需要求解一个非线性方程组. 图 7 表明我们的格式在数值上可以很好地保原始能量守恒

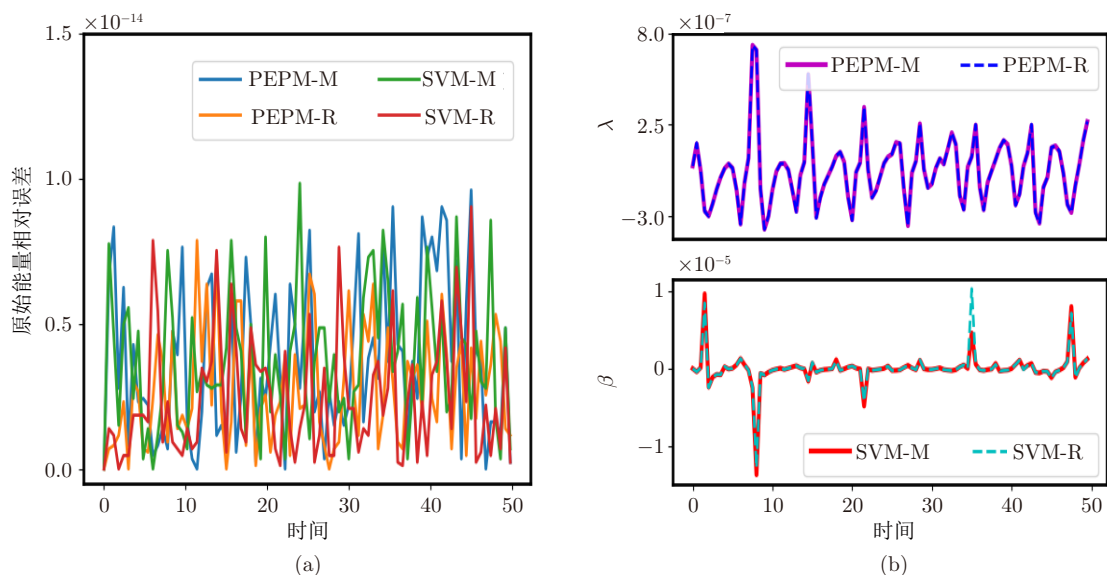


图 5 (网络版彩图) 例 5.2: (a) 4 种数值格式能量误差图, 其中 $\tau = 0.01$ 和 $N_x = N_y = 128$, 这些能量曲线图表明 4 种数值格式都满足能量守恒律; (b) 补充变量 β 和 λ 随时间变化的误差图

