

分类号: O241.82

单位代码: 10636

密 级: 公开

学 号: 20210801068

四川师范大学

硕士学位论文



中文论文题目: 非线性分数阶薛定谔波动方程的
两类保结构数值方法

英文论文题目: Two Classes of Structure-Preserving Numerical
Methods for the Nonlinear Fractional
Schrödinger Wave Equations

论文作者: 刘洋

指导教师: 冉茂华

专业名称: 数学

研究方向: 偏微分方程数值解

所在学院: 数学科学学院

论文提交日期: 2024 年 5 月 30 日

论文答辩日期: 2024 年 5 月 21 日

非线性分数阶薛定谔波动方程的两类保结构数值方法

专业: 数学

研究生: 刘洋 指导教师: 冉茂华 教授

摘要 非线性分数阶薛定谔波动方程 (NFSWEs) 在非线性光学、水波动力学等物理领域有着广泛应用, 并具有重要的守恒特性. 然而, 针对该方程数值方法的研究还主要集中于二维问题且有不超二阶的时间精度. 更重要的是, 现有方法只能保连续系统的修正能量. 鉴于此, 本文为二维非线性分数阶薛定谔波动方程分别构建了一类具有高阶时间精度的显式能量守恒方法和一类能够同时保持原始能量和质量的数值方法.

首先, 针对具有周期性边界条件的二维非线性分数阶薛定谔波动方程, 考虑到显式松弛 Runge-Kutta 方法仅适用于二次形式能量的限制, 本文借助于标量辅助变量方法将其转化为一个等价系统, 使其四次形式的能量被表述为三个二次项和的形式. 随后在时空方向上分别采用显式松弛 Runge-Kutta 方法和傅里叶拟谱方法对获得的等价系统进行离散, 构造了一类在时间方向上具有和所采用的 Runge-Kutta 方法精度相同的高阶显式能量守恒方法. 该方法能够直接应用到分数阶 Klein-Gordon-Schrödinger 方程等类似方程. 数值实验验证了该方法的长时间数值稳定性.

为了构造能够同时保持系统多个原始不变量的数值方法, 本文还基于分数阶拉普拉斯泛函变分原理推导出二维非线性分数阶薛定谔波动方程的哈密顿结构. 随后, 联合分区平均向量场方法和傅里叶拟谱方法构造了一个新的守恒数值方法. 与其他格式的比较结果表明, 本文提出的方法能更好地保持系统的多个原始不变量.

关键词: 薛定谔波动方程; 哈密顿系统; 标量辅助变量方法; 松弛龙格库塔方法; 分区平均向量场方法; 傅里叶拟谱方法

Two Classes of Structure-Preserving Numerical Methods for the Nonlinear Fractional Schrödinger Wave Equations

Major: Mathematics

Master: Liu Yang

Supervisor: Professor Ran Maohua

Abstract Nonlinear fractional Schrödinger wave equations (NFSWEs) is widely used in nonlinear optics, water wave dynamics and other physics fields, and it has important conservation properties. However, the study of numerical methods for this equation mainly focuses on one-dimensional problems and has no more than second-order time accuracy. More importantly, existing methods can only preserve certain modified energy of the continuous system. In view of this, this thesis constructs a class of high-order explicit energy conservation methods and numerical methods that can preserve both the original energy and mass for two-dimensional nonlinear fractional Schrödinger wave equations.

Firstly, considering that the explicit relaxation Runge-Kutta method is only applicable to the quadratic form energy, this thesis transforms the two-dimensional nonlinear fractional Schrödinger wave equations with periodic boundary conditions into an equivalent system by means of the scalar auxiliary variable approach, so that the energy of the continuous system is expressed in the form of the sum of three quadratic terms. Then, the resulting equivalent system is discretized by the explicit relaxation Runge-Kutta method and the Fourier pseudo-spectral method respectively. As a result, a class of explicit energy conservation methods with the same accuracy as the used Runge-Kutta method in time is developed. This idea can be directly generalized to similar equations, such as the fractional Klein-Gordon-Schrödinger equations. Finally, the long-term numerical stability of the proposed method is verified by numerical experiments.

Furthermore, to construct numerical methods that can simultaneously preserve multiple original invariants of the continuous system, this thesis also derives the Hamiltonian structure of the two-dimensional nonlinear fractional Schrödinger wave equations based on the fractional Laplacian functional variational principle. By combining the partitioned averaged vector field methods with the Fourier pseudo-spectral method, a novel conservation numerical method is developed. Finally, numerical results compared with other methods show that the proposed

method can better preserve multiple original invariants of the continuous system.

Keywords: Schrödinger wave equations; Hamiltonian system; Scalar auxiliary variable method; Relaxation Runge-Kutta methods; Partitioned averaged vector field methods; Fourier pseudo-spectral method

插图和附表清单

表 1.1	NFSWEs 已有保结构方法对比.....	2
表 3.1	当 $N = 32, T = 1$ 时, 算例 3.1 在时间方向的误差 (Error) 和收敛阶 (order)...	24
图 3.1	算例 3.1 的一些松弛格式所对应的 $\max_m \gamma_m - 1 $ 和 $\max_m S_m(1) $	24
图 3.2	当 $N = 32, \tau = 0.01$ 时, 算例 3.1 取不同 α 对应的相对能量误差.....	25
图 3.3	算例 3.2 的一些松弛格式所对应的 $\max_m \gamma_m - 1 $ 和 $\max_m S_m(1) $	25
表 3.2	当 $N = 4, T = 1$ 时, 算例 3.2 在时间方向的误差 (Error) 和收敛阶 (order)...	26
图 3.4	当 $N = 4, \tau = 0.01$ 时, 算例 3.2 取不同 α 对应的相对能量误差.....	26
表 3.3	当 $N = 4, T = 1$ 时, 算例 3.3 在时间方向的误差 (Error) 和收敛阶 (order)...	27
图 3.5	当 $N = 4, \tau = 0.01$ 时, 算例 3.3 取不同 α 对应的相对能量误差.....	28
表 3.4	当 $N = 4, T = 1$ 时, 算例 3.4 在时间方向的误差 (Error) 和收敛阶 (order)...	29
图 3.6	当 $N = 4, \tau = 0.01$ 时, 算例 3.4 取不同 α 对应的相对能量误差.....	29
图 4.1	当 $\alpha = 1.5$ 时, 算例 4.1 中四种格式的收敛阶.....	41
图 4.2	当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.1 中四种格式的收敛阶.....	41
图 4.3	当 $N = 512, \tau = 0.01$, 算例 4.1 取不同 α 时的离散能量.....	42
图 4.4	当 $N = 512, \tau = 0.01$, 算例 4.1 取不同 α 时的离散质量.....	43
表 4.1	当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.1 在时刻 $t = t_m$ 的离散能量 H^m	43
表 4.2	当 $\alpha = 1.3$ 时, 算例 4.1 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m	44
表 4.3	当 $\alpha = 1.6$ 时, 算例 4.1 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m	44
表 4.4	当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.1 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m	44
图 4.5	当 $N = 512, \tau = 0.01$ 时, 算例 4.1 取不同 α 时的相对质量误差.....	45
图 4.6	当 $N = 512, \tau = 0.01$, 算例 4.1 取不同 α 时的相对能量误差.....	45
图 4.7	当 $\alpha = 1.5$ 时, 算例 4.2 中四种格式的收敛阶.....	45
图 4.8	当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.2 中四种格式的收敛阶.....	46
图 4.9	当 $N = 64, \tau = 0.01$, 算例 4.2 取不同 α 时的离散质量.....	46

图 4.10	当 $N = 64, \tau = 0.01$, 算例 4.2 取不同 α 时的离散能量.	47
表 4.5	当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.2 在时刻 $t = t_m$ 的离散能量 H^m	48
表 4.6	当 $\alpha = 1.3$ 时, 算例 4.2 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m	48
表 4.7	当 $\alpha = 1.6$ 时, 算例 4.2 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m	48
表 4.8	当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.2 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m	49
图 4.11	当 $N = 64, \tau = 0.01$, 算例 4.2 取不同 α 时的相对质量误差.	49
图 4.12	当 $N = 64, \tau = 0.01$, 算例 4.2 取不同 α 时的相对能量误差.	49
图 4.13	当 $\alpha = 1.3$ 时, 算例 4.2 的波传播图.	50
图 4.14	当 $\alpha = 1.6$ 时, 算例 4.2 的波传播图.	50
图 4.15	当 $\alpha = 1.99$ 时, 算例 4.2 的波传播图.....	51
图 4.16	当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.2 的波传播图.	51

目录

摘要	I
ABSTRACT	III
插图和附表清单	V
1 绪论	1
1.1 研究意义	1
1.2 研究背景与发展现状	1
1.3 研究内容	3
1.4 论文安排	3
2 预备知识	5
2.1 分数阶微积分理论	5
2.2 傅里叶拟谱方法	6
2.3 分区平均向量场方法	8
3 NFSWEs 的高阶显式能量守恒方法	11
3.1 NFSWEs 的 SAV 等价系统	12
3.2 傅里叶拟谱半离散格式	13
3.3 显式 SAV-RRK 方法	16
3.4 显式 SAV-RRK 方法的精度	18
3.4.1 松弛因子的估计	18
3.4.2 显式 SAV-RRK 方法的截断误差	20
3.5 数值算例	22
3.6 小结	30
4 保 NFSWEs 原始能量和质量的守恒方法	31
4.1 NFSWEs 的哈密顿结构	31
4.2 傅里叶拟谱半离散格式	34

4.3 PAVF-P 方法	35
4.3.1 PAVF-P 格式	36
4.3.2 离散守恒律	37
4.4 其他 AVF 系列方法	39
4.5 数值算例	40
4.6 小结	51
5 总结与展望	53
5.1 本文总结	53
5.2 研究展望	53
参考文献	55
致谢	59
在校期间的科研成果	61

1 绪论

1.1 研究意义

分数阶微积分理论是研究任意阶微分和积分的数学分支,也是整数阶微积分理论的拓展.这一理论起源于 17 世纪末,经过三个世纪的不懈努力,包括 Riemann-Liouville、Grüwald-Letnikov、Caputo 和 Riesz 在内的多种分数阶微积分理论逐渐形成^[1].尽管分数阶微积分的物理和几何解释存在挑战,但近几十年来,多个学科领域的研究表明,与整数阶微分方程相比,分数阶微分方程的保记忆性能更有效地描述某些复杂问题.目前,分数阶微分方程已广泛应用于物理学、化学、生物学、水文学、混沌理论、复杂粘弹性材料、系统控制、信号处理、经济学等领域的诸多问题^[2-9].

非线性分数阶薛定谔波动方程 (NFSWEs) 是对经典整数阶薛定谔波动方程的推广.后者在 Klein-Gordon 方程的非相对论极限^[10, 11]、等离子体中的 Langmuir 波包络近似^[12]以及光子弹的 Sine-Gordon 方程的调制平面脉冲近似^[13, 14]等物理场景中具有广泛应用,并且已得到深入研究^[15-18].鉴于 NFSWEs 中的分数阶拉普拉斯算子的非局部性,使其能更好地描述许多经典薛定谔波动方程无法描述的新现象.然而,这也给 NFSWEs 的数值求解带来了挑战.此外,与其他许多基于物理场景的微分模型一样, NFSWEs 也具有某些守恒性质.因此,构造有类似离散结构的保结构数值方法尤为重要,甚至在某些领域,保留原始微分方程的某些不变性质的能力已成为评估数值模拟成功与否的标准^[19, 20].鉴于 NFSWEs 的双重重要性,本文旨在构造两类求解二维 NFSWEs 的高效保结构数值方法.

1.2 研究背景与发展现状

非线性薛定谔方程是非线性科学中极具普适性的基本方程,在众多物理学领域都有着广泛的应用.其重要性引起了学术界的普遍关注.基于有限差分法、有限元法^[21]、间断有限元法^[22]、谱方法^[23]的各类保结构数值方法被不断提出.就有限差分方法而言, Bao 等人^[16]建立了整数阶薛定谔波动方程在有限差分方法下误差限适用于一维、二维和三维情形的一致误差估计. Wang 和 Zhang^[24]针对一类薛定谔波动方程初边值问题,给出了一些新的守恒格式.利用 Leray-Schauder 不动点定理证明了有限差分格式解的存在性,并在能量范数下证明了 $\mathcal{O}(h^2 + \tau^2)$ 阶差分解的唯一性、稳定性和收敛性. Zhang 等人^[15]提出了一种四层显式的保结构有限差分格式,并证明了其收敛性和稳定性. Li 等人^[25]针对具有周期性边界条件的非线性整数阶薛定谔波动方程,构造了一个保结构的三层紧格

式,并基于能量法证明了该格式在最大模范数下 $\mathcal{O}(h^4 + \tau^2)$ 阶的无条件稳定性和收敛性. Wang 等人^[26] 采用正交样条配置法结合有限差分法给出了离散时间正交样条的配置格式,并从理论上分析了这些格式的守恒性、收敛性和稳定性. Guo 等人^[27] 在时空方向上分别应用局部不连续伽辽金方法、Crank-Nicolson 格式进行离散,建立了能量守恒的全离散格式. 随着分数阶微积分的发展,研究者开始重视分数阶模型的研究. 例如, Wang 和 Xiao^[28] 首先为非线性耦合分数阶薛定谔方程构造了一种质量守恒的 Crank-Nicolson 格式,然后,他们进一步提出了一种线性隐式格式,该格式保持修正后质量和能量^[29]. Ran 和 Zhang^[30] 提出了隐式及线性差分格式,分别保持非线性强耦合分数阶薛定谔方程原始和修正的质量和能量. Wang 和 Huang^[31, 32] 推导出分数阶薛定谔方程的能量和质量守恒的 Crank-Nicolson 差分格式和线性差分格式. Wang 等人^[33] 提出了一种用于二维非线性空间分数阶薛定谔方程的分步谱伽辽金方法,该方法仅保持离散质量. 针对 NFSWEs, Ran 和 Zhang^[34] 首先构造了一种三层线性隐式差分格式 (Line-Impl), 它能很好地保持修正后的质量和能量. Li 和 Zhao^[35] 结合 Crank-Nicolson 方法与伽辽金有限元方法以节省计算成本,设计了具有循环预调节器的快速 Krylov 子空间求解器. Pan 等人^[36] 构建了一个空间四阶精度的三层线性隐式差分格式,并通过能量方法严格证明了该方法在 L_∞ 范数下的唯一可解性、无条件稳定性和收敛性. Cheng 和 Qin^[37] 提出了一种基于标量辅助变量 (SAV) 方法的线性隐式守恒格式,该数值格式仅保持修正后的能量. Hu 等人^[38] 分别在时间上应用 Crank-Nicolson、SAV 和 ESAV 方法,提出了三种能量守恒的谱伽辽金方法. Zhang 和 Ran^[39] 提出并分析了基于三角 SAV(T-SAV) 方法的更高阶能量守恒差分格式.

如表 1.1 所示,尽管对于 NFSWEs 的数值算法已有不少研究工作,但大多数方法仅关注一维情况,且在时间方向的精度未超过二阶,甚至是完全隐式的. 此外,目前提出的方法仅能保持修正后的能量和 (或) 质量. 这意味着仍然存在许多值得优化的地方,尤其是在高维情况下,需要高效、准确、显式以及能够同时保持原始能量和质量数值方法.

表 1.1 NFSWEs 已有保结构方法对比

文献	维度	空间精度	时间精度	能量守恒	质量守恒
2016, Ran ^[34]	1 维	2 阶	2 阶	修正能量	修正质量
2018, Li ^[35]	1 维	2 阶	2 阶	修正能量	修正质量
2022, Pan ^[36]	1 维	4 阶	2 阶	无	无
2022, Cheng ^[37]	2 维	2 阶	2 阶	修正能量	无
2022, Hu ^[38]	1 维	谱精度	2 阶	修正能量	无
2023, Zhang ^[39]	1 维	4 阶	2 阶	修正能量	无

1.3 研究内容

鉴于前期研究的不足,一方面,注意到在诸多高精度数值方法中,显式 Runge-Kutta (RK) 方法因其高阶精度和易于实现的特性而备受青睐.然而,标准 RK 方法不一定能够满足系统所期望保留的某些物理特性.为了解决这一问题, Ketcheson^[40] 提出了松弛 Runge-Kutta (RRK) 方法,该方法能够保证系统在任何内积范数下的守恒或稳定性.随后, RRK 技术被扩展到一般的凸量上^[41].通过在 RK 更新的每一步中引入一个松弛参数,可以强制实现对于任何凸泛函的守恒、耗散或其他属性.不过,这些优势的代价是必须求解一个非线性代数系统来确定松弛参数.然而,对于非二次不变量的情况,作者并未考虑构建显式的 RRK 格式.幸运的是,不变能量二次化 (IEQ) 方法^[42,43] 和 SAV 方法^[37] 可以通过变量替换将非二次能量转化为新变量的二次形式,而由此产生的等价系统仍然保留了关于新变量的类似能量守恒性质. IEQ 方法和 SAV 方法已被广泛应用于梯度流模型^[44-47].例如,具有熔体对流的树状凝固相场模型^[48],具有一般非线性势的梯度流方程^[49],外延薄膜生长模型^[50] 以及基于 SAV 的任意高阶无条件能量稳定格式^[51].受到这些发展的启发,本文结合 SAV 方法和显式 RRK 方法,为一维和二维 NFSWEs 构造了一种任意高阶的显式能量守恒方法.