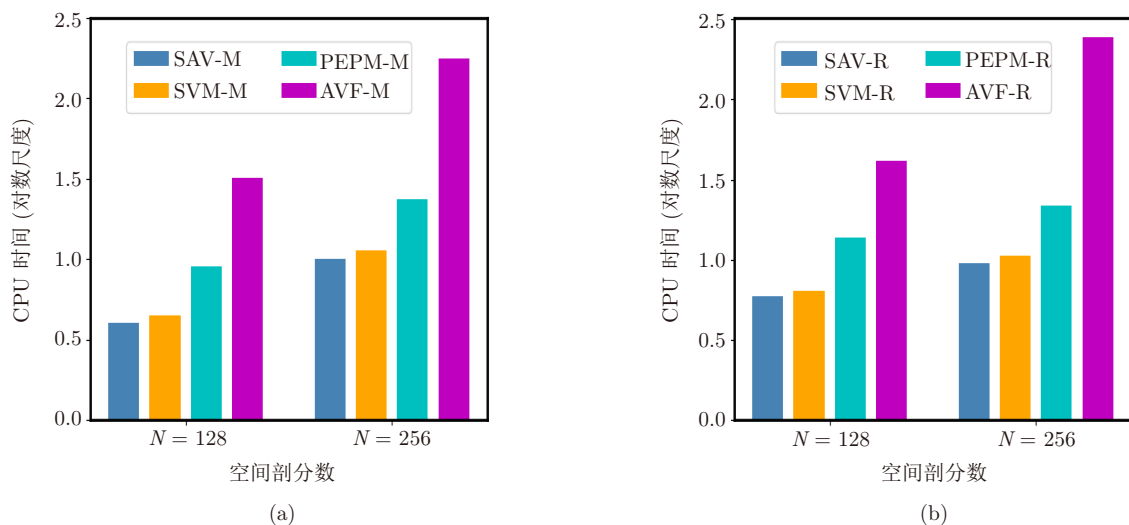


图 6 (网络版彩图) 例 5.2: 不同数值格式之间 CPU 计算效率, 其中 $\tau = 0.01$. (a) 单元中心网格; (b) 节点网格

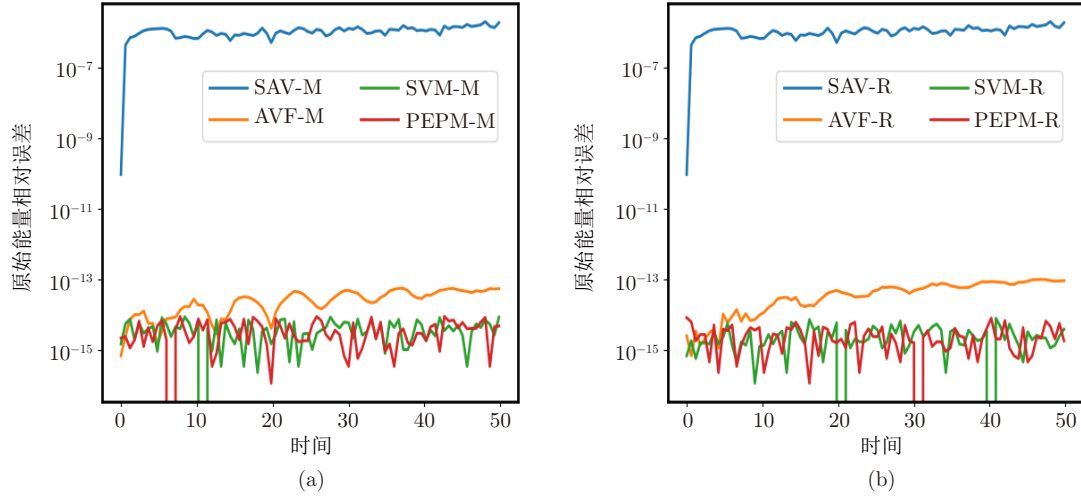


图 7 (网络版彩图) 例 5.2: 不同的数值格式之间的能量误差图, 其中 $\tau = 0.01$ 和 $N_x = N_y = 128$. (a) 单元中心网格; (b) 节点网格

律, 但是 SAV-M/-R 格式无法保原始能量守恒.

例 5.3 (非均匀介质中的线孤子) 为了研究非均匀介质中的线孤子, 取

$$\phi(x, y) = 1 + \text{sech}^2(\sqrt{x^2 + y^2})$$

和初始条件

$$\begin{cases} u(\mathbf{x}, 0) = 4 \tan^{-1} \left[\exp \left(\frac{x - 3.5}{0.954} \right) \right], \\ v(\mathbf{x}, 0) = 0.629 \text{sech} \left[\exp \left(\frac{x - 3.5}{0.954} \right) \right]. \end{cases} \quad (5.1)$$

选取计算区域 $\Omega = [-7, 7] \times [-7, 7]$ 、空间剖分 $N_x = N_y = 128$ 和时间步长 $\tau = 0.01$. 图 8 展示了不同时刻 $\sin(u/2)$ 的数值解图. 这些数值结果与文献 [10, 43, 44] 结论一致. 图 9(a) 记录了本文提出的数值格式的原始能量误差. 显然, 这些结果清晰地表明本文提出的格式保原始能量守恒律. 另外, 图 9(b) 给出了补充变量 β 和 Lagrange 乘子 λ 的数值表现并且 β 和 λ 分别达到 $\mathcal{O}(\tau^2)$ 和 $\mathcal{O}(\tau^3)$. 这些数值结果强有力地表明了本文提出的数值格式可用于预测非均匀介质中的线孤子的准确运动.

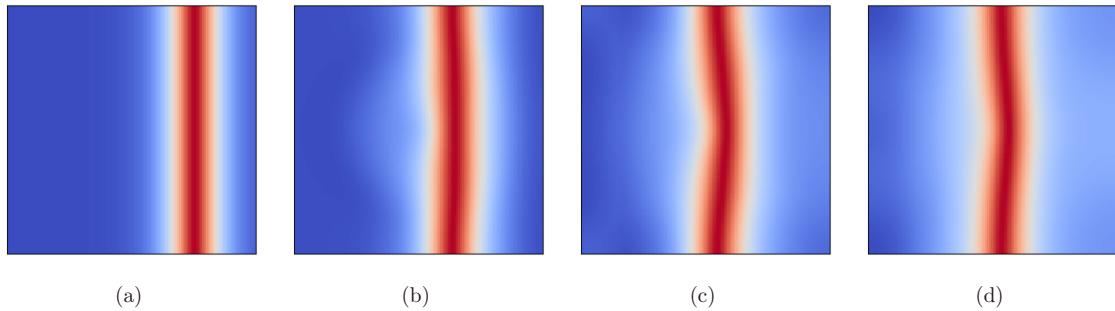


图 8 (网络版彩图) 例 5.3: 在 (a) $t = 0$; (b) $t = 6$; (c) $t = 12$; (d) $t = 18$ 时刻 $\sin(u/2)$ 的数值解