另一方面,目前提出的算法仅能保证修正后的能量和(或)质量守恒.值得注意的是,平均向量场 (AVF) 方法^[52,53] 能够保持哈密顿系统的原始能量.最近提出的分区平均向量场 (PAVF) 方法^[54] 不仅可以保持原始能量,还有可能保持更多的守恒性质,并已被用于构造哈密顿常微分方程的保结构数值格式.然而, NFSWEs 的哈密顿形式的推导是构造 PAVF 格式的前提.据了解,目前对于分数阶微分方程哈密顿结构的研究还很有限.最近, Wang 和 Huang^[55] 提出了涉及分数阶拉普拉斯泛函的变分导数,将一维非线性分数阶薛定谔方程重构为一个哈密顿系统. Fu 和 Cai^[56] 推导了二维分数阶 Klein-Gordon-Schrödinger 方程的哈密顿形式,并给出了守恒格式.基于这些思路,本文推导了具有周期性边界条件的二维 NFSWEs 的哈密顿形式,并通过改进的分区平均向量场 (PAVF-P) 方法成功构建了能够同时保持原始能量和质量的数值格式.

1.4 论文安排

本文结构安排如下:

第 2 章简要介绍了分数阶微积分、傅里叶拟谱方法以及分区平均向量场方法.

第 3 章主要分为 6 节.在第 3.1 节中,通过引入一个标量辅助变量,将 NFSWEs 重构为一个等价系统.第 3.2 节和第 3.3 节分别在空间和时间方向上对等价系统应用傅里叶拟谱方法以及显式 RRK 方法,为二维 NFSWEs 构造了一个高阶显式的能量守恒格式.在第 3.4 节中,进一步估计引入的松弛系数,以确定松弛方法的精度.第 3.5 节通过数值算例验证了所提出格式的精度、守恒特性及其普适性.并在第 3.6 节中对本章内容进行了

简要总结.

第 4 章主要分 6 节. 首先在第 4.1 节中推导了 NFSWEs 的哈密顿结构, 接着在 4.2 节中通过使用傅里叶拟谱方法对空间方向进行半离散. 在第 4.3 节中, 通过使用 PAVF-P 方法对前述空间半离散系统进行离散化, 得到能够同时保持原始能量和质量的数值格式, 并证明了相应的离散守恒定律. 为了比较, 在第 4.4 节中给出了用于求解 NFSWEs 的其他二阶 AVF 系列格式. 并在第 4.5 节中, 通过丰富的数值算例进一步验证了理论结果. 最后在第 4.6 节做了简要总结.

第 5 章为总结与展望.

2 预备知识

在引入本文主要内容之前,本章首先介绍了分数阶微积分、傅里叶拟谱方法以及分区平均向量场方法.

2.1 分数阶微积分理论

分数阶微积分理论是数学的重要分支,它是传统的整数阶微积分理论的推广.最早提出这一思想的是德国数学家 G. W. Leibniz. 他在 1695 年给 L'Hôpital 的信件中讨论了 $1/2$ 阶导数. 在之后的 300 多年发展中,许多数学家为分数阶微积分理论作出了杰出的贡献^[57]. 研究者们发现,分数阶微分算子与整数阶微分算子不同,具有非局部性,非常适合描述现实世界中具有记忆以及遗传性质的变化过程. 它已成为描述各类复杂力学与物理行为的重要工具之一. 然而,分数阶微分方程的解析解通常包含一些特殊函数,如 Mittag-Leffler 函数、Fox 函数和 Wright 函数等,这些函数由无穷级数定义,其解析解很难显式给出. 因此,对分数阶微分方程寻找有效的数值模拟方法就显得尤为重要. 然而,到目前为止,关于分数阶微分方程的数值计算仍存在大量挑战性难题,例如长时间历程的计算和大空间区域的计算等. 特别地,在对空间分数阶方程进行数值求解时,如何有效逼近分数阶拉普拉斯算子是最为关键的一步. 在过去的几十年里,众多数学家针对这一问题进行了深入的研究,其中,最为有效的途径是利用分数阶拉普拉斯算子与 Riesz 导数在齐次 Dirichlet 边界条件下的等价性关系^[58, 59], 即

$$-(-\Delta)^{\alpha/2}u(x) := -\frac{1}{2\cos\frac{\alpha\pi}{2}}(-\infty D_x^\alpha u(x) + {}_x D_{+\infty}^\alpha u(x)), \quad (2.1)$$

其中 $-\infty D_x^\alpha u(x)$ 为左 Riemann-Liouville 分数阶导数

$$-\infty D_x^\alpha u(x) = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \frac{d^2}{dx^2} \int_{-\infty}^x \frac{u(\xi)}{(x-\xi)^{\alpha-1}} d\xi, \quad (2.2)$$

${}_x D_{+\infty}^\alpha u(x)$ 为右 Riemann-Liouville 分数阶导数

$${}_x D_{+\infty}^\alpha u(x) = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \frac{d^2}{dx^2} \int_x^{-\infty} \frac{u(\xi)}{(\xi-x)^{\alpha-1}} d\xi. \quad (2.3)$$

注意到, Riesz 分数阶导数可以看作左右 Riemann-Liouville 分数阶导数的线性组合. 基于上述等价关系,对于分数阶拉普拉斯算子及 Riemann-Liouville 分数阶导数的数值逼近已存在很多数值方法,如有限元方法^[60, 61], 间断伽辽金方法^[62], 谱方法^[63, 64], 有限差分方法^[65, 66]等. 其中,分数阶中心差分方法是对 Riesz 导数的一个直接离散方法,该方法由

Du 等人^[67]首次提出, 随后, 基于带权平均思想, 更高阶 Riesz 导数逼近被提出^[68, 69]. 此外, 分数阶拉普拉斯算子有下列奇异积分形式的等价性^[67]

$$(-\Delta)^{\alpha/2}u(x) = C_{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{u(x) - u(y)}{|x - y|^{1+\alpha}} dy, \quad (2.4)$$

其中常数 $C_{\alpha} = \frac{\alpha 2^{\alpha-1} \Gamma(\frac{\alpha+1}{2})}{\pi^{1/2} \Gamma(\frac{-\alpha}{2})}$.

基于上述等价性, 学者们也给出了很多数值方法^[70, 71]. 在周期性边界下, 分数阶拉普拉斯算子定义为^[72]

$$(-\Delta)^{\alpha/2}u(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} |\mu k|^{\alpha} \hat{u}_k e^{i\mu k x}, \quad (2.5)$$

其中, $x \in \mathbb{T}$, $\hat{u}_k$ 表示傅里叶系数, 即

$$u = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{u}_k e^{i\mu k x}, \quad \hat{u}_k = \frac{1}{L} \int_{\mathbb{T}} u(x) e^{-i\mu k x} dx, \quad (2.6)$$

这里, $\mu = 2\pi/L$, $\mathbb{T} = \mathbb{R}/L\mathbb{Z}$ 表示长度为 L 的一维环面.

2.2 傅里叶拟谱方法

在数值计算中, 用正交函数系逼近函数是常用方法. 对于周期情形, 傅里叶展开是主要形式, 其表达式为

$$u(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{u}_n e^{-ikx}, \quad x \in (0, 2\pi), \quad (2.7)$$

其中

$$\hat{u}_k = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} u(x) e^{-ikx} dx. \quad (2.8)$$

当函数充分光滑时, 展开系数以 $k^{-\alpha}$ 的速度趋于零, α 是光滑性指标. 函数无穷光滑时, α 可取任意正实数, 称为“谱精度”. 函数 $u(x)$ 的正交函数系展开构成了物理空间和变换空间之间的有限线性变换. 如果系统在某 Hilbert 空间上完备, 则变换可逆. 因此, 函数可由其物理空间的值或变换空间的系数表征. 实际计算中, 基于傅里叶级数的方法通常无法直接实现, 因为傅里叶系数未知. 为克服此困难, 采用离散傅里叶级数和离散傅里叶变换, 利用物理空间的信息近似计算变换空间的量.

设 $u(x)$ 是以 2π 为周期的光滑复值函数, 对于序列

$$x_j = \frac{j\pi}{N}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, 2N-1. \quad (2.9)$$

有插值多项式

$$I_N u(x) = \sum_{j=0}^{2N-1} u(x_j) g_j(x), \quad (2.10)$$

其中 $g_j(x)$ 是次数 $\leq N$ 且满足 $g_j(x_i) = \delta_{ij}$ 的三角多项式, **Kronnecker** 记号

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}. \quad (2.11)$$

通过计算可知

$$g_j(x) = \frac{1}{2N} \sin N(x - x_j) \cot \frac{x - x_j}{2}. \quad (2.12)$$

利用正交性

$$\frac{1}{2N} \sum_{k=-N}^{N-1} e^{ikx_j} = \begin{cases} 1, & j = 0 \\ 0, & j \neq 0 \end{cases}. \quad (2.13)$$

故也有

$$g_j(x) = \frac{1}{2N} \sum_{k=-N}^{N-1} e^{ik(x-x_j)}. \quad (2.14)$$

显然 $I_N u(x)$ 有两种表示方式

$$I_N u(x) = \frac{1}{2N} \sum_{j=0}^{2N-1} u(x_j) \sin N(x - x_j) \cot \frac{x - x_j}{2}, \quad (2.15)$$

和

$$\begin{aligned} I_N u(x) &= \sum_{j=0}^{2N-1} u(x_j) \frac{1}{2N} \sum_{k=-N}^{N-1} e^{ik(x-x_j)} \\ &= \sum_{k=-N}^{N-1} e^{ikx} \frac{1}{2N} \sum_{j=0}^{2N-1} u(x_j) e^{-ikx_j}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

如果定义离散傅里叶系数

$$\tilde{u}_k = \frac{1}{2N} \sum_{j=0}^{2N-1} u(x_j) e^{-ikx_j}, \quad (2.17)$$

则

$$I_N u(x) = \sum_{k=-N}^{N-1} \tilde{u}_k e^{ikx}. \quad (2.18)$$

由于 $I_N u(x)$ 满足 $I_N u(x_j) = u(x_j), j = 0, 1, 2, \dots, 2N-1$, 故建立了 $2N$ 个复数 $u(x_j), j = 0, 1, 2, \dots, 2N-1$ 到 $2N$ 个 $\tilde{u}_k, k = -N, -N+1, \dots, N-1$ 之间的一个映射, 称此变换为离散傅里叶变换, 它是一个正交变换, 且它及其逆均可利用快速傅里叶变换来实现, 计算量为 $O(N \log_2 N)$, 非常经济.

下面讨论插值多项式的微商. 根据式 (2.10), 插值多项式可写为

$$I_N u(x) = \sum_{s=0}^{2N-1} u(x_s) g_s(x). \quad (2.19)$$

那么

$$\frac{d^l}{dx^l} I_N u(x_j) = \sum_{s=0}^{2N-1} u(x_s) \frac{d^l}{dx^l} g_s(x_j). \quad (2.20)$$

记矩阵 D_l 的分量为

$$(D_l)_{j,s} = \frac{d^l}{dx^l} g_s(x_j). \quad (2.21)$$

则

$$\frac{d^l}{dx^l} I_N u(x_j) = \sum_{s=0}^{2N-1} u(x_s) \frac{d^l}{dx^l} g_s(x_j) = (D_l \mathbf{u})_j, \quad (2.22)$$

其中 $\mathbf{u} = (u(x_0), \dots, u(x_{2N-1}))^T$, $D_l = (D_1)^{(l)}$, 而

$$(D_1)_{j,s} = \begin{cases} \frac{(-1)^{j+s}}{2} \cot \frac{x_j - x_s}{2}, & s \neq j \\ 0, & s = j \end{cases}. \quad (2.23)$$

$$(D_2)_{j,s} = \begin{cases} \frac{(-1)^{j+s+1}}{2} \frac{1}{\sin^2 \frac{x_j - x_s}{2}}, & s \neq j \\ \frac{2N^2+1}{6}, & s = j \end{cases}. \quad (2.24)$$

另一方面

$$\frac{d^l}{dx^l} I_N u(x_j) = \sum_{k=-N}^{N-1} (ik)^l \hat{u}_k e^{ikx_j}. \quad (2.25)$$

上式的意义在于, 函数的求导运算在傅里叶变换的作用下, 可转化为相对简单的代数运算. 正是基于此原理, 傅里叶拟谱方法利用离散傅里叶变换将偏微分方程中空域或时域上的求导运算简化为频域上的代数运算, 求解后再通过离散傅里叶逆变换得到空域或时域上的结果. 在代码层面上, Matlab 提供的快速傅里叶变换函数 `fft`、逆变换函数 `ifft` 以及强大的矩阵运算能力也为简洁、优雅地实现傅里叶拟谱方法奠定了基础.

2.3 分区平均向量场方法

考虑以下哈密顿系统

$$\frac{dw}{dt} = f(w) = S_k \nabla H(w), \quad w(0) = w_0, \quad (2.26)$$

其中 $w \in \mathbb{R}^k$, S_k 是一个 $k \times k$ 的反对称矩阵, k 是偶数, 哈密顿量 $H(w)$ 充分光滑. 系统 (2.26) 的二阶 AVF 格式定义为

$$\begin{aligned} \frac{w^{m+1} - w^m}{\tau} &= \int_0^1 f(\varepsilon w^{m+1} + (1-\varepsilon)w^m) d\varepsilon \\ &= S_k \int_0^1 \nabla H(\varepsilon w^{m+1} + (1-\varepsilon)w^m) d\varepsilon, \end{aligned} \quad (2.27)$$

其中 τ 是时间步长. 不妨令 $k = 2d$, $w = (w_1, w_2, \dots, w_d; w_{d+1}, w_{d+2}, \dots, w_{2d})^T = (y, z)^T$, 则原始问题 (2.26) 可描述为如下等价系统

$$\begin{pmatrix} \dot{y} \\ \dot{z} \end{pmatrix} = S_{2d} \begin{pmatrix} H_y(y, z) \\ H_z(y, z) \end{pmatrix}, y, z \in \mathbb{R}^d, \quad (2.28)$$

其中 S_{2d} 是一个辛矩阵.

AVF 方法得到的数值格式只能保持原始哈密顿量, 而在某些系统下, PAVF 系列方法能够保持额外的原始不变量. 系统 (2.26) 的 PAVF 格式定义为

$$\frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} y^{m+1} - y^m \\ z^{m+1} - z^m \end{pmatrix} = S_{2d} \begin{pmatrix} \int_0^1 H_y(\varepsilon y^{m+1} + (1-\varepsilon)y^m, z^m) d\varepsilon \\ \int_0^1 H_z(y^{m+1}, \varepsilon z^{m+1} + (1-\varepsilon)z^m) d\varepsilon \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

注意到 PAVF 方法 (2.29) 仅具有一阶精度^[54]. 为了提高精度, 设上述 PAVF 方法 (2.29) 为 Φ_τ , 其伴随方法 Φ_τ^* 定义如下

$$\frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} y^{m+1} - y^m \\ z^{m+1} - z^m \end{pmatrix} = S_{2d} \begin{pmatrix} \int_0^1 H_y(\varepsilon y^{m+1} + (1-\varepsilon)y^m, z^{m+1}) d\varepsilon \\ \int_0^1 H_z(y^m, \varepsilon z^{m+1} + (1-\varepsilon)z^m) d\varepsilon \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

将 PAVF 方法与其伴随方法相结合, 得到 PAVF 组合 (PAVF-C) 方法

$$\Upsilon_\tau := \Phi_{\frac{\tau}{2}}^* \circ \Phi_{\frac{\tau}{2}}, \quad (2.31)$$

和 PAVF-P 方法

$$\hat{\Upsilon}_\tau := \frac{1}{2} \left(\Phi_{\frac{\tau}{2}}^* + \Phi_{\frac{\tau}{2}} \right). \quad (2.32)$$

可以验证, PAVF-C 方法以及 PAVF-P 方法均能在保持原始哈密顿量的同时, 额外保持某些系统的其他不变量, 并且具有二阶精度^[54].