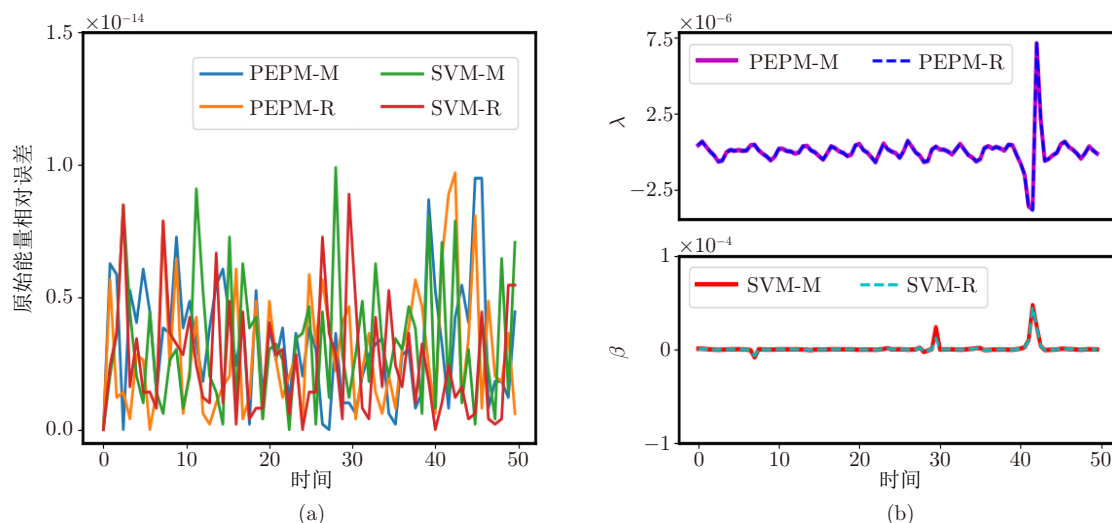


图 9 (网络版彩图) 例 5.3: (a) 4 种数值格式的能量误差曲线图, 其中 $\tau = 0.01$ 和 $N_x = N_y = 128$, 这些能量曲线图表明数值格式保原始能量守恒律; (b) 补充变量 β 和 Lagrange 乘子 λ 的误差图

5.2 环孤子

例 5.4 (圆环孤子) 此例考虑 $\phi(x, y) = 1$ 和初始条件 [9]

$$\begin{cases} u(\mathbf{x}, 0) = 4 \tan^{-1}[\exp(3 - \sqrt{x^2 + y^2})], \\ v(\mathbf{x}, 0) = 0. \end{cases}$$

选取计算区域 $\Omega = [-14, 14] \times [-14, 14]$ 和空间剖分 $N_x = N_y = 128$. 图 10 展示了不同时刻 $\sin(u/2)$ 的数值结果. 这些数值表现与文献 [9, 43] 一致. 图 11(a) 给出了原始能量误差且数值结果表明本文提出的格式保原始能量守恒律. 图 11(b) 给出了补充变量 β 和 Lagrange 乘子 λ 随时间演化的数值结果且 β 和 λ 的最大值分别达到 10^{-4} 和 10^{-6} . 总之, 以上数值行为表明本文提出的数值格式处理 Neumann 边界条件非常有效.

例 5.5 (4 个扩展环孤子碰撞) 考虑 4 个扩展圆环孤子的碰撞结束本节数值内容, 孤子解可以用对称关系进行扩展. 选取 $\phi(x, y) = 1$ 和初值条件

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}, 0) &= 4 \tan^{-1} \left[\exp \left(\frac{4 - \sqrt{(x+3)^2 + (y+3)^2}}{0.436} \right) \right], \\ v(\mathbf{x}, 0) &= 4.13 \operatorname{sech} \left[\exp \left(\frac{4 - \sqrt{(x+3)^2 + (y+3)^2}}{0.436} \right) \right]. \end{aligned}$$

选取计算区域 $\Omega = [-30, 10] \times [-30, 10]$ 和 128×128 的空间网格进行数值模拟. 我们将研究不同的补充函数 $g[u, v]$ 对数值结果的影响. 为了节约排版空间, 这里仅考虑 SVM-M 格式, 其中 $g_1[u, v] = \phi \sin u$ 和 $g_2[u, v] = \Delta u - \phi \sin u$. 图 12 展示了不同时刻 $\sin(u/2)$ 的表面图和等高线图, 其中 4 个扩展的圆环孤子之间相互碰撞, 最后形成一个大的环形孤子. 这些结果与文献 [9, 10] 一致. 这也表明本文提出的数值格式可以很好地模拟这个问题. 图 13 分别给出了原始能量误差图和补充变量随时间变化图. 结果表明两种不同的补充函数 g_1 和 g_2 产生的数值结果都可以精确地保原始能量守恒. 另外, 补充变量 $\beta(t)$ 随着时间演化趋近于 0.

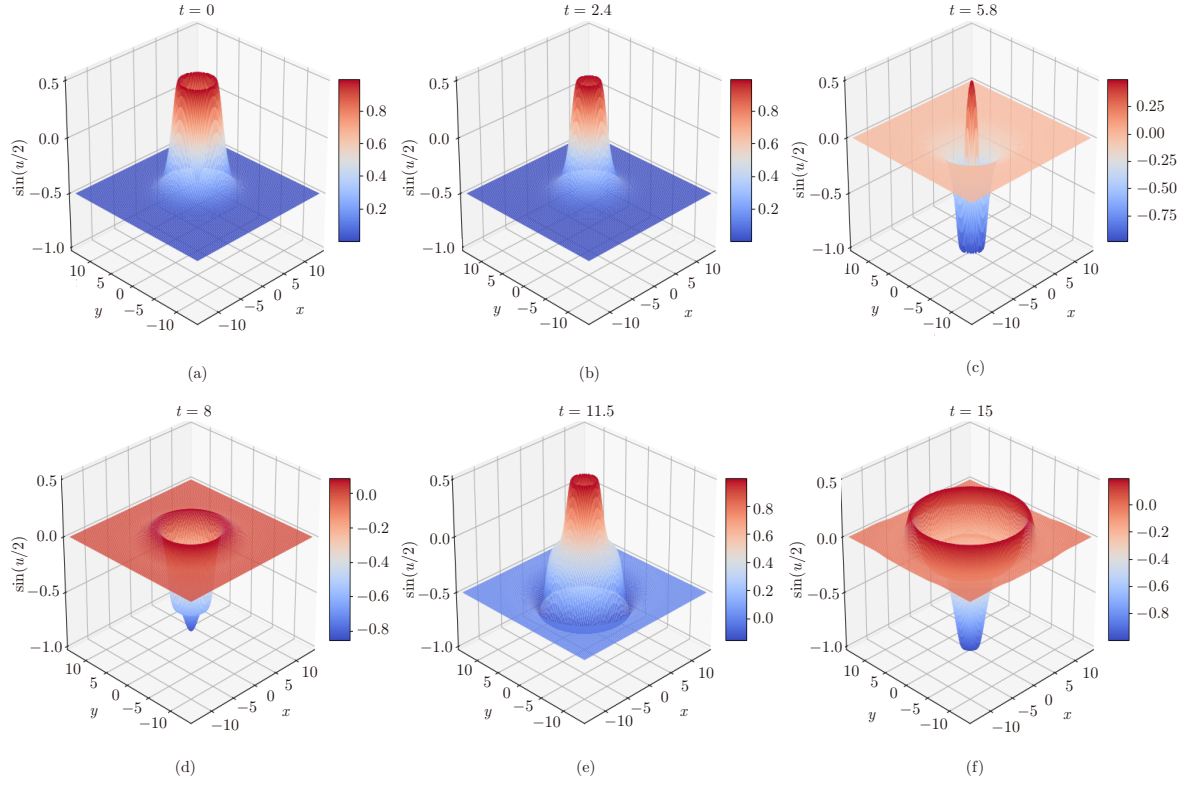


图 10 (网络版彩图) 例 5.4: 圆环孤子关于 $\sin(u/2)$ 在 (a) $t = 0$; (b) $t = 2.4$; (c) $t = 5.8$; (d) $t = 8$; (e) $t = 11.5$; (f) $t = 15$ 时刻的数值解图, 其中 $\tau = 0.01$ 和 $N_x = N_y = 128$