3 NFSWEs 的高阶显式能量守恒方法

本章主要考虑具有周期性边界的非线性分数阶薛定谔波动方程 (NFSWEs) 的初边值问题:

$$u_{tt} + (-\Delta)^{\alpha/2} u + i\kappa u_t + \beta |u|^2 u = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, T], \quad (3.1)$$

$$u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}), \quad u_t(\mathbf{x}, 0) = u_1(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (3.2)$$

$$u(\mathbf{x} + \mathbf{L}, t) = u(\mathbf{x}, t), \quad t \in [0, T], \quad (3.3)$$

其中, $i = \sqrt{-1}$, $1 < \alpha \leq 2$, $\kappa, \beta (> 0)$ 为实常数, $u(\mathbf{x}, t)$ 是未知的复值函数, $u_0(\mathbf{x})$ 和 $u_1(\mathbf{x})$ 为已知的光滑函数, $\mathbf{x} \in \Omega \subset R^d$ ($d=1, 2$), $\mathbf{L}$ 是周期. 分数阶拉普拉斯算子可以通过傅里叶变换表示为

$$(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} u(\mathbf{x}, t) = \mathcal{F}^{-1} [|\xi|^\alpha \mathcal{F}(u(\xi, t))], \quad (3.4)$$

其中, $\mathcal{F}$ 和 $\mathcal{F}^{-1}$ 分别表示傅里叶变换及其逆变换^[74].

设 $L^p(\Omega)$ 为定义在 Ω 上的可测复函数空间. 定义内积和范数如下

$$(u, v) = \int_{\Omega} u \bar{v} \, d\mathbf{x}, \quad \|u\|_{L^p} = \left(\int_{\Omega} |u|^p \, d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{p}}, \quad 1 \leq p < \infty, \quad (3.5)$$

其中 $\bar{v}$ 表示 v 的复共轭.

定理 3.1. 具有周期性边界条件的 NFSWEs (3.1)-(3.3) 满足如下两条守恒定律:
质量守恒

$$G(t) = \kappa \|u(\cdot, t)\|^2 + 2 \operatorname{Im}(u_t, u) \equiv G(0), \quad t \in (0, T], \quad (3.6)$$

能量守恒

$$E(t) = \|u_t(\cdot, t)\|^2 + \|(-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} u(\cdot, t)\|^2 + \frac{\beta}{2} \|u(\cdot, t)\|_{L^4}^4 \equiv E(0), \quad t \in (0, T]. \quad (3.7)$$

证明. 将方程 (3.1) 与 u 做内积, 并取虚部, 有

$$\operatorname{Im}(u_{tt}, u) + \operatorname{Im}((- \Delta)^{\alpha/2} u, u) + \operatorname{Im}(i\kappa u_t, u) + \operatorname{Im}(\beta |u|^2 u, u) = 0. \quad (3.8)$$

不难验证

$$\operatorname{Im}(u_{tt}, u) = \frac{d}{dt} \operatorname{Im}(u_t, u), \quad \operatorname{Im}(iu_t, u) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u(\cdot, t)\|_{L^2}^2. \quad (3.9)$$

将方程 (3.9) 代入方程 (3.8) 得到

$$\kappa \frac{d}{dt} \|u(\cdot, t)\|_{L^2}^2 + 2 \frac{d}{dt} \operatorname{Im}(u_t, u) = 0, \quad (3.10)$$

此处使用了 $\operatorname{Im}((-\Delta)^{\alpha/2} u, u) = 0$, 详见文献 [75] 中引理 3.1 的证明.

类似地, 将方程 (3.1) 与 u_t 做内积, 并取实部, 得到

$$\operatorname{Re}(u_{tt}, u_t) + \operatorname{Re}((-\Delta)^{\alpha/2} u, u_t) + \operatorname{Re}(i\kappa u_t, u_t) + \operatorname{Re}(\beta |u|^2 u, u_t) = 0. \quad (3.11)$$

其中 $\operatorname{Im}(\cdot)$ 和 $\operatorname{Re}(\cdot)$ 分别表示复数的虚部和实部. 容易验证

$$\operatorname{Re}(u_{tt}, u_t) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_t(\cdot, t)\|_{L^2}^2, \operatorname{Re}(|u|^2 u, u_t) = \frac{1}{4} \frac{d}{dt} \|u(\cdot, t)\|_{L^4}^4. \quad (3.12)$$

此外, 有

$$\operatorname{Re}((-\Delta)^{\alpha/2} u, u_t) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|(-\Delta)^{\alpha/4} u(\cdot, t)\|_{L^2}^2, \quad (3.13)$$

参见文献 [75] 中引理 3.2 的证明. 将方程 (3.12) 和 (3.13) 代入方程 (3.11) 得到

$$\frac{d}{dt} \|u_t(\cdot, t)\|_{L^2}^2 + \frac{d}{dt} \|(-\Delta)^{\alpha/4} u(\cdot, t)\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \beta \frac{d}{dt} \|u(\cdot, t)\|_{L^4}^4 = 0. \quad (3.14)$$

其与方程 (3.10) 分别意味着质量守恒 (3.6) 和能量守恒 (3.7).

□

3.1 NFSWEs 的 SAV 等价系统

众所周知, 所有的 RK 方法都可以保持任意线性不变量, 但只有辛 RK 方法能够保持任意二次不变量, 且不存在标准 RK 方法可以保持高于二次的不变量或非多项式不变量. 为了克服这一限制并利用松弛 RK 方法保持二次不变量的特性, 本节采用最近提出的 SAV 方法将 NFSWEs (3.1)-(3.3) 以二次能量泛函的等价形式重新表述.

为了保证能量的正性, 在 $\frac{\beta}{2} \|u(\cdot, t)\|_{L^4}^4$ 中添加一个正常数 C_0 来修改式 (3.7) 中的能量. 鉴于 C_0 已知, 这种修改对于 (3.7) 中系统的能量不变性没有实质性影响. 因此, 此处继续使用 $E(t)$ 表示修改后的能量, 即

$$E(t) := \|u_t(\cdot, t)\|^2 + \|(-\Delta)^{\alpha/4} u(\cdot, t)\|^2 + \frac{\beta}{2} \|u(\cdot, t)\|_{L^4}^4 + C_0. \quad (3.15)$$

在此基础上, 引入一个标量辅助变量

$$w(t) := \sqrt{H(t) + C_0}, \quad (3.16)$$

这里 $H(t) := \frac{\beta}{2} \|u(\cdot, t)\|_{L^4}^4$. 直接计算得到

$$\begin{aligned}
 w_t &= \frac{1}{2\sqrt{H(t) + C_0}} \frac{dH(t)}{dt} \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{H(t) + C_0}} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \frac{\beta}{2} |u|^4 d\mathbf{x} \\
 &= \frac{\beta}{\sqrt{H(t) + C_0}} \int_{\Omega} |u|^2 \operatorname{Re}(u \bar{u}_t) d\mathbf{x} \\
 &= \operatorname{Re} \int_{\Omega} \frac{\beta |u|^2 u \bar{u}_t}{\sqrt{H(t) + C_0}} d\mathbf{x} \\
 &= \operatorname{Re}(b(u), u_t),
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

其中

$$b(u) := \beta |u|^2 u / \sqrt{H(t) + C_0}. \tag{3.18}$$

因此, NFSWEs (3.1)-(3.3) 可以等价地重新表述为

$$u_t = v, \tag{3.19}$$

$$v_t = -(-\Delta)^{\alpha/2} u - i\kappa v - b(u)w, \tag{3.20}$$

$$w_t = \operatorname{Re}(b(u), u_t), \tag{3.21}$$

初值条件为

$$u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}), \quad v(\mathbf{x}, 0) = u_1(\mathbf{x}), \quad w(0) = \sqrt{\frac{\beta}{2} \|u_0\|_{L^4}^4 + C_0}. \tag{3.22}$$

将式 (3.19) 和式 (3.20) 分别与 v_t, u_t 做内积, 式 (3.21) 乘以 $w(t)$, 然后对它们进行求和并在 $[0, t]$ 上积分, 得到重构后的修正能量守恒定律

$$E(t) = \|v(\cdot, t)\|^2 + \|(-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} u(\cdot, t)\|^2 + w^2(t) \equiv E(0), \tag{3.23}$$

这与 NFSWEs (3.1)-(3.3) 的原始能量守恒定律 (3.7) 本质上是一致的.

3.2 傅里叶拟谱半离散格式

谱方法是非局部方法, 这与分数阶薛定谔方程中的分数阶拉普拉斯算子的非局部性质相契合. 傅里叶基函数是周期边界条件下的拉普拉斯算子的特征函数, 且快速傅里叶变换的使用使编程更加简便, 可以大大减少计算量, 提高计算效率. 因此, 采用傅里叶拟谱法对等价系统 (3.19)-(3.22) 进行空间离散化.

不失一般性, 设空间维度为 2 (即 $d = 2$). 对于正整数 M 和正偶数 N_x, N_y , 定义 $\tau = T/M$, $h_x = L/N_x$, $h_y = L/N_y$, $\Omega_h = \{(x_i, y_j) \mid 0 \leq i \leq N_x - 1; 0 \leq j \leq N_y - 1\}$,

$\Omega_\tau = \{t_m \mid 0 \leq m \leq M\}$, $\Omega_h^\tau = \Omega_h \times \Omega_\tau$, 其中 $x_i = ih_x$, $y_j = jh_y$, $t_m = m\tau$. 定义数值解在任意时间层 t_m 的向量形式为

$$U^m = \left(u_{0,0}^m, \dots, u_{N_x-1,0}^m, u_{0,1}^m, \dots, u_{N_x-1,1}^m, \dots, u_{0,N_y-1}^m, \dots, u_{N_x-1,N_y-1}^m \right)^T, \quad (3.24)$$

$$V^m = \left(v_{0,0}^m, \dots, v_{N_x-1,0}^m, v_{0,1}^m, \dots, v_{N_x-1,1}^m, \dots, v_{0,N_y-1}^m, \dots, v_{N_x-1,N_y-1}^m \right)^T, \quad (3.25)$$

$$W^m = w^m. \quad (3.26)$$

对于定义在 Ω_h 上的任意网格函数 u 和 v , 定义离散内积和范数如下

$$(u, v) = h_x h_y \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} u_{i,j} \bar{v}_{i,j}, \quad \|u\| = (u, u)^{\frac{1}{2}}, \quad \|u\|_\infty = \sup_{(x_i, y_j) \in \Omega_h} |u_{i,j}|. \quad (3.27)$$

设 (x_i, y_j) 为傅里叶配置点, $u_N(x, y)$ 为 $u(x, y)$ 的插值多项式函数, 其中

$$u_N(x, y) = \sum_{k_1=-N_x/2}^{N_x/2} \sum_{k_2=-N_y/2}^{N_y/2} \tilde{u}_{k_1, k_2} e^{i\mu(k_1(x+L)+k_2(y+L))}, \quad (3.28)$$

这里 $\mu = \pi/L$, 系数

$$\tilde{u}_{k_1, k_2} = \frac{1}{N_x c_{k_1}} \frac{1}{N_y c_{k_2}} \sum_{l_1=0}^{N_x-1} \sum_{l_2=0}^{N_y-1} u(x_{l_1}, y_{l_2}) e^{-i\mu(k_1(x_{l_1}+L)+k_2(y_{l_2}+L))}, \quad (3.29)$$

其中

$$c_{k_1} = \begin{cases} 1, & \text{if } |k_1| < \frac{N_x}{2} \\ 2, & \text{if } |k_1| = \frac{N_x}{2} \end{cases}, \quad c_{k_2} = \begin{cases} 1, & \text{if } |k_2| < \frac{N_y}{2} \\ 2, & \text{if } |k_2| = \frac{N_y}{2} \end{cases}. \quad (3.30)$$

因此

$$-(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} u_N(x, y) = - \sum_{k_1=-N_x/2}^{N_x/2} \sum_{k_2=-N_y/2}^{N_y/2} \left| (k_1\mu)^2 + (k_2\mu)^2 \right|^{\frac{\alpha}{2}} \tilde{u}_{k_1, k_2} e^{i\mu(k_1(x+L)+k_2(y+L))}. \quad (3.31)$$

将式 (3.29) 代入式 (3.31) 并在点 (x_i, y_j) 处考虑方程, 得到

$$\begin{aligned} & -(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} u_N(x_i, y_j) \\ &= \sum_{l_1=0}^{N_x-1} \sum_{l_2=0}^{N_y-1} u(x_{l_1}, y_{l_2}) \left(- \sum_{k_1=-N_x/2}^{N_x/2} \sum_{k_2=-N_y/2}^{N_y/2} \frac{1}{N_x c_{k_1}} \frac{1}{N_y c_{k_2}} \left| \mu^2 \cdot k^2 \right|^{\frac{\alpha}{2}} e^{i\mu(k_1(x_i-x_{l_1})+k_2(y_j-y_{l_2}))} \right) \\ &= (D^\alpha U)_{i+jN_x}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

其中 $\mu^2 \cdot \mathbf{k}^2 = \mu^2 (k_1^2 + k_2^2)$, D^α 是具有以下元素的谱微分对称矩阵

$$(D^\alpha)_{i+jN_x, l_1+l_2N_x} = - \sum_{k_1=-N_x/2}^{N_x/2} \sum_{k_2=-N_y/2}^{N_y/2} \frac{1}{N_x c_{k_1}} \frac{1}{N_y c_{k_2}} |\mu^2 \cdot \mathbf{k}^2|^{\frac{\alpha}{2}} e^{i\mu(k_1(x_i-x_{l_1})+k_2(y_j-y_{l_2}))}. \quad (3.33)$$

将傅里叶拟谱法应用于之前的等价系统 (3.19)-(3.21), 得到如下空间半离散系统

$$U_t = V, \quad (3.34)$$

$$V_t = D^\alpha U - i\kappa V - b(U) \cdot W, \quad (3.35)$$

$$W_t = \operatorname{Re}(b(U), U_t), \quad (3.36)$$

其初值条件为 U^0, V^0, W^0 , 这里的 “ $\cdot$ ” 表示向量之间的点乘.

对于空间半离散系统 (3.34)-(3.36), 有以下定理.

定理 3.2. 空间半离散系统 (3.34)-(3.36) 具有半离散二次能量守恒律

$$\frac{dE}{dt} = 0, \quad (3.37)$$

其中

$$E(U, V, W) := \|V\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} U\|^2 + (W)^2. \quad (3.38)$$

证明. 将式 (3.34) 和式 (3.35) 分别与 V_t 和 U_t 做内积, 同时将式 (3.36) 乘以 W , 得到以下方程

$$(V_t, U_t) = (V_t, V), \quad (3.39)$$

$$(V_t, U_t) = (D^\alpha U, U_t) - i\kappa (V, U_t) - W (b(U), U_t), \quad (3.40)$$

$$WW_t = W \operatorname{Re}(b(U), U_t). \quad (3.41)$$

将方程 (3.39)-(3.41) 相加, 得到

$$(V_t, V) + WW_t = (D^\alpha U, U_t) - i\kappa (V, U_t) - W (b(U), U_t) + W \operatorname{Re}(b(U), U_t). \quad (3.42)$$

取实部得

$$\operatorname{Re}(V_t, V) + \operatorname{Re}(WW_t) = \operatorname{Re}(D^\alpha U, U_t). \quad (3.43)$$

注意到

$$\operatorname{Re}(V_t, V) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|V\|^2, \quad \operatorname{Re}(WW_t) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (W)^2, \quad \operatorname{Re}(D^\alpha U, U_t) = -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|D^{\frac{\alpha}{2}} U\|^2, \quad (3.44)$$

将 (3.44) 代入 (3.43) 得到

$$\frac{d}{dt} (\|V\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} U\|^2 + (W)^2) = 0. \quad (3.45)$$

证毕. □

3.3 显式 SAV-RRK 方法

为简洁起见, 引入以下符号

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= (U, V, W)^T, \quad \mathbf{y}_0 = (U^0, V^0, W^0)^T, \\ \mathbf{f} &= (f^1, f^2, f^3)^T := (V, D^\alpha U - i\kappa V - b(U) \cdot W, \operatorname{Re}(b(U), U_t))^T. \end{aligned} \quad (3.46)$$

于是, 基于 SAV 方法的半离散系统 (3.34)-(3.36) 可以重写为

$$\begin{cases} \mathbf{y}_t = \mathbf{f}(\mathbf{y}), & t \in (0, T], \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0. \end{cases} \quad (3.47)$$

设 $\mathbf{y}^m$ 是 $\mathbf{y}(t_m)$ 的近似. 系统 (3.47) 的 s 级显式 RK 格式^[76] 为

$$\begin{cases} \mathbf{Y}_{mi} = \mathbf{y}^m + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{f}_{mj}, & i = 1, \dots, s, \\ \mathbf{y}^{m+1} = \mathbf{y}^m + \tau \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi}, \end{cases} \quad (3.48)$$

其中 $\mathbf{f}_{mj} = \mathbf{f}(\mathbf{Y}_{mj})$, $j = 1, \dots, s$. 定义矩阵 A 和向量 b 如下

$$\begin{aligned} A &= (a_{ij})_{s \times s}, \quad a_{ij} = 0 \quad \text{对于} \quad j \geq i, \\ b &= (b_1, \dots, b_s)^T. \end{aligned} \quad (3.49)$$

于是 s 级显式 SAV-RK 格式可以用 Butcher 表表示为

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}, \quad (3.50)$$

其中向量 $c = (c_1, c_2, \dots, c_s)$ 满足 $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$, $i = 1, \dots, s$.

然而, 众所周知, 只有特定的隐式 RK 方法才可能是辛的或代数上稳定的, 不存在辛的或代数稳定的显式 RK 方法. 这导致任何标准显式 SAV-RK 方法都无法保持原始问题 (3.47) 的能量守恒特性. 因此, 这里引入松弛 RK 技术. 具体而言, 考虑在区间 $[\hat{t}_m, \hat{t}_{m+1}]$, $m \geq 0$ 上的单步操作, 设 $\mathbf{y}_\gamma^m = (U_\gamma^m, V_\gamma^m, W_\gamma^m)^T$ 是 $\mathbf{y}(\hat{t}_m)$ 的数值逼近, 对于系统 (3.47), s 级显式 SAV-RRK 方法定义为

$$\begin{cases} \mathbf{Y}_{mi} = \mathbf{y}_\gamma^m + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{f}_{mj}, & i = 1, \dots, s, \\ \mathbf{y}_\gamma^{m+1} = \mathbf{y}_\gamma^m + \gamma_m \tau \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi}. \end{cases} \quad (3.51)$$

同样, s 级 RRK 方法 (3.51) 可以用 Butcher 表表示为

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & \tilde{b}^T \end{array}, \quad (3.52)$$

其中 $\tilde{b} = \gamma_m b$, $\gamma_m \neq 0$, 并且满足

$$\begin{cases} E_\gamma^{m+1} = E_\gamma^m, & \text{若 } \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi} \neq 0, \\ \gamma_m = 1, & \text{若 } \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi} = 0, \end{cases} \quad (3.53)$$

这里

$$E_\gamma^m = \|V_\gamma^m\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} U_\gamma^m\|^2 + (W_\gamma^m)^2. \quad (3.54)$$

显式 SAV-RRK 方法 (3.51) 的一个显著优势在于可以通过调整参数 γ_m 使其达到能量守恒的目的. 实际上, 从式 (3.53) 中可知, 当 $\sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi} = 0$ 时, 取 $\gamma_m = 1$. 而当 $\sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi} \neq 0$ 时,

$$\begin{aligned} E_\gamma^{m+1} = & \|V_\gamma^m\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} U_\gamma^m\|^2 + (W_\gamma^m)^2 \\ & + (V_\gamma^m, \gamma_m \tau \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2) + (\gamma_m \tau \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2, V_\gamma^m) \\ & - (U_\gamma^m, D^\alpha (\gamma_m \tau \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)) - (\gamma_m \tau \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1, D^\alpha U_\gamma^m) \\ & + 2W_\gamma^m \gamma_m \tau \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3 + (\gamma_m \tau \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3)^2. \end{aligned} \quad (3.55)$$

将其与 (3.53) 结合, 得到

$$\begin{aligned} & \gamma_m \tau [(V_\gamma^m, \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2) + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2, V_\gamma^m) - (U_\gamma^m, D^\alpha (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)) - (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1, D^\alpha U_\gamma^m) \\ & + 2W_\gamma^m \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3] + \gamma_m^2 \tau^2 [\|\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)\|^2 + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3)^2] = 0, \end{aligned}$$

这是关于 γ_m 的二次方程. 注意到 $\gamma_m \neq 0$, 因此可得

$$\gamma_m = \frac{(V_\gamma^m, \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2) + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2, V_\gamma^m) - (U_\gamma^m, D^\alpha (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)) - (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1, D^\alpha U_\gamma^m) + 2W_\gamma^m \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3}{-\tau [\|\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)\|^2 + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3)^2]}. \quad (3.56)$$

这意味着当 $\sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi} \neq 0$ 时, γ_m 的值也可以通过式 (3.56) 显式计算确定.

实际上, 在 (3.53) 中定义的 γ_m 的值在 $\tau \rightarrow 0$ 时接近于 1, 这将在 3.4.1 节中进一步讨论. 因此, 显式 SAV-RRK 方法 (3.51) 是良定的. 此外, 很容易证明该方法具有以下定理中描述的能量守恒律.

定理 3.3. 设显式 SAV-RK 方法 (3.48) 的阶数至少为 2, 则显式 SAV-RRK 方法 (3.51) 的解满足

$$E_{\gamma}^{m+1} = E_{\gamma}^m, \quad (3.57)$$

其中 E_{γ}^m 由式 (3.54) 定义.

证明. 当 $\sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi} = 0$ 时, 根据 (3.51) 中的第二个方程可知, $\mathbf{y}_{\gamma}^{m+1} \equiv \mathbf{y}_{\gamma}^m$, 它自动满足式 (3.57). 对于 $\sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi} \neq 0$ 的情况, 可从条件 (3.53) 中得到式 (3.57). □

3.4 显式 SAV-RRK 方法的精度

在本节中, 将讨论显式 SAV-RRK 方法 (3.51) 的精度. 为此, 首先估计松弛因子 γ_m , 它在接下来的分析中起着关键作用. 虽然松弛因子 γ_m 往往在不同时间层会发生变化, 但可通过类似的方式在不同步骤上进行估计. 因此, 这里只考虑做区间 $[\hat{t}_m, \hat{t}_{m+1}]$ 内的讨论.

3.4.1 松弛因子的估计

因为 $\sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi} = 0$ 的情况很简单, 本章将仅关注 $\sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi} \neq 0$ 的情况. 令

$$\begin{aligned} S_m(\gamma) = & \|V_{\gamma}^m + \gamma\tau \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi}^2\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}}(U_{\gamma}^m + \gamma\tau \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi}^1)\|^2 \\ & + (W_{\gamma}^m + \gamma\tau \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi}^3)^2 - \|V_{\gamma}^m\|^2 - \|D^{\frac{\alpha}{2}}U_{\gamma}^m\|^2 - (W_{\gamma}^m)^2, \end{aligned} \quad (3.58)$$

则 (3.53) 中定义的 γ_m 的值恰好是函数 $S_m(\gamma)$ 的非零根. 此外, 关于 $S_m(\gamma)$ 有以下结果.

引理 3.4. 设显式 SAV-RK 方法 (3.48) 的阶数为 p , 则有

$$S_m(1) = \mathcal{O}(\tau^{p+1}). \quad (3.59)$$

证明. 类似于 [77] 中引理 3.1 的证明, 考虑初值问题

$$\begin{cases} \tilde{\mathbf{y}}' = \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{y}}), & t \geq \hat{t}_m, \\ \tilde{\mathbf{y}}(\hat{t}_m) = \mathbf{y}_{\gamma}^m, \end{cases} \quad (3.60)$$

其中 $\mathbf{y}_{\gamma}^m$ 是显式 SAV-RRK 方法 (3.51) 的解.

通过使用显式 SAV-RRK 方法 (3.51) 进行单步计算, 得到数值解 $\mathbf{y}_{\gamma}^{m+1}$. 根据式 (3.58) 有

$$\begin{aligned} S_m(\gamma) = & \|V_{\gamma}^{m+1}\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}}U_{\gamma}^{m+1}\|^2 + (W_{\gamma}^{m+1})^2 - \|V_{\gamma}^m\|^2 - \|D^{\frac{\alpha}{2}}U_{\gamma}^m\|^2 - (W_{\gamma}^m)^2 \\ = & \|V_{\gamma}^{m+1}\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}}U_{\gamma}^{m+1}\|^2 + (W_{\gamma}^{m+1})^2 - \|\tilde{V}(\hat{t}_m)\|^2 - \|D^{\frac{\alpha}{2}}\tilde{U}(\hat{t}_m)\|^2 - (\tilde{W}(\hat{t}_m))^2. \end{aligned} \quad (3.61)$$

从 $\mathbf{y}_\gamma^m$ 开始, 对于充分小的 τ , 显式 SAV-RK 方法 (3.48) 生成具有 p 阶精度的数值解 $\tilde{\mathbf{y}}^{m+1}$, 即 $\tilde{\mathbf{y}}^{m+1} = \tilde{\mathbf{y}}(\hat{t}_m + \tau) + \mathcal{O}(\tau^{p+1})$. 值得注意的是, 当 $\gamma = 1$ 时, 由式 (3.51) 定义的显式 SAV-RRK 方法将简化为由式 (3.48) 描述的显式 SAV-RK 方法. 也就是说, $\mathbf{y}_\gamma^{m+1} = \tilde{\mathbf{y}}^{m+1}$. 因此, 可以得到

$$\begin{aligned} S_m(1) &= \|\tilde{V}^{m+1}\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}}\tilde{U}^{m+1}\|^2 + (\tilde{W}^{m+1})^2 - \|\tilde{V}(\hat{t}_m)\|^2 - \|D^{\frac{\alpha}{2}}\tilde{U}(\hat{t}_m)\|^2 - (\tilde{W}(\hat{t}_m))^2 \\ &= \|\tilde{V}^{m+1}\|^2 - \|\tilde{V}(\hat{t}_m + \tau)\|^2 + \|\tilde{V}(\hat{t}_m + \tau)\|^2 - \|\tilde{V}(\hat{t}_m)\|^2 \\ &\quad + \|D^{\frac{\alpha}{2}}\tilde{U}^{m+1}\|^2 - \|D^{\frac{\alpha}{2}}\tilde{U}(\hat{t}_m + \tau)\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}}\tilde{U}(\hat{t}_m + \tau)\|^2 - \|D^{\frac{\alpha}{2}}\tilde{U}(\hat{t}_m)\|^2 \\ &\quad + (\tilde{W}^{m+1})^2 - (\tilde{W}(\hat{t}_m + \tau))^2 + (\tilde{W}(\hat{t}_m + \tau))^2 - (\tilde{W}(\hat{t}_m))^2 \\ &= \mathcal{O}(\tau^{p+1}) + 2 \int_{\hat{t}_m}^{\hat{t}_m + \tau} [\operatorname{Re}(V_t, V) + \operatorname{Re}(WW_t) - \operatorname{Re}(D^\alpha U, U_t)] dt. \end{aligned} \quad (3.62)$$

将式 (3.43) 代入方程 (3.62) 即可完成证明. □

根据引理 3.4, 可以得到以下关于松弛因子 γ_m 的估计.

定理 3.5. 设显式 SAV-RK 方法 (3.48) 的阶数为 p ($p \geq 2$), 那么式 (3.53) 中定义的松弛因子 γ_m 满足

$$\gamma_m = 1 + \mathcal{O}(\tau^{p-1}). \quad (3.63)$$

证明. 根据 $\sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi}$ 的值分别考虑两种情况.

情况 1: 当 $\sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi} = 0$ 时, 根据式 (3.53) 中 γ_m 的定义, 有 $\gamma_m = 1$, 这显然满足式 (3.63).

情况 2: 当 $\sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi} \neq 0$ 时, 由式 (3.55) 可得

$$\begin{aligned} S_m(\gamma) &= E_\gamma^{m+1} - E_\gamma^m \\ &= \gamma \tau \left[(V_\gamma^m, \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2) + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2, V_\gamma^m) - (U_\gamma^m, D^\alpha (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)) - (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1, D^\alpha U_\gamma^m) \right. \\ &\quad \left. + 2W_\gamma^m \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3 \right] + \gamma^2 \tau^2 \left[\|\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)\|^2 + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.64)$$

注意到 $S_m(\gamma)$ 是 γ 的二次函数, 它有非零根

$$\gamma = \frac{\tau \left[(V_\gamma^m, \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2) + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2, V_\gamma^m) - (U_\gamma^m, D^\alpha (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)) - (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1, D^\alpha U_\gamma^m) + 2W_\gamma^m \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3 \right]}{-\tau^2 \left[\|\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)\|^2 + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3)^2 \right]}. \quad (3.65)$$

根据引理 3.4, 有

$$\begin{aligned}
 S_m(1) = & \tau \left[(V_\gamma^m, \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2) + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2, V_\gamma^m) - (U_\gamma^m, D^\alpha (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)) - (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1, D^\alpha U_\gamma^m) \right. \\
 & \left. + 2W_\gamma^m \sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3 \right] + \tau^2 \left[\|\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)\|^2 + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3)^2 \right],
 \end{aligned} \quad (3.66)$$

其阶数为 $\mathcal{O}(\tau^{p+1})$. 定义 $\tilde{\mathbf{f}}_m = \mathbf{f}(\mathbf{y}(\tilde{t}_m))$, 那么当 $\tau \rightarrow 0$ 时, 有 $\mathbf{f}_{mi} = \tilde{\mathbf{f}}_m + \mathcal{O}(\tau)$. 因此, 有

$$\begin{aligned}
 & \tau^2 \left[\|\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)\|^2 + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3)^2 \right] \\
 = & \tau^2 \left[\|\sum_{i=1}^s b_i \tilde{f}_{mi}^2\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} (\sum_{i=1}^s b_i \tilde{f}_{mi}^1)\|^2 + (\sum_{i=1}^s b_i \tilde{f}_{mi}^3)^2 \right] + \mathcal{O}(\tau^3) \\
 = & \mathcal{O}(\tau^2).
 \end{aligned} \quad (3.67)$$

将 (3.67) 和 (3.66) 代入 (3.65) 中, 得到

$$\begin{aligned}
 \gamma &= 1 + \frac{\mathcal{O}(\tau^{p+1})}{-\tau^2 \left[\|\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^2\|^2 + \|D^{\frac{\alpha}{2}} (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^1)\|^2 + (\sum_{i=1}^s b_i f_{mi}^3)^2 \right]} \\
 &= 1 + \frac{\mathcal{O}(\tau^{p+1})}{\mathcal{O}(\tau^2)} \\
 &= 1 + \mathcal{O}(\tau^{p-1}).
 \end{aligned} \quad (3.68)$$

证毕. □

注 3.1. 定理 3.5 表明, 当 $\tau \rightarrow 0$ 时, 松弛因子 γ_m 接近于 1, 这意味着松弛 RK 方法可以被视为标准 RK 方法的小扰动.

3.4.2 显式 SAV-RRK 方法的截断误差

基于定理 3.5 给出的松弛因子 γ_m 的估计, 本节进一步研究显式 SAV-RRK 方法 (3.51) 的精度.

在这之前, 将显式 SAV-RRK 方法 (3.51) 重新表示为

$$\begin{cases} \mathbf{Y}_{mi} = \mathbf{y}_\gamma^m + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{f}_{mj}, & i = 1, \dots, s, \\ \mathbf{y}^{m+1} = \mathbf{y}_\gamma^m + \tau \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_{mi}, \\ \mathbf{y}_\gamma^{m+1} = \mathbf{y}^{m+1} + (\gamma_m - 1) (\mathbf{y}^{m+1} - \mathbf{y}_\gamma^m). \end{cases} \quad (3.69)$$

前两个方程本质上构成标准的显式 SAV-RK 方法.

数值解 $\mathbf{y}_\gamma^{m+1}$ 在 $\hat{t}_{m+1}$ 处可以从如下两种角度进行解释^[40].