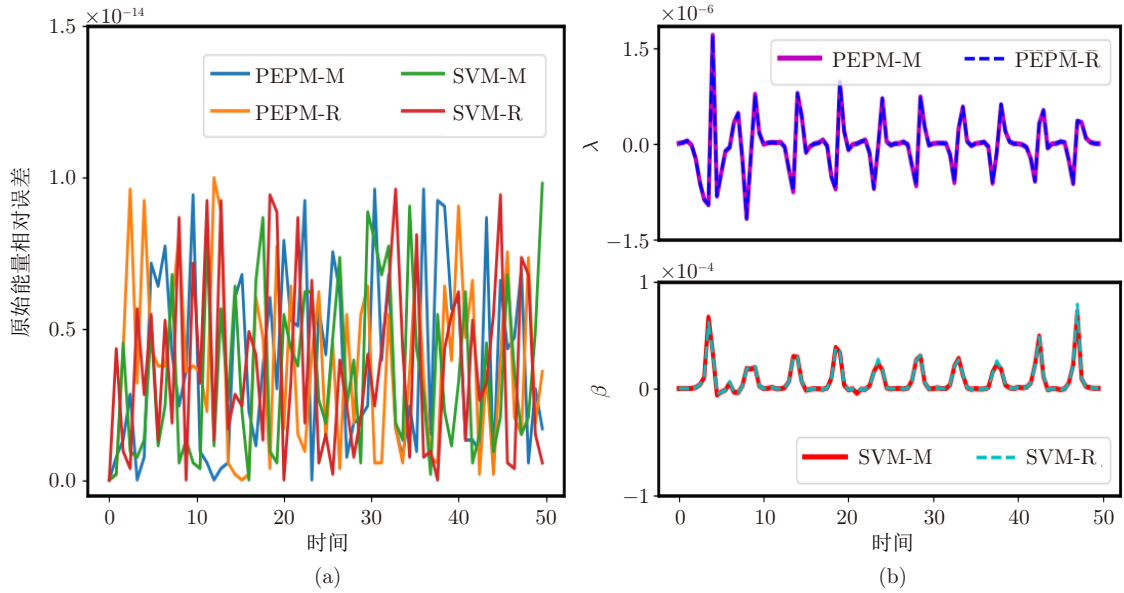


图 11 (网络版彩图) 例 5.4: (a) 数值格式的能量误差曲线图, 其中 $\tau = 0.01$ 和 $N_x = N_y = 128$, 这些能量曲线图表明数值格式遵循原始能量守恒律; (b) 补充变量 β 和 Lagrange 乘子 λ 随时间变化的误差图, 子图的数据表明 $\beta(t)$ 和 $\lambda(t)$ 在 0 附近震荡

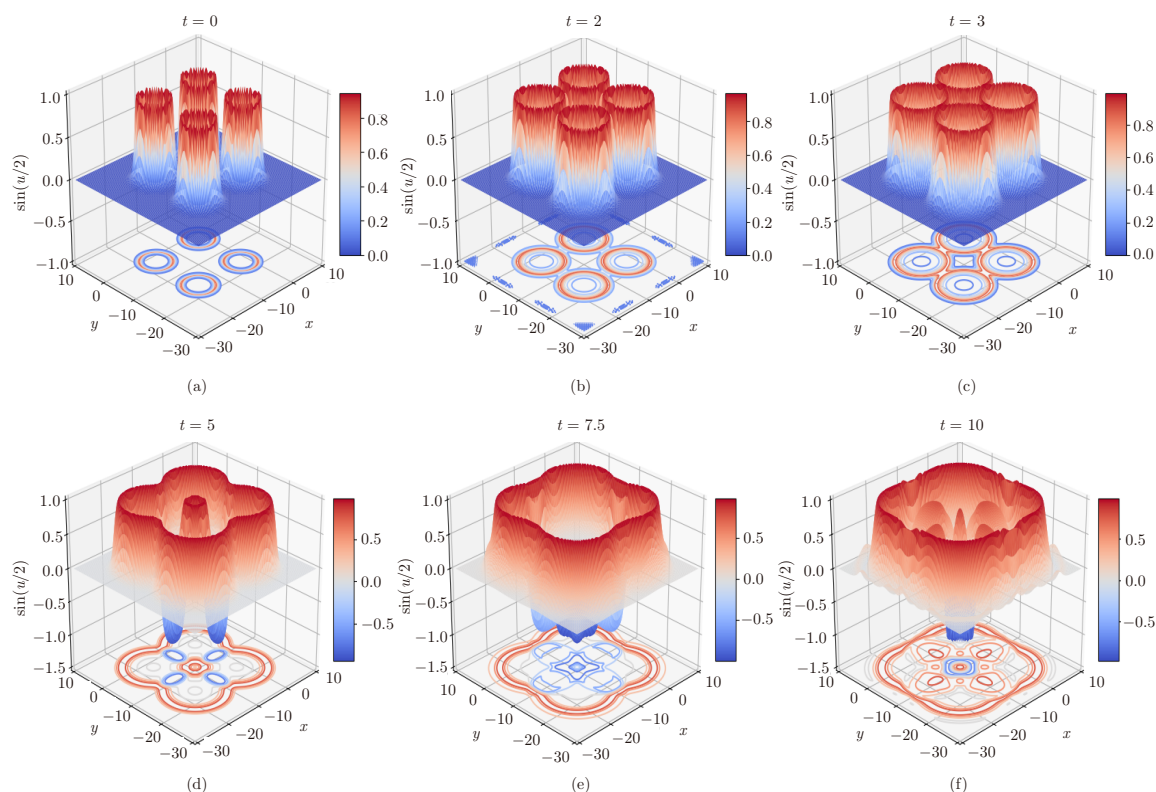


图 12 (网络版彩图) 例 5.5: 4 个扩展环孤子碰撞在 (a) $t = 0$; (b) $t = 2$; (c) $t = 3$; (d) $t = 5$; (e) $t = 7.5$; (f) $t = 10$ 时刻关于 $\sin(u/2)$ 的表面图和等高线图, 其中 $\tau = 0.01$ 和 $N_x = N_y = 128$