- 增量方向技术 (IDT) 的角度: $\mathbf{y}_\gamma^{m+1}$ 被视为对 $\mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau)$ 的近似, 当 $m \geq 0$ 时, $\hat{t}_m = t_m$.
- 松弛技术 (RT) 的角度: $\mathbf{y}_\gamma^{m+1}$ 被视为对 $\mathbf{y}(\hat{t}_m + \gamma_m \tau)$ 的近似, 当 $m > 0$ 时, $\hat{t}_m$ 可能不等于 t_m .

值得注意的是, 对数值解 $\mathbf{y}_\gamma^{m+1}$ 的不同解释可能导致不同的收敛结果. 参考 [78] 中引理 2.7 的证明思路, 得到了以下结果.

定理 3.6. 设显式 SAV-RK 方法 (3.48) 的阶数为 p ($p \geq 2$), 则有

- 对于 IDT, 显式 SAV-RRK 方法 (3.51) 的阶数为 $p - 1$.
- 对于 RT, 显式 SAV-RRK 方法 (3.51) 的阶数为 p .

证明. 设 $\hat{t}_{mi} = \hat{t}_m + c_i \tau, i = 1, \dots, s$, 则从式 (3.69) 中的第二个方程可以得到

$$\mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau) = \mathbf{y}(\hat{t}_m) + \tau \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}(\mathbf{y}(\hat{t}_{mi})) + \mathcal{O}(\tau^{p+1}). \quad (3.70)$$

为了估计式 (3.69) 中第三个方程的截断误差. 定义

$$\phi_m(\mathbf{y}(t)) := \mathbf{y}(\hat{t}_m) + \tau \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}(\mathbf{y}(\hat{t}_{mi})),$$

以及

$$\mathbf{y}(\hat{t}_{m+1}) = \phi_m(\mathbf{y}(t)) + (\gamma_m - 1)(\phi_m(\mathbf{y}(t)) - \mathbf{y}(\hat{t}_m)) + T_{m+1}. \quad (3.71)$$

利用定理 3.5 中给出的 $\gamma_m = 1 + \mathcal{O}(\tau^{p-1})$, 可以从 (3.70) 中得到

$$\begin{aligned} T_{m+1} &= \mathbf{y}(\hat{t}_{m+1}) - \phi_m(\mathbf{y}(t)) - (\gamma_m - 1)(\phi_m(\mathbf{y}(t)) - \mathbf{y}(\hat{t}_m)) \\ &= \mathbf{y}(\hat{t}_{m+1}) - (\mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau) - \mathcal{O}(\tau^{p+1})) - (\gamma_m - 1)(\mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau) - \mathcal{O}(\tau^{p+1}) - \mathbf{y}(\hat{t}_m)) \\ &= \mathbf{y}(\hat{t}_{m+1}) - \mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau) - (\gamma_m - 1)(\mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau) - \mathbf{y}(\hat{t}_m)) + \mathcal{O}(\tau^{p+1}) + \mathcal{O}((\gamma_m - 1)\tau^{p+1}) \\ &= \mathbf{y}(\hat{t}_{m+1}) - \mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau) - (\gamma_m - 1)\mathbf{y}'(\hat{t}_m + \tau)\tau + \mathcal{O}((\gamma_m - 1)\tau^2) + \mathcal{O}(\tau^{p+1}) \\ &= \mathbf{y}(\hat{t}_{m+1}) - \mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau) - (\gamma_m - 1)\mathbf{y}'(\hat{t}_m + \tau)\tau + \mathcal{O}(\tau^{p+1}). \end{aligned} \quad (3.72)$$

对于 IDT, $\mathbf{y}_\gamma^{m+1}$ 被视为在 $\hat{t}_m + \tau$ 处的近似, 因此 $\hat{t}_{m+1} = \hat{t}_m + \tau$, 这意味着

$$T_{m+1} = -(\gamma_m - 1)\mathbf{y}'(\hat{t}_m + \tau)\tau + \mathcal{O}(\tau^{p+1}) = \mathcal{O}(\tau^p).$$

也就是说, 方法 (3.51) 的阶数为 $p - 1$ 阶 (IDT 角度).

对于 RT, 由于 $\mathbf{y}_\gamma^{m+1}$ 被视为在 $\hat{t}_m + \gamma_m \tau$ 处的近似. 再次使用上述估计中的 Taylor 展开, 有

$$\begin{aligned}
 T_{m+1} &= \mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau + (\gamma_m - 1)\tau) - \mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau) - (\gamma_m - 1) \mathbf{y}'(\hat{t}_m + \tau) \tau + \mathcal{O}(\tau^{p+1}) \\
 &= \mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau) + (\gamma_m - 1) \mathbf{y}'(\hat{t}_m + \tau) \tau + \mathcal{O}((\gamma_m - 1)^2 \tau^2) \\
 &\quad - \mathbf{y}(\hat{t}_m + \tau) - (\gamma_m - 1) \mathbf{y}'(\hat{t}_m + \tau) \tau + \mathcal{O}(\tau^{p+1}) \\
 &= \mathcal{O}(\tau^{p+1}).
 \end{aligned} \tag{3.73}$$

这意味着方法 (3.51) 的阶数为 p 阶 (RT 角度).

□

注 3.2. 在实际计算过程中, IDT 角度的阶数可能高于预期, 甚至可以达到 RT 角度的阶数, 这可以在算例 3.1 中观察到.

注 3.3. 本章提出的方法很容易拓展到其他类似的分数阶方程, 例如非线性分数阶波动方程和分数阶 Klein-Gordon-Schrödinger 方程等, 详见算例 3.3-3.4.

3.5 数值算例

本节中将通过数值算例展示显式 SAV-RRK 方法 (3.51) 的精度和守恒性质.

值得注意的是, 尽管可以通过结合不同的显式 Runge-Kutta 方法来构造更高阶的显式 SAV-RRK 方法. 但事实上, 这一点却很难做到, 这是因为更高阶公式提高的精度, 已被所需要的计算量产生的误差抵消. 也就是说, 更高阶的计算公式与四阶公式相比, 没有实质上的改进. 不失一般性, 本章在计算中选用以下的显式 RK 方法^[79].

- RK(2, 2): 二级二阶 Heun 方法

$$\begin{array}{c|ccc}
 0 & 0 & 0 & \\
 \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & 0 & \\
 \hline
 & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} &
 \end{array} . \tag{3.74}$$

- RK(3, 3): 三级三阶 Heun 方法

$$\begin{array}{c|cccc}
 0 & 0 & 0 & 0 & \\
 \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & \\
 \frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & 0 & \\
 \hline
 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4} &
 \end{array} . \tag{3.75}$$

- RK(4, 4): 四级四阶 Gill 方法

$$\begin{array}{c|cccc}
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}-1}{2} & 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & 0 \\
 1 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 1 + \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\
 \hline
 & \frac{1}{6} & \frac{2-\sqrt{2}}{6} & \frac{2+\sqrt{2}}{6} & \frac{1}{6}
 \end{array} \quad (3.76)$$

值得一提的是, 本章的主要关注点是时间方向的精度. 因此, 这里没有展示空间方向的精度. 另外, 鉴于数值算例中能量的固有正性, 在计算中简单地设置常数 $C_0 = 0$.

时间方向上的误差和收敛阶通过以下方式计算

$$\text{Error}(\tau) = \|U_N^M - U_N^{2M}\|_\infty, \quad \text{order} = \log_2 \left[\frac{\text{Error}(\tau)}{\text{Error}(\tau/2)} \right]. \quad (3.77)$$

为了展示守恒性能, 定义相对能量误差

$$RE_\gamma^m = \left| \frac{E_\gamma^m - E_\gamma^0}{E_\gamma^0} \right|, \quad (3.78)$$

其中 E_γ^m 表示时刻 t_m 处的离散能量.

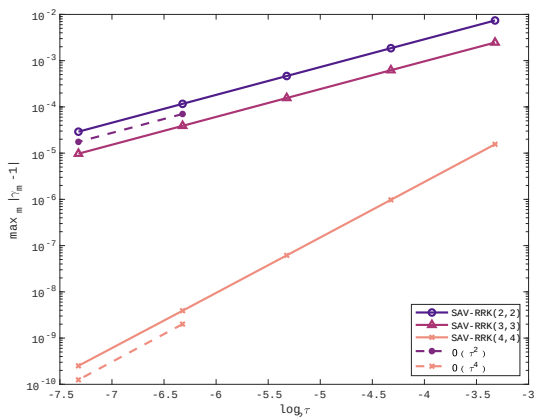
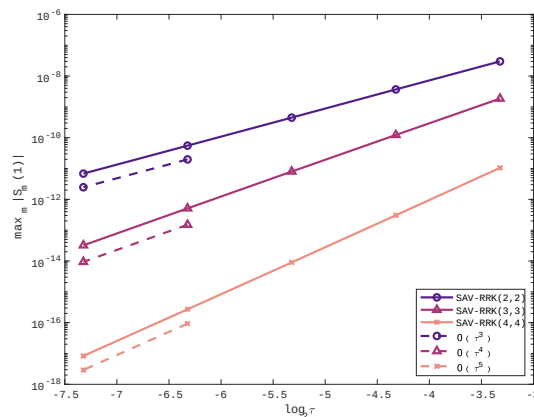
算例 3.1. 考虑如下一维 NFSWEs^[34]

$$\begin{cases} u_{tt} + (-\Delta)^{\alpha/2} u + iu_t + |u|^2 u = 0, & (x, t) \in (-25, 25) \times (0, T], \\ u(x, 0) = (1 + i)xe^{-10(1-x)^2}, & u_t(x, 0) = 0. \end{cases} \quad (3.79)$$

不失一般性, 取 $\alpha = 1.5, T = 1$. 表 3.1 展示了标准 SAV-RK、SAV-RRK(RT) 和 SAV-RRK(IDT) 方法在时间方向上的误差和收敛阶. 可以看到, 所有 SAV-RRK(RT) 方法的收敛阶与标准 SAV-RK 方法保持一致, 而 SAV-RRK(IDT) 方法则表现不同. SAV-RRK(IDT)(2, 2) 和 SAV-RRK(IDT)(4, 4) 展示出了比定理 3.6 中预期更高的收敛阶, 而 SAV-RRK(IDT)(3, 3) 并没有出现升阶现象. 如图 3.1 所示, 这种现象可能归因于偶数阶 SAV-RRK 方法的 $\max_m |\gamma_m - 1|$ 相较于理论分析提高了一个阶.

表 3.1 当 $N = 32, T = 1$ 时, 算例 3.1 在时间方向的误差 (Error) 和收敛阶 (order).

RK(级, 阶)	τ	SAV-RK		SAV-RRK(RT)		SAV-RRK(IDT)	
		Error(τ)	order	Error(τ)	order	Error(τ)	order
RK(2, 2)	0.1	1.8552E-04	-	1.9063E-04	-	2.0325E-04	-
	0.05	4.6601E-05	1.9931	4.7240E-05	2.0126	5.0585E-05	2.0065
	0.025	1.1671E-05	1.9974	1.1750E-05	2.0074	1.2387E-05	2.0298
	0.0125	2.9200E-06	1.9990	2.9294E-06	2.0040	2.9549E-06	2.0677
	0.00625	7.3022E-07	1.9996	7.3130E-07	2.0021	6.6665E-07	2.1481
RK(3, 3)	0.1	7.6862E-06	-	2.9857E-06	-	1.7245E-04	-
	0.05	9.5269E-07	3.0122	3.9037E-07	2.9352	4.3389E-05	1.9907
	0.025	1.1866E-07	3.0052	5.0077E-08	2.9626	1.0873E-05	1.9966
	0.0125	1.4809E-08	3.0023	6.3449E-09	2.9805	2.7208E-06	1.9986
	0.00625	1.8497E-09	3.0011	7.9858E-10	2.9901	6.8049E-07	1.9994
RK(4, 4)	0.1	3.7701E-07	-	3.8894E-07	-	7.0733E-07	-
	0.05	2.3572E-08	3.9994	2.3939E-08	4.0221	4.4585E-08	3.9878
	0.025	1.4730E-09	4.0003	1.4843E-09	4.0115	2.8080E-09	3.9889
	0.0125	9.2041E-11	4.0003	9.2397E-11	4.0058	1.7743E-10	3.9842
	0.00625	5.7518E-12	4.0002	5.7630E-12	4.0029	1.1309E-11	3.9718

(a) $\max_m |\gamma_m - 1|$ (b) $\max_m |S_m(1)|$ 图 3.1 算例 3.1 的一些松弛格式所对应的 $\max_m |\gamma_m - 1|$ 和 $\max_m |S_m(1)|$.

此外, 为估计松弛因子 γ_m , 在图 3.1 中还展示了在不同时间步长 τ 下的 $\max_m |S_m(1)|$ 的计算结果. 从中可以看出上述两个量的阶数与理论分析相符. 这证实了引理 3.4 和定理 3.5 中的理论结果. 值得一提的是, 当取不同的 α 的值时, 可以得到类似的结果.

使用 SAV-RRK(4, 4) 方法, 在长时间模拟 ($T = 1000$) 中, 针对不同 α 取值的相对能量误差如图 3.2 所示. 这表明所提出的格式捕捉到了原始问题的保结构现象, 并且其守恒性能明显优于 SAV 方法^[37] 和三层线性隐式差分法 (Line-Impl)^[32].

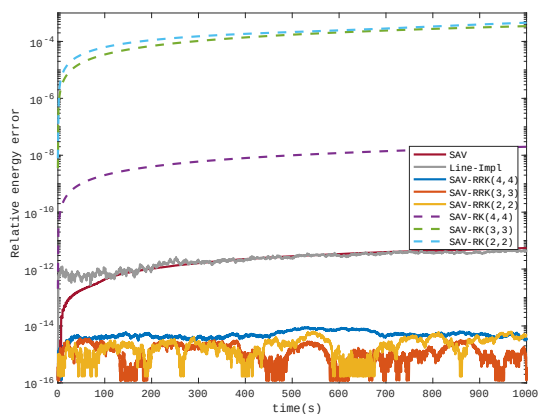
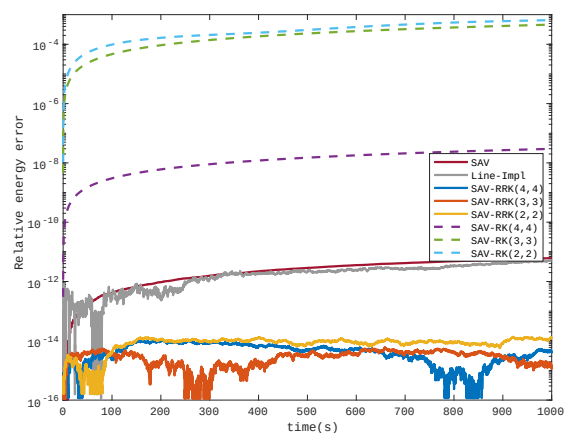
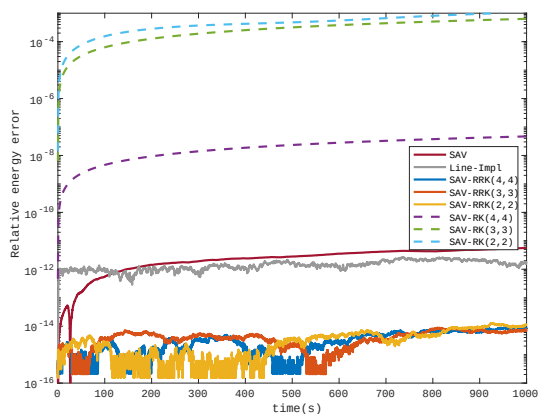
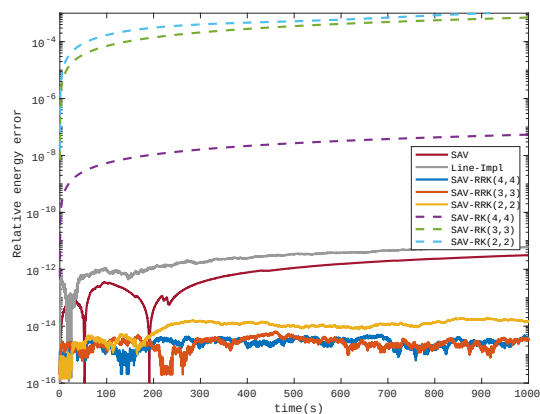
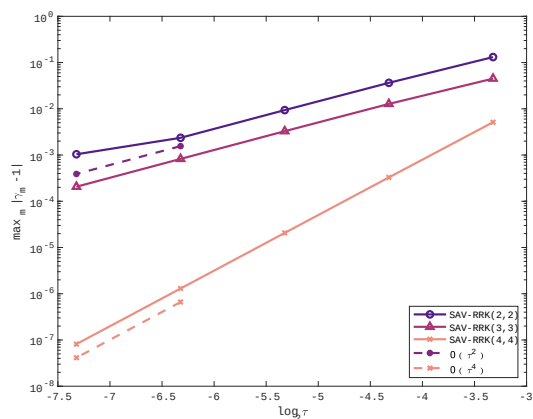
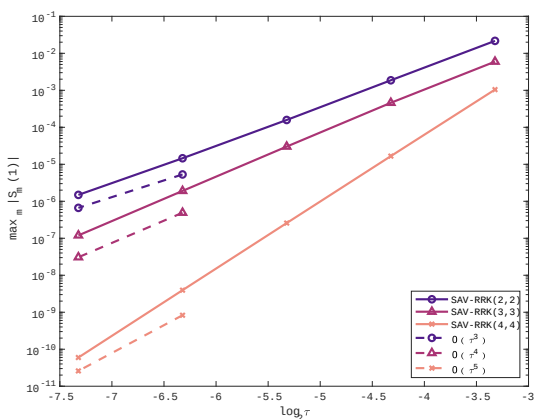
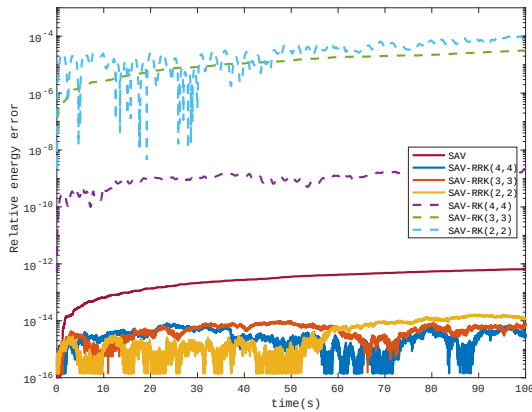
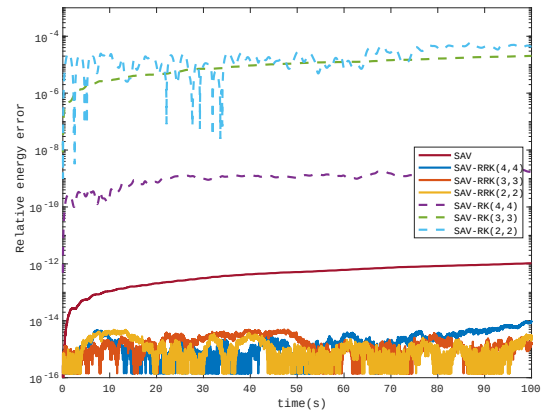
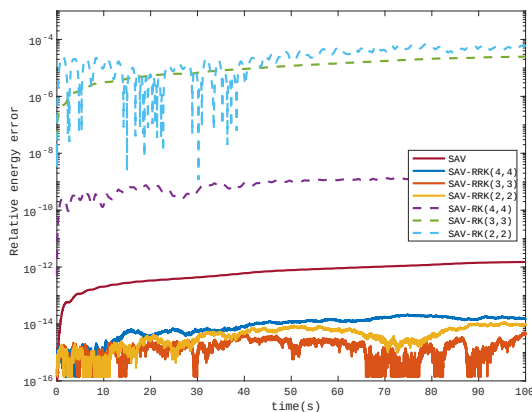
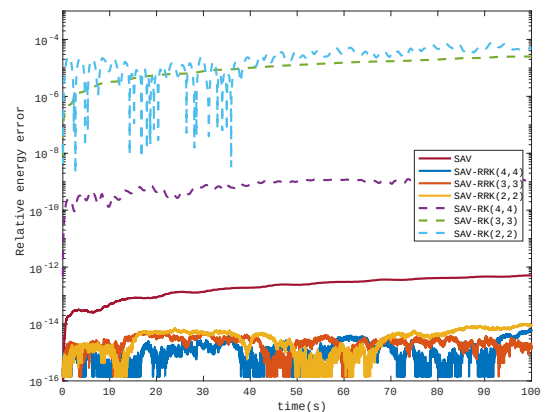
(a) $\alpha = 1.3$ (b) $\alpha = 1.6$ (c) $\alpha = 1.9$ (d) $\alpha = 2$ 图 3.2 当 $N = 32$, $\tau = 0.01$ 时, 算例 3.1 取不同 α 对应的相对能量误差.(a) $\max_m |\gamma_m - 1|$ (b) $\max_m |S_m(1)|$ 图 3.3 算例 3.2 的一些松弛格式所对应的 $\max_m |\gamma_m - 1|$ 和 $\max_m |S_m(1)|$.

表 3.2 当 $N = 4, T = 1$ 时, 算例 3.2 在时间方向的误差 (Error) 和收敛阶 (order).

RK(级, 阶)	τ	SAV-RK		SAV-RRK(RT)		SAV-RRK(IDT)	
		Error(τ)	order	Error(τ)	order	Error(τ)	order
RK(2, 2)	0.1	3.0217E-03	-	3.0102E-03	-	1.5692E-02	-
	0.05	7.4615E-04	2.0178	7.4702E-04	2.0106	9.6213E-03	0.7057
	0.025	1.8513E-04	2.0109	1.8587E-04	2.0069	5.2472E-03	0.8747
	0.0125	4.6090E-05	2.0060	4.6341E-05	2.0039	2.7312E-03	0.9420
	0.00625	1.1497E-05	2.0032	1.1569E-05	2.0021	1.3923E-03	0.9721
RK(3, 3)	0.1	1.2581E-04	-	3.9379E-05	-	3.2535E-03	-
	0.05	1.6180E-05	2.9589	5.5726E-06	2.8210	7.9304E-04	2.0365
	0.025	2.0532E-06	2.9783	7.4443E-07	2.9041	1.9546E-04	2.0205
	0.0125	2.5863E-07	2.9889	9.6210E-08	2.9519	4.8500E-05	2.0108
	0.00625	3.2454E-08	2.9944	1.2228E-08	2.9760	1.2078E-05	2.0056
RK(4, 4)	0.1	7.9185E-06	-	8.0508E-06	-	3.4013E-05	-
	0.05	4.9103E-07	4.0113	4.9644E-07	4.0194	3.3898E-06	3.3268
	0.025	3.0531E-08	4.0075	3.0805E-08	4.0104	3.6901E-07	3.1995
	0.0125	1.9026E-09	4.0042	1.9182E-09	4.0054	4.2681E-08	3.1120
	0.00625	1.1873E-10	4.0022	1.1966E-10	4.0027	5.1191E-09	3.0596

(a) $\alpha = 1.3$ (b) $\alpha = 1.6$ (c) $\alpha = 1.9$ (d) $\alpha = 2$ 图 3.4 当 $N = 4, \tau = 0.01$ 时, 算例 3.2 取不同 α 对应的相对能量误差.

算例 3.2. 考虑如下二维 NFSWEs

$$u_{tt} + (-\Delta)^{\alpha/2} u + iu_t + |u|^2 u = 0, \quad (x, y, t) \in \Omega \times [0, T], \quad (3.80)$$

初值条件为

$$\begin{aligned} u(x, y, 0) &= \operatorname{sech}(x^2 + y^2), \\ u_t(x, y, 0) &= \sin(x + y) \operatorname{sech}(-2(x^2 + y^2)), \end{aligned} \quad (3.81)$$

其中 $\Omega = [-5, 5] \times [-5, 5]$.

取 $\alpha = 1.5$, $T = 1$, 表 3.2 和图 3.3 分别展示了时间方向上的收敛阶以及对松弛因子 γ 相关的理论验证. 可以观察到, 与一维算例 3.1 不同, 在二维情况下, SAV-RRK(IDT) 方法未出现任何升阶现象.

为了展示所提出的方法在能量守恒方面的有效性, 在图 3.4 中绘制了取不同的 α 时, 使用 SAV-RRK(4, 4) 方法进行长时间模拟 ($T = 100$) 的相对能量误差. 结果显示, 所提出的方法可以在离散层面上精确地保持能量, 且其能量守恒性能显著优于 SAV 方法^[37].

算例 3.3. 考虑二维非线性分数阶波动方程^[80]

$$\begin{cases} u_{tt} + (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} u + F'(u) = 0, & (x, y, t) \in \Omega \times (0, T], \\ u(x, y, 0) = \frac{1}{2} \arctan\left(\exp\left(-\sqrt{x^2 + y^2}\right)\right), & u_t(x, y, 0) = 0, \end{cases} \quad (3.82)$$

其中 $\Omega = (-10, 10) \times (-10, 10)$, 势能 $F(u) = u^2 \left(\frac{1}{4}u^2 - \frac{1}{2}\right)$.

取 $\alpha = 1.5$ 和 $T = 1$, 表 3.3 展示了标准 SAV-RK、SAV-RRK(RT) 和 SAV-RRK(IDT) 方法在时间方向上的误差和收敛阶. 此外, 图 3.5 展示了长时间模拟 ($T = 100$) 的相对能量误差, 这些数据是通过 SAV-RRK(4, 4) 方法计算获得. 结果表明, 本章所提出的方法对非线性分数阶波动方程也是有效的.

表 3.3 当 $N = 4, T = 1$ 时, 算例 3.3 在时间方向的误差 (Error) 和收敛阶 (order).

RK(级, 阶)	τ	SAV-RK		SAV-RRK(RT)		SAV-RRK(IDT)	
		Error(τ)	order	Error(τ)	order	Error(τ)	order
RK(2, 2)	0.1	1.3395E-03	-	3.3870E-03	-	2.1470E-02	-
	0.05	3.4360E-04	1.9628	8.1480E-04	2.0555	1.0960E-02	0.9701
	0.025	8.6945E-05	1.9826	1.9951E-04	2.0300	5.5113E-03	0.9918
	0.0125	2.1865E-05	1.9915	4.9347E-05	2.0154	2.7600E-03	0.9977
	0.00625	5.4823E-06	1.9958	1.2270E-05	2.0078	1.3807E-03	0.9993
RK(3, 3)	0.1	3.5168E-05	-	4.3927E-05	-	3.8213E-04	-
	0.05	4.3533E-06	3.0141	5.4825E-06	3.0022	8.0473E-05	2.2475
	0.025	5.3902E-07	3.0137	6.8378E-07	3.0032	1.8560E-05	2.1163
	0.0125	6.7058E-08	3.0068	8.5344E-08	3.0022	4.4475E-06	2.0611
	0.00625	8.3615E-09	3.0036	1.0659E-08	3.0012	1.0883E-06	2.0309
RK(4, 4)	0.1	5.3561E-07	-	3.2716E-06	-	3.7745E-05	-
	0.05	3.6438E-08	3.8777	2.0654E-07	3.9855	4.8050E-06	2.9737
	0.025	2.3735E-09	3.9403	1.2898E-08	4.0012	6.0237E-07	2.9958
	0.0125	1.5146E-10	3.9700	8.0476E-10	4.0024	7.5303E-08	2.9999
	0.00625	9.5636E-12	3.9853	5.0241E-11	4.0016	9.4105E-09	3.0004

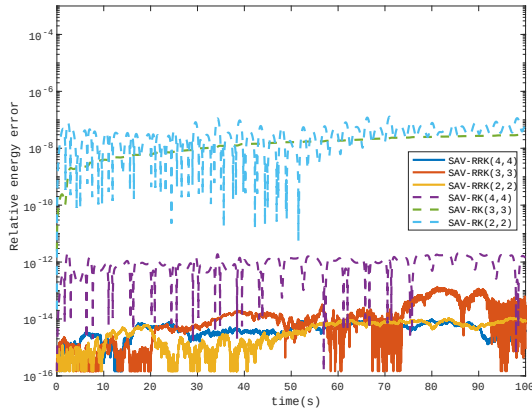
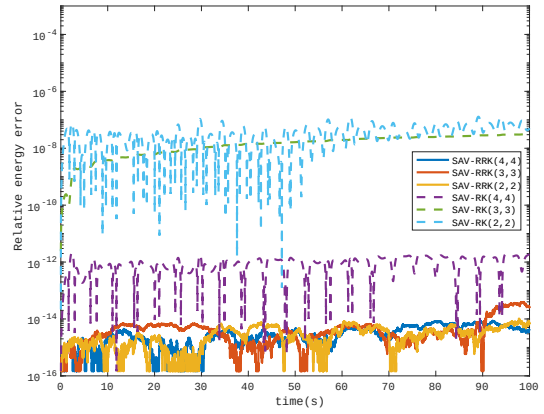
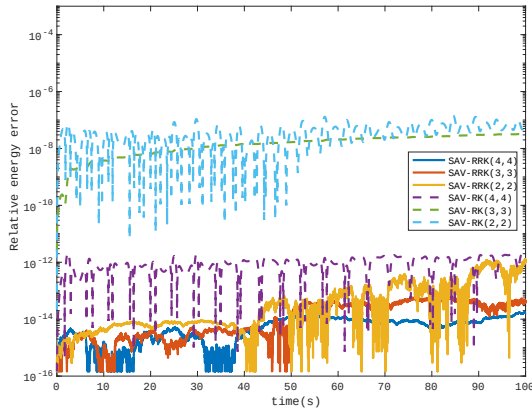
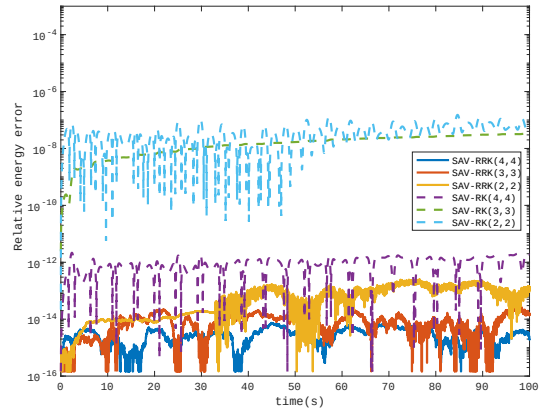

 (a) $\alpha = 1.3$

 (b) $\alpha = 1.6$

 (c) $\alpha = 1.9$

 (d) $\alpha = 2$

 图 3.5 当 $N = 4, \tau = 0.01$ 时, 算例 3.3 取不同 α 对应的相对能量误差.

算例 3.4. 考虑二维分数阶 Klein-Gordon-Schrödinger 方程^[56]

$$\begin{cases} i\partial_t u - \frac{1}{2}(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} u + u\phi = 0, (x, y, t) \in \Omega \times (0, T], \\ \partial_{tt}\phi + (-\Delta)^{\frac{\beta}{2}}\phi + \phi - |u|^2 = 0, (x, y, t) \in \Omega \times (0, T], \end{cases} \quad (3.83)$$

初值条件为

$$\begin{aligned} u(x, y, 0) &= (1 + i) \exp(-|\mathbf{x}|^2), \quad \phi(x, y, 0) = \operatorname{sech}(|\mathbf{x}|^2), \\ \partial_t \phi(x, y, 0) &= \sin(x + y) \operatorname{sech}(-2|\mathbf{x}|^2), \end{aligned} \quad (3.84)$$

其中 $\Omega = [-10, 10] \times [-10, 10]$.

与前面的算例类似, 表 3.4 列出了前述方法在 $\alpha = \beta = 1.5$ 时的数值误差和时间方向的上收敛阶.

表 3.4 当 $N = 4, T = 1$ 时, 算例 3.4 在时间方向的误差 (Error) 和收敛阶 (order).