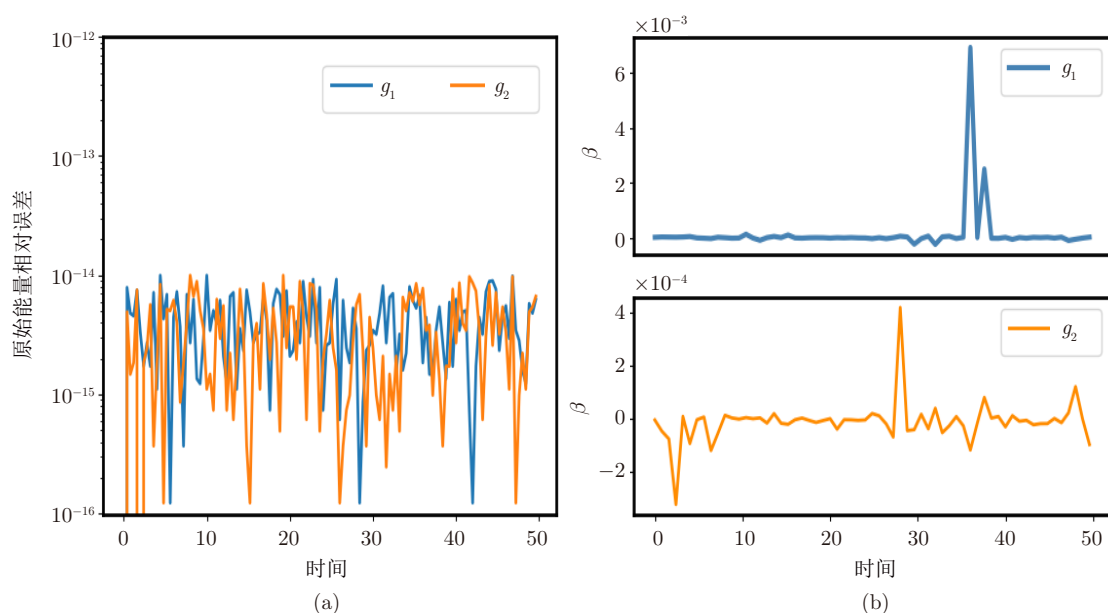


图 13 (网络版彩图) 例 5.5: (a) 选取补充函数 g_1 和 g_2 产生的能量误差图, 其中 $\tau = 0.01$ 和 $N_x = N_y = 128$, 数值结果表明这两种不同的补充函数产生的数值结果都保原始能量守恒律; (b) 补充变量曲线图表明 $\beta(t)$ 大约是 $\mathcal{O}(\tau^2)$

6 总结

本文对 SG 方程在 Neumann 边界条件下发展了两类新的保结构算法, 它们分别基于投影方法和补充变量方法构造. 我们提出了两种不同的 cosine 拟谱方法设计高阶空间离散, 一种基于单元中心网格, 另一种基于节点网格, 在空间半离散意义下它们都可以写成一个典则 Hamilton 系统且遵循能量守恒. 第一种方法是结合投影技巧和预估校正型 Crank-Nicolson 格式构造全离散保能量算法, 其中时间是二阶精度且空间是高阶精度. 另外产生的数值误差比已有的保能量算法要小. 在第二种方法中, 本文提出了一个新的想法, 即使用补充变量方法 (SVM) 关于 SG 方程在两种不同网格上构造保能量算法, 其中 cosine 拟谱方法和预估校正型 Crank-Nicolson 格式分别离散空间和时间, 而且这些格式被证实保原始能量守恒律. 另外, 这些格式需要通过 Newton 迭代求解一个标量非线性方程, 这与格式的主要计算量相比可忽略不计. 但是, 这会导致其收敛性和误差分析十分困难, 这也是我们正在进行的研究课题. 一些数值实验验证了本文提出的数值格式的精度和计算效率. 本文提出的保结构算法思想可以推广到更一般的 Hamilton 系统且相应的高阶保结构算法在后续工作中展示.

致谢 感谢审稿人对本文的审阅和提出的修改意见.