RK(级, 阶)	τ	SAV-RK		SAV-RRK(RT)		SAV-RRK(IDT)	
		Error(τ)	order	Error(τ)	order	Error(τ)	order
RK(2, 2)	0.1	1.1875E-03	-	1.8837E-03	-	9.5325E-03	-
	0.05	2.7648E-04	2.1026	5.0394E-04	1.9023	6.7134E-03	0.5058
	0.025	6.6514E-05	2.0555	1.3036E-04	1.9508	3.8805E-03	0.7908
	0.0125	1.6300E-05	2.0288	3.3151E-05	1.9754	2.0757E-03	0.9026
	0.00625	4.0339E-06	2.0146	8.3587E-06	1.9877	1.0723E-03	0.9529
RK(3, 3)	0.1	8.7748E-05	-	1.9567E-04	-	3.1789E-03	-
	0.05	1.1471E-05	2.9354	2.4630E-05	2.9900	8.2646E-04	1.9435
	0.025	1.4684E-06	2.9657	3.0916E-06	2.9940	2.1079E-04	1.9712
	0.0125	1.8580E-07	2.9824	3.8731E-07	2.9968	5.3231E-05	1.9854
	0.00625	2.3370E-08	2.9911	4.8471E-08	2.9983	1.3375E-05	1.9927
RK(4, 4)	0.1	3.0741E-06	-	4.0627E-06	-	1.0278E-04	-
	0.05	1.9959E-07	3.9450	2.6020E-07	3.9647	1.3195E-05	2.9615
	0.025	1.2698E-08	3.9744	1.6461E-08	3.9825	1.6711E-06	2.9811
	0.0125	8.0044E-10	3.9876	1.0350E-09	3.9913	2.1024E-07	2.9906
	0.00625	5.0238E-11	3.9939	6.4882E-11	3.9957	2.6365E-08	2.9953

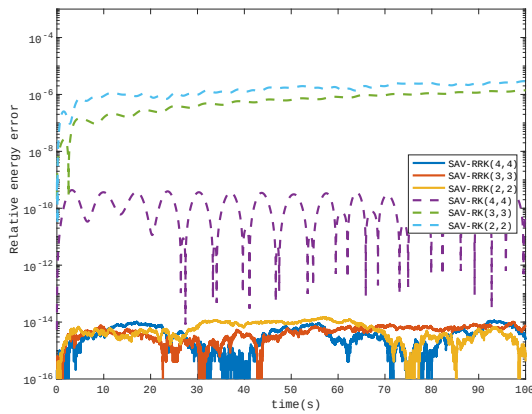
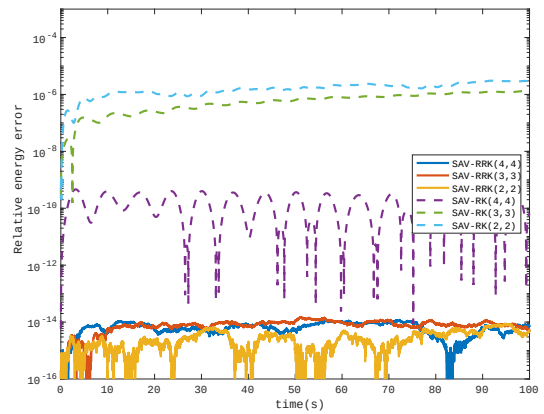
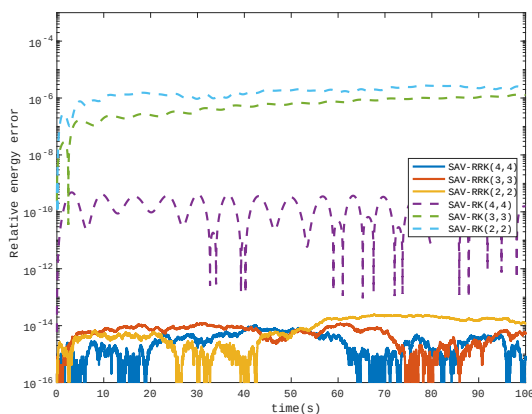
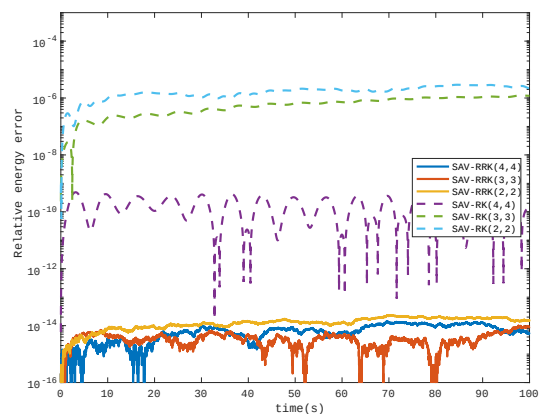
(a) $\alpha, \beta = 1.3$ (b) $\alpha, \beta = 1.6$ (c) $\alpha, \beta = 1.9$ (d) $\alpha, \beta = 2$ 图 3.6 当 $N = 4, \tau = 0.01$ 时, 算例 3.4 取不同 α 对应的相对能量误差.

图 3.6 中绘制了取不同的 α 和 β 时, 使用 SAV-RRK(4, 4) 方法进行长时间模拟 ($T = 100$) 的相对能量误差. 结果显示, 所提出的方法可以在离散层面上精确地保持二维分数阶 Klein-Gordon-Schrödinger 方程的能量, 这再次说明本章提出的 SAV-RRK 方法的有效性和普适性.

3.6 小结

本章考虑了具有周期性边界条件的二维非线性分数阶薛定谔波动方程, 首先通过标量辅助变量方法将其转化为一个等价系统, 其四次形式的能量被重新表述为三个二次项的和. 随后, 结合显式松弛 Runge-Kutta 方法成功构造了一个在时间方向可达任意高阶的显式能量守恒数值格式. 最后, 通过一系列数值实验验证了该格式对于其他类似的守恒问题也是有效的, 如分数阶 Klein-Gordon-Schrödinger 方程等, 且在长时间仿真中表现出良好的数值稳定性.

4 保 NFSWEs 原始能量和质量的守恒方法

据了解, 目前针对 NFSWEs 的数值方法只能保修正后的能量和 (或) 质量. 注意到最近提出的分区平均向量场系列方法不仅可以保持原始能量, 还有可能保持更多的守恒物理量, 并且已被用于构造哈密顿常微分方程的守恒数值格式^[54]. 因此, 本章旨在借助改进的平均向量场方法为 NFSWEs 构建能同时保持原始能量和质量的数值方法.

4.1 NFSWEs 的哈密顿结构

哈密顿结构是构建 PAVF 系列格式的前提. 基于此, 本节首先推导了 NFSWEs 的哈密顿结构.

设

$$u = p + iq, \quad u_t = \varphi + i\psi, \quad (4.1)$$

其中 p, q, φ, ψ 均为实函数. 那么, NFSWEs (3.1)-(3.3) 可以重写为

$$\varphi_t + i\psi_t + (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} p + i(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} q + i\kappa\varphi - \kappa\psi + \beta(p^2 + q^2)(p + iq) = 0. \quad (4.2)$$

分离实部和虚部, 得到

$$\begin{aligned} \varphi_t + (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} p - \kappa\psi + \beta(p^2 + q^2)p &= 0, \\ \psi_t + (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} q + \kappa\varphi + \beta(p^2 + q^2)q &= 0. \end{aligned} \quad (4.3)$$

即, NFSWEs (3.1)-(3.3) 可以重写为一个等价的耦合系统

$$\varphi_t = -(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} p + \kappa\psi - \beta(p^2 + q^2)p, \quad (4.4)$$

$$\psi_t = -(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} q - \kappa\varphi - \beta(p^2 + q^2)q, \quad (4.5)$$

$$p_t = \varphi, \quad (4.6)$$

$$q_t = \psi, \quad (4.7)$$

其中 p, q, φ, ψ 满足周期性边界条件.

为了得到 NFSWEs (3.1)-(3.3) 的哈密顿形式, 引入以下两个重要引理.

引理 4.1. ^[56] 给定 $1 < \alpha \leq 2$, 那么对于任何实周期函数 $p, q \in L^2(\Omega)$, 有

$$\int_{\Omega} (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} p q d\mathbf{x} = \int_{\Omega} (-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} p (-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} q d\mathbf{x} = \int_{\Omega} p (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} q d\mathbf{x}. \quad (4.8)$$

证明. 根据 Plancherel 定理, 有

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} p q d\mathbf{x} &= (2L)^2 \sum_{l_1 \in \mathbb{Z}} \sum_{l_2 \in \mathbb{Z}} |v_{l_1}^2 + v_{l_2}^2|^{\frac{\alpha}{2}} \hat{p}_{l_1, l_2} \hat{q}_{l_1, l_2} \\
 &= (2L)^2 \sum_{l_1 \in \mathbb{Z}} \sum_{l_2 \in \mathbb{Z}} |v_{l_1}^2 + v_{l_2}^2|^{\frac{\alpha}{4}} \hat{p}_{l_1, l_2} |v_{l_1}^2 + v_{l_2}^2|^{\frac{\alpha}{4}} \hat{q}_{l_1, l_2} \\
 &= (2L)^2 \sum_{l_1 \in \mathbb{Z}} \sum_{l_2 \in \mathbb{Z}} \hat{p}_{l_1, l_2} |v_{l_1}^2 + v_{l_2}^2|^{\frac{\alpha}{2}} \hat{q}_{l_1, l_2}.
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

于是

$$\int_{\Omega} (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} p q d\mathbf{x} = \int_{\Omega} (-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} p (-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} q d\mathbf{x} = \int_{\Omega} p (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} q d\mathbf{x}. \tag{4.10}$$

证毕. $\square$

引理 4.2. ^[55] 对于形如以下形式的泛函

$$F[g] = \int_{\Omega} f(g(\mathbf{x}), (-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} g(\mathbf{x})) d\mathbf{x}, \tag{4.11}$$

其中 f 是 Ω 上的光滑函数, 其变分导数

$$\frac{\delta F}{\delta g} = \frac{\partial f}{\partial g} + (-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} \frac{\partial f}{\partial ((-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} g)}. \tag{4.12}$$

证明. 令 $\phi(\mathbf{x})$ 为具有周期性边界条件的任意函数. 由于分数阶拉普拉斯算子是线性算子, 根据变分导数的定义, 有

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} \frac{\delta F}{\delta g} \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \left[\frac{d}{d\mu} \int_{\Omega} f(g + \mu\phi, (-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} g + \mu(-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} \phi) d\mathbf{x} \right]_{\mu=0} \\
 &= \int_{\Omega} \left(\frac{\partial f}{\partial g} \phi + \frac{\partial f}{\partial ((-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} g)} (-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} \phi \right) d\mathbf{x} \\
 &= \int_{\Omega} \left(\frac{\partial f}{\partial g} \phi + \left((-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} \frac{\partial f}{\partial ((-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} g)} \right) \phi \right) d\mathbf{x} \\
 &= \int_{\Omega} \left(\frac{\partial f}{\partial g} + (-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} \frac{\partial f}{\partial ((-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} g)} \right) \phi d\mathbf{x},
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

其中使用了式 (4.8). 基于 $\phi(\mathbf{x})$ 的任意性, 通过变分法基本引理, 可以得到式 (4.12). $\square$

基于上述引理, 可以得到以下结果.

定理 4.3. 设

$$\mathcal{G} = \kappa \int_{\Omega} (p^2 + q^2) d\mathbf{x} + 2 \operatorname{Im} \left(\int_{\Omega} (\varphi + i\psi)(p - iq) d\mathbf{x} \right), \tag{4.14}$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left((\varphi^2 + \psi^2) + ((-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} p)^2 + ((-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} q)^2 + \frac{\beta}{2} (p^2 + q^2)^2 \right) d\mathbf{x}. \tag{4.15}$$

那么等价系统 (4.4)-(4.7) 具有以下两个守恒定律

$$\frac{d}{dt}\mathcal{G} = 0, \quad \frac{d}{dt}\mathcal{H} = 0. \quad (4.16)$$

证明. 将式 (4.4) 和式 (4.5) 分别与 q 和 p 做内积, 得到

$$\begin{aligned} q\varphi_t &= -(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}}pq + \kappa\psi q - \beta(p^2 + q^2)pq, \\ p\psi_t &= -(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}}qp - \kappa\varphi p - \beta(p^2 + q^2)qp, \end{aligned} \quad (4.17)$$

两式做差, 有

$$q\varphi_t - p\psi_t = \kappa\psi q + \kappa\varphi p, \quad (4.18)$$

由于 $p_t = \varphi, q_t = \psi$, 显然 $\psi p_t = \varphi q_t$, 注意到

$$\operatorname{Im} \left(\int_{\Omega} (\varphi + i\psi)(p - iq) d\mathbf{x} \right) = \int_{\Omega} \operatorname{Im} ((\varphi + i\psi)(p - iq)) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} (\psi p - \varphi q) d\mathbf{x}, \quad (4.19)$$

于是有

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\mathcal{G} &= 2\kappa \int_{\Omega} (pp_t + qq_t) d\mathbf{x} + 2 \int_{\Omega} (\psi_t p + \psi p_t - \varphi_t q - \varphi q_t) d\mathbf{x} \\ &= 2\kappa \int_{\Omega} (p\varphi + q\psi) d\mathbf{x} + 2 \int_{\Omega} (\psi_t p - \varphi_t q) d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

根据 $q\varphi_t - p\psi_t = \kappa\psi q + \kappa\varphi p$, 可得

$$\frac{d}{dt}\mathcal{G} = 0. \quad (4.21)$$

类似地, 注意到引理 4.1, 将方程 (4.4)-(4.7) 与 $\varphi_t, \psi_t, p_t, -q_t$ 分别做内积, 可以推导出第二个守恒定律.

□

定理 4.4. NFSWEs (3.1)-(3.3) 可以被重构为以下哈密顿系统

$$\begin{pmatrix} \varphi_t \\ \psi_t \\ p_t \\ q_t \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} \delta\mathcal{H}/\delta\varphi \\ \delta\mathcal{H}/\delta\psi \\ \delta\mathcal{H}/\delta p \\ \delta\mathcal{H}/\delta q \end{pmatrix}, \quad (4.22)$$

其中能量泛函 $\mathcal{H}$ 定义如式 (4.15), 哈密顿算符

$$J = \begin{pmatrix} 0 & \kappa & -1 & 0 \\ -\kappa & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

证明. 注意到

$$\begin{aligned}
 (-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}}((- \Delta)^{\frac{\alpha}{4}} u(\boldsymbol{x}, t)) &= \mathcal{F}^{-1} [|\boldsymbol{\sigma}|^{\frac{\alpha}{2}} \mathcal{F}(\mathcal{F}^{-1} [|\boldsymbol{\sigma}|^{\frac{\alpha}{2}} \mathcal{F}(u(\boldsymbol{\sigma}, t))])] \\
 &= \mathcal{F}^{-1} [|\boldsymbol{\sigma}|^{\frac{\alpha}{2}} |\boldsymbol{\sigma}|^{\frac{\alpha}{2}} \mathcal{F}(u(\boldsymbol{\sigma}, t))] \\
 &= \mathcal{F}^{-1} [|\boldsymbol{\sigma}|^{\alpha} \mathcal{F}(u(\boldsymbol{\sigma}, t))] \\
 &= (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} u(\boldsymbol{x}, t),
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

并应用引理 4.2 中的分数阶变分原理, 得到

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta p} = \frac{1}{2} \left(2(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} p + 2 \cdot \frac{\beta}{2} (p^2 + q^2) \cdot 2p \right) = (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} p + \beta (p^2 + q^2) p, \tag{4.25}$$

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta q} = \frac{1}{2} \left(2(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} q + 2 \cdot \frac{\beta}{2} (p^2 + q^2) \cdot 2q \right) = (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} q + \beta (p^2 + q^2) q, \tag{4.26}$$

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \varphi} = \varphi, \tag{4.27}$$

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \psi} = \psi. \tag{4.28}$$

结合 NFSWEs (3.1)-(3.3) 的等价形式 (4.4)-(4.7), 可得到

$$\begin{pmatrix} \varphi_t \\ \psi_t \\ p_t \\ q_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa & -1 & 0 \\ -\kappa & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathcal{H} / \delta \varphi \\ \delta \mathcal{H} / \delta \psi \\ \delta \mathcal{H} / \delta p \\ \delta \mathcal{H} / \delta q \end{pmatrix}. \tag{4.29}$$

证毕. □

4.2 傅里叶拟谱半离散格式

鉴于周期性边界条件, 选择傅里叶拟谱法离散等价系统 (4.4)-(4.7), 得到如下的空间半离散系统

$$\Phi_t = D^\alpha P + \kappa \Psi - \beta (P^2 + Q^2) \cdot P, \tag{4.30}$$

$$\Psi_t = D^\alpha Q - \kappa \Phi - \beta (P^2 + Q^2) \cdot Q, \tag{4.31}$$

$$P_t = \Phi, \tag{4.32}$$

$$Q_t = \Psi, \tag{4.33}$$

其中 $P^2 = P \cdot P$.