参考文献

- 1 Josephson B D. Supercurrents through barriers. *Adv Phys*, 1965, 14: 419–451
- 2 Dodd R, Morris H, Eilbeck J, et al. Soliton and Nonlinear Wave Equations. London-New York: Academic Press, 1982
- 3 Drazin P, Johnson R. Solitons: An Introduction, Vol. 2. Cambridge: Cambridge University Press, 1989
- 4 McLachlan R. Symplectic integration of Hamiltonian wave equations. *Numer Math*, 1993, 66: 465–492
- 5 Feng K, Qin M. Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems. Berlin-Heidelberg: Springer, 2010
- 6 Hairer E, Lubich C, Wanner G. Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. Springer Series in Computational Mathematics, vol. 31. Berlin-Heidelberg: Springer, 2006
- 7 Bratsos A G. The solution of the two-dimensional sine-Gordon equation using the method of lines. *J Comput Appl Math*, 2007, 206: 251–277
- 8 Guo B-Y, Pascual P J, Rodriguez M J, et al. Numerical solution of the sine-Gordon equation. *Appl Math Comput*, 1986, 18: 1–14
- 9 Sheng Q, Khaliq A Q M, Voss D A. Numerical simulation of two-dimensional sine-Gordon solitons via a split cosine scheme. *Math Comput Simulation*, 2005, 68: 355–373
- 10 Argyris J, Haase M, Heinrich J C. Finite element approximation to two-dimensional sine-Gordon solitons. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 1991, 86: 1–26
- 11 Wang C. Convergence of the interpolated coefficient finite element method for the two-dimensional elliptic sine-Gordon equations. *Numer Methods Partial Differential Equations*, 2011, 27: 387–398
- 12 Mirzaei D, Dehghan M. Meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) approximation to the two dimensional sine-Gordon equation. *J Comput Appl Math*, 2010, 233: 2737–2754
- 13 Dehghan M, Ghesmati A. Numerical simulation of two-dimensional sine-Gordon solitons via a local weak meshless technique based on the radial point interpolation method (RPIM). *Comput Phys Comm*, 2010, 181: 772–786
- 14 Ablowitz M J, Herbst B M, Schober C M. Numerical simulation of quasi-periodic solutions of the sine-Gordon equation. *Phys D*, 1995, 87: 37–47
- 15 Asgari Z, Hosseini S M. Numerical solution of two-dimensional sine-Gordon and MBE models using Fourier spectral and high order explicit time stepping methods. *Comput Phys Comm*, 2013, 184: 565–572
- 16 Wang Y, Wang B, Ji Z, et al. High order symplectic schemes for the sine-Gordon equation. *J Phys Soc Japan*, 2003, 72: 2731–2736
- 17 Chen J B. Symplectic and multisymplectic Fourier pseudospectral discretizations for the Klein-Gordon equation. *Lett Math Phys*, 2006, 75: 293–305
- 18 McLachlan R I, Ryland B N, Sun Y. High order multisymplectic Runge-Kutta methods. *SIAM J Sci Comput*, 2014, 36: A2199–A2226