简洁起见, 定义向量

$$Y = (\Phi^T, \Psi^T, P^T, Q^T), \tag{4.34}$$

则上述半离散系统可重写为如下哈密顿形式

$$\frac{dY}{dt} = f(Y) = S\nabla H(Y), \quad (4.35)$$

哈密顿能量定义如下

$$H(Y) = \frac{1}{2} \left((\Phi^T \Phi + \Psi^T \Psi) - P^T D^\alpha P - Q^T D^\alpha Q + \frac{\beta}{2} (P^2 + Q^2)^T (P^2 + Q^2) \right), \quad (4.36)$$

其中 S 是具有以下形式的反对称矩阵

$$S = \begin{pmatrix} 0 & \kappa I & -I & 0 \\ -\kappa I & 0 & 0 & -I \\ I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.37)$$

此外, 定义质量

$$G(Y) = \kappa \|P\|^2 + \kappa \|Q\|^2 + 2\Psi^T P - 2\Phi^T Q. \quad (4.38)$$

定理 4.5. 半离散系统 (4.30)-(4.33) 具有质量和能量守恒定律

$$\frac{dG(Y)}{dt} = 0, \quad \frac{dH(Y)}{dt} = 0. \quad (4.39)$$

证明. 根据式 (4.38), 可以推导出

$$\begin{aligned} \frac{dG(Y)}{dt} &= 2h_x h_y (\kappa P^T P_t + \kappa Q^T Q_t + \Psi_t^T P + \Psi^T P_t - \Phi_t^T Q - \Phi^T Q_t) \\ &= 2h_x h_y (\kappa P^T \Phi + \kappa Q^T \Psi + P^T D^\alpha Q - \kappa P^T \Phi - \beta P^T (P^2 + Q^2) \cdot Q \\ &\quad + \Psi^T \Phi - Q^T D^\alpha P - \kappa Q^T \Psi + \beta Q^T (P^2 + Q^2) \cdot P - \Phi^T \Psi) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (4.40)$$

基于矩阵 S 的反对称性质, 并结合式 (4.35), 有

$$\frac{dH(Y)}{dt} = \nabla H(Y)^T f(Y) = \nabla H(Y)^T S \nabla H(Y) = 0. \quad (4.41)$$

证毕. □

4.3 PAVF-P 方法

对于 NFSWEs (3.1)-(3.3), 如表 1.1 所示存在许多保结构的方法, 但其中大多数只保持修正后的能量和 (或) 质量. 本节旨在基于等价哈密顿系统 (4.35), 借助 PAVF-P 方法^[54]为 NFSWEs 构建能够同时保持原始能量和质量的数值格式.

4.3.1 PAVF-P 格式

应用 PAVF 方法到哈密顿系统 (4.35), 可得 NFSWEs (3.1)-(3.3) 的全离散格式

$$\begin{aligned}\delta_t \Phi^m &= \int_0^1 \kappa H_\Psi (\Phi^{m+1}, \varepsilon \Psi^{m+1} + (1 - \varepsilon) \Psi^m, P^m, Q^m) d\varepsilon \\ &\quad - \int_0^1 H_P (\Phi^{m+1}, \Psi^{m+1}, \varepsilon P^{m+1} + (1 - \varepsilon) P^m, Q^m) d\varepsilon,\end{aligned}\quad (4.42)$$

$$\begin{aligned}\delta_t \Psi^m &= - \int_0^1 \kappa H_\Phi (\varepsilon \Phi^{m+1} + (1 - \varepsilon) \Phi^m, \Psi^m, P^m, Q^m) d\varepsilon \\ &\quad + \int_0^1 H_Q (\Phi^{m+1}, \Psi^{m+1}, P^{m+1}, \varepsilon Q^{m+1} + (1 - \varepsilon) Q^m) d\varepsilon,\end{aligned}\quad (4.43)$$

$$\delta_t P^m = \int_0^1 H_\Phi (\varepsilon \Phi^{m+1} + (1 - \varepsilon) \Phi^m, \Psi^m, P^m, Q^m) d\varepsilon,\quad (4.44)$$

$$\delta_t Q^m = \int_0^1 H_\Psi (\Phi^{m+1}, \varepsilon \Psi^{m+1} + (1 - \varepsilon) \Psi^m, P^m, Q^m) d\varepsilon.\quad (4.45)$$

该数值格式可以进一步整合为如下傅里叶拟谱 PAVF(FPAVF) 格式

$$\begin{aligned}\delta_t \Phi^m &= \kappa \Psi^{m+\frac{1}{2}} + D^\alpha P^{m+\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{4} ((P^{m+1})^3 + (P^m)^2 \cdot P^{m+1} + (P^{m+1})^2 \cdot P^m \\ &\quad + (P^m)^3 + 2P^{m+1} \cdot (Q^m)^2 + 2P^m \cdot (Q^m)^2),\end{aligned}\quad (4.46)$$

$$\begin{aligned}\delta_t \Psi^m &= -\kappa \Phi^{m+\frac{1}{2}} + D^\alpha Q^{m+\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{4} ((Q^{m+1})^3 + (Q^m)^2 \cdot Q^{m+1} + (Q^{m+1})^2 \cdot Q^m \\ &\quad + (P^m)^3 + 2Q^{m+1} \cdot (P^{m+1})^2 + 2Q^m \cdot (P^{m+1})^2),\end{aligned}\quad (4.47)$$

$$\delta_t P^m = \Phi^{m+\frac{1}{2}},\quad (4.48)$$

$$\delta_t Q^m = \Psi^{m+\frac{1}{2}}.\quad (4.49)$$

其中 $\delta_t \Phi^m = \frac{P^{m+1} - P^m}{\tau}$, $\Phi^{m+\frac{1}{2}} = \frac{P^{m+1} + P^m}{2}$. Ψ^m, P^m 以及 Q^m 具有类似定义.

通过将 (4.46)-(4.47) 分别与 $\delta_t P^m$ 和 $\delta_t Q^m$ 做内积, 即可证明 FPAVF 格式的能量守恒性质. 不幸的是, 此格式并不能保证质量守恒, 这将在数值算例中被反映出来.

FPAVF 格式 (4.46)-(4.49) 的伴随格式为

$$\begin{aligned}\delta_t \Phi^m &= \kappa \Psi^{m+\frac{1}{2}} + D^\alpha P^{m+\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{4} ((P^{m+1})^3 + (P^m)^2 \cdot P^{m+1} + (P^{m+1})^2 \cdot P^m \\ &\quad + (P^m)^3 + 2P^{m+1} \cdot (Q^{m+1})^2 + 2P^m \cdot (Q^{m+1})^2),\end{aligned}\quad (4.50)$$

$$\begin{aligned}\delta_t \Psi^m &= -\kappa \Phi^{m+\frac{1}{2}} + D^\alpha Q^{m+\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{4} ((Q^{m+1})^3 + (Q^m)^2 \cdot Q^{m+1} + (Q^{m+1})^2 \cdot Q^m \\ &\quad + (Q^m)^3 + 2Q^{m+1} \cdot (P^m)^2 + 2Q^m \cdot (P^m)^2),\end{aligned}\quad (4.51)$$

$$\delta_t P^m = \Phi^{m+\frac{1}{2}},\quad (4.52)$$

$$\delta_t Q^m = \Psi^{m+\frac{1}{2}}.\quad (4.53)$$

将 FPAVF 格式 (4.46)-(4.49) 与其伴随 FPAVF 格式 (4.50)-(4.53) 相结合, 得到傅里叶拟谱 PAVF-P(FPAVF-P) 格式如下

$$\begin{aligned}\delta_t \Phi^m &= \kappa \Psi^{m+\frac{1}{2}} + D^\alpha P^{m+\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{4} ((P^{m+1})^3 + (P^m)^2 \cdot P^{m+1} + (P^{m+1})^2 \cdot P^m \\ &\quad + (P^m)^3 + P^{m+1} \cdot (Q^m)^2 + P^m \cdot (Q^m)^2 + P^{m+1} \cdot (Q^{m+1})^2 + P^m \cdot (Q^{m+1})^2),\end{aligned}\quad (4.54)$$

$$\begin{aligned}\delta_t \Psi^m &= -\kappa \Phi^{m+\frac{1}{2}} + D^\alpha Q^{m+\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{4} ((Q^{m+1})^3 + (Q^m)^2 \cdot Q^{m+1} + (Q^{m+1})^2 \cdot Q^m \\ &\quad + (Q^m)^3 + Q^{m+1} \cdot (P^{m+1})^2 + Q^m \cdot (P^{m+1})^2 + Q^{m+1} \cdot (P^m)^2 + Q^m \cdot (P^m)^2),\end{aligned}\quad (4.55)$$

$$\delta_t P^m = \Phi^{m+\frac{1}{2}}, \quad (4.56)$$

$$\delta_t Q^m = \Psi^{m+\frac{1}{2}}. \quad (4.57)$$

4.3.2 离散守恒律

定理 4.6. FPAVF-P 格式 (4.54)-(4.57) 在离散层面上具有以下质量和能量守恒律

$$G^{m+1} = G^m, \quad H^{m+1} = H^m, \quad 0 \leq m \leq M-1, \quad (4.58)$$

其中离散质量

$$G^m = \kappa \|P^m\|^2 + \kappa \|Q^m\|^2 + 2(\Psi^m)^T P^m - 2(\Phi^m)^T Q^m, \quad (4.59)$$

离散能量

$$\begin{aligned}H^m &= \frac{1}{2} [(\Phi^m)^T \Phi^m + (\Psi^m)^T \Psi^m] - (P^m)^T D^\alpha P^m - (Q^m)^T D^\alpha Q^m \\ &\quad + \frac{\beta}{2} ((P^m)^2 + (Q^m)^2)^T ((P^m)^2 + (Q^m)^2).\end{aligned}\quad (4.60)$$

证明. 将式 (4.54) 与 $Q^{m+1} + Q^m$ 做内积, 得到

$$\begin{aligned}& (Q^{m+1} + Q^m)^T \delta_t \Phi^m \\ &= (Q^{m+1} + Q^m)^T \kappa \Psi^{m+\frac{1}{2}} + (Q^{m+1} + Q^m)^T D^\alpha P^{m+\frac{1}{2}} \\ &\quad - (Q^{m+1} + Q^m)^T \frac{\beta}{4} ((P^{m+1})^3 + (P^m)^2 \cdot P^{m+1} + (P^{m+1})^2 \cdot P^m \\ &\quad + (P^m)^3 + P^{m+1} \cdot (Q^m)^2 + P^m \cdot (Q^m)^2 + P^{m+1} \cdot (Q^{m+1})^2 + P^m \cdot (Q^{m+1})^2).\end{aligned}\quad (4.61)$$

同样, 将式 (4.55) 与 $P^{m+1} + P^m$ 做内积, 得到

$$\begin{aligned}& (P^{m+1} + P^m)^T \delta_t \Psi^m \\ &= - (P^{m+1} + P^m)^T \kappa \Phi^{m+\frac{1}{2}} + (P^{m+1} + P^m)^T D^\alpha Q^{m+\frac{1}{2}} \\ &\quad - (P^{m+1} + P^m)^T \frac{\beta}{4} ((Q^{m+1})^3 + (Q^m)^2 \cdot Q^{m+1} + (Q^{m+1})^2 \cdot Q^m \\ &\quad + (Q^m)^3 + Q^{m+1} \cdot (P^{m+1})^2 + Q^m \cdot (P^{m+1})^2 + Q^{m+1} \cdot (P^m)^2 + Q^m \cdot (P^m)^2).\end{aligned}\quad (4.62)$$

将 (4.62) 与 (4.61) 相减, 推导出

$$\begin{aligned} & (Q^{m+1} + Q^m)^T \delta_t \Phi^m - (P^{m+1} + P^m)^T \delta_t \Psi^m \\ &= (Q^{m+1} + Q^m)^T \kappa \Psi^{m+\frac{1}{2}} + (P^{m+1} + P^m)^T \kappa \Phi^{m+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (4.63)$$

注意到

$$\delta_t P^m = \Phi^{m+\frac{1}{2}}, \quad \delta_t Q^m = \Psi^{m+\frac{1}{2}},$$

可以得到

$$\begin{aligned} & (Q^{m+1} + Q^m)^T \delta_t \Phi^m - (P^{m+1} + P^m)^T \delta_t \Psi^m \\ &= (Q^{m+1} + Q^m)^T \kappa \delta_t Q^m + (P^{m+1} + P^m)^T \kappa \delta_t P^m. \end{aligned} \quad (4.64)$$

即

$$\begin{aligned} & (Q^{m+1} + Q^m)^T (\Phi^{m+1} - \Phi^m) - (P^{m+1} + P^m)^T (\Psi^{m+1} - \Psi^m) \\ &= \kappa (\|Q^{m+1}\|^2 - \|Q^m\|^2) + \kappa (\|P^{m+1}\|^2 - \|P^m\|^2). \end{aligned} \quad (4.65)$$

将式 (4.56) 和式 (4.57) 交叉相乘

$$\begin{aligned} & ((Q^{m+1})^T \Phi^{m+1} - (P^{m+1})^T \Psi^{m+1}) - ((Q^m)^T \Phi^m - (P^m)^T \Psi^m) \\ &= ((Q^m)^T \Phi^{m+1} - (P^m)^T \Psi^{m+1}) - ((Q^{m+1})^T \Phi^m - (P^{m+1})^T \Psi^m). \end{aligned} \quad (4.66)$$

将式 (4.66) 代入式 (4.65), 得到

$$\begin{aligned} & \kappa \|P^{m+1}\|^2 + \kappa \|Q^{m+1}\|^2 + 2(P^{m+1})^T \Psi^{m+1} - 2(Q^{m+1})^T \Phi^{m+1} \\ &= \kappa \|P^m\|^2 + \kappa \|Q^m\|^2 + 2(P^m)^T \Psi^m - 2(Q^m)^T \Phi^m, \end{aligned} \quad (4.67)$$

这意味着

$$G^{m+1} = G^m. \quad (4.68)$$

类似地, 通过将 (4.54)-(4.55) 分别与 $\delta_t P^m$ 和 $\delta_t Q^m$ 做离散内积并求和, 可以得到离散能量守恒律

$$H^{m+1} = H^m. \quad (4.69)$$

证毕. □

4.4 其他 AVF 系列方法

为了比较, 本节也给出了用于求解 NFSWEs (3.1)-(3.3) 的以下两个二阶 AVF 系列格式.

• 傅里叶拟谱 AVF(FAVF) 格式

$$\begin{aligned} \delta_t \Phi = & D^\alpha P^{m+\frac{1}{2}} + \kappa \Psi^{m+\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{12} (3(P^{m+1})^3 - 5(P^{m+1})^2 \cdot P^m \\ & - 5(P^m)^2 \cdot P^{m+1} + 19(P^m)^3 - 6Q^{m+1} \cdot Q^m \cdot P^m + 2Q^{m+1} \cdot Q^m \cdot P^{m+1} \\ & + 3(Q^{m+1})^2 \cdot P^{m+1} + (Q^m)^2 \cdot P^{m+1} - 7(Q^{m+1})^2 \cdot P^m + 19(Q^m)^2 \cdot P^m), \quad (4.70) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_t \Psi = & D^\alpha Q^{m+\frac{1}{2}} - \kappa \Phi^{m+\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{12} (3(Q^{m+1})^3 - 5(Q^{m+1})^2 \cdot Q^m \\ & - 5(Q^m)^2 \cdot Q^{m+1} + 19(Q^m)^3 - 6P^{m+1} \cdot P^m \cdot Q^m + 2P^{m+1} \cdot P^m \cdot Q^{m+1} \\ & + 3(P^{m+1})^2 \cdot Q^{m+1} + (P^m)^2 \cdot Q^{m+1} - 7(P^{m+1})^2 \cdot Q^m + 19(P^m)^2 \cdot Q^m), \quad (4.71) \end{aligned}$$

$$\delta_t P = \Phi^{m+\frac{1}{2}}, \quad (4.72)$$

$$\delta_t Q = \Psi^{m+\frac{1}{2}}. \quad (4.73)$$

• 傅里叶拟谱 PAVF-C(FPAVF-C) 格式

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} (\Phi^* - \Phi^m) = & \frac{1}{2} \kappa (\Psi^* + \Psi^m) + \frac{1}{2} D^\alpha (P^* + P^m) - \frac{\beta}{4} ((P^*)^3 + (P^m)^2 \cdot P^* \\ & + (P^*)^2 \cdot P^m + (P^m)^3 + 2P^* \cdot (Q^m)^2 + 2P^m \cdot (Q^m)^2), \quad (4.74) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} (\Psi^* - \Psi^m) = & -