- 19 Furihata D. Finite difference schemes for $\frac{\partial u}{\partial t} = (\frac{\partial}{\partial x})^\alpha \frac{\delta G}{\delta u}$ that inherit energy conservation or dissipation property. *J Comput Phys*, 1999, 156: 181–205
- 20 Matsuo T, Furihata D. Dissipative or conservative finite-difference schemes for complex-valued nonlinear partial differential equations. *J Comput Phys*, 2001, 171: 425–447
- 21 Dahlby M, Owren B. A general framework for deriving integral preserving numerical methods for PDEs. *SIAM J Sci Comput*, 2011, 33: 2318–2340
- 22 Celledoni E, Grimm V, McLachlan R I, et al. Preserving energy resp. dissipation in numerical PDEs using the “Average Vector Field” method. *J Comput Phys*, 2012, 231: 6770–6789
- 23 Calvo M, Hernández-Abreu D, Montijano J I, et al. On the preservation of invariants by explicit Runge-Kutta methods. *SIAM J Sci Comput*, 2006, 28: 868–885
- 24 Hansbo P. A note on energy conservation for Hamiltonian systems using continuous time finite elements. *Comm Numer Methods Engg*, 2001, 17: 863–869
- 25 Brugnano L, Iavernaro F, Trigiante D. Hamiltonian boundary value methods (energy preserving discrete line integral methods). *JNAIAM J Numer Anal Ind Appl Math*, 2010, 5: 17–37
- 26 Miyatake Y. An energy-preserving exponentially-fitted continuous stage Runge-Kutta method for Hamiltonian systems. *BIT*, 2014, 54: 777–799
- 27 Wang B, Wu X. Exponential collocation methods for conservative or dissipative systems. *J Comput Appl Math*, 2019, 360: 99–116
- 28 Wang T, Wang J, Guo B. Two completely explicit and unconditionally convergent Fourier pseudo-spectral methods for solving the nonlinear Schrödinger equation. *J Comput Phys*, 2020, 404: 109116
- 29 Brugnano L, Gurioli G, Sun Y. Energy-conserving Hamiltonian boundary value methods for the numerical solution of the Korteweg-de Vries equation. *J Comput Appl Math*, 2019, 351: 117–135
- 30 Kong L, Hong Y, Tian N, et al. Stable and efficient numerical schemes for two-dimensional Maxwell equations in lossy medium. *J Comput Phys*, 2019, 397: 108703
- 31 Fei Z, Vázquez L. Two energy conserving numerical schemes for the sine-Gordon equation. *Appl Math Comput*, 1991, 45: 17–30
- 32 Shi W, Liu K, Wu X, et al. An energy-preserving algorithm for nonlinear Hamiltonian wave equations with Neumann boundary conditions. *Calcolo*, 2017, 54: 1379–1402
- 33 Gong Y, Hong Q. A linearly energy-preserving Fourier pseudospectral method based on energy quadratization for the sine-Gordon equation. In: *Proceedings of 16th International Bhurban Conference on Applied Sciences and Technology*. Islamabad: IEEE, 2019, 703–708
- 34 Cai W, Jiang C, Wang Y, et al. Structure-preserving algorithms for the two-dimensional sine-Gordon equation with Neumann boundary conditions. *J Comput Phys*, 2019, 395: 166–185
- 35 Bao W, Dong X, Zhao X. An exponential wave integrator sine pseudospectral method for the Klein-Gordon-Zakharov system. *SIAM J Sci Comput*, 2013, 35: A2903–A2927
- 36 Bao W, Cai Y. Uniform and optimal error estimates of an exponential wave integrator sine pseudospectral method for the nonlinear Schrödinger equation with wave operator. *SIAM J Numer Anal*, 2014, 52: 1103–1127
- 37 Gong Y, Cai J, Wang Y. Multi-symplectic Fourier pseudospectral method for the Kawahara equation. *Commun Comput Phys*, 2014, 16: 35–55
- 38 Shen J, Tang T, Wang L. *Spectral Methods: Algorithms, Analysis and Applications*. Springer Series in Computational Mathematics, vol. 41. Berlin-Heidelberg: Springer, 2011
- 39 Hong Q, Li J, Wang Q. Supplementary variable method for structure-preserving approximations to partial differential equations with deduced equations. *Appl Math Lett*, 2020, 110: 106576
- 40 Cheng Q, Liu C, Shen J. A new lagrange multiplier approach for gradient flows. *arXiv:1911.08336*, 2019
- 41 Gong Y, Hong Q, Wang Q. Supplementary variable method for developing structure-preserving numerical approximations to thermodynamically consistent partial differential equations. *arXiv:2006.04348*, 2020
- 42 Bratsos A G. A numerical method for the one-dimensional sine-Gordon equation. *Numer Methods Partial Differential Equations*, 2008, 24: 833–844
- 43 Christiansen P L, Lomdahl P S. Numerical study of 2 + 1 dimensional sine-Gordon solitons. *Phys D*, 1981, 2: 482–494
- 44 Dehghan M, Shokri A. A numerical method for solution of the two-dimensional sine-Gordon equation using the radial basis functions. *Math Comput Simulation*, 2008, 79: 700–715

Efficient energy-preserving numerical approximations for the sine-Gordon equation with Neumann boundary conditions

Qi Hong, Yushun Wang & Yuezheng Gong

Abstract We present two novel classes of fully discrete energy-preserving algorithms for the sine-Gordon equation subject to Neumann boundary conditions. The cosine pseudo-spectral method is firstly used to develop structure-preserving spatial discretizations under two different meshes, which result two finite-dimensional Hamiltonian ODE (ordinary differential equation) systems. Then we combine the prediction-correction Crank-Nicolson scheme with the projection approach to arrive at fully discrete energy-preserving methods. Alternatively, we introduce a supplementary variable to transform the initial model into a relaxation system, which allows us to develop structure-preserving algorithms more easily. We then discretize the relaxation system directly by using the cosine pseudo-spectral method in space and prediction-correction Crank-Nicolson scheme in time to derive a new class of energy-preserving schemes. The proposed methods can be solved efficiently by the discrete cosine transform. Some benchmark examples and numerical comparisons are presented to demonstrate the accuracy, efficiency and superiority of the proposed schemes.

Keywords cosine pseudo-spectral method, energy-preserving algorithm, projection approach, supplementary variable method, sine-Gordon equation

MSC(2020) 65M06, 65M70

doi: 10.1360/SCM-2020-0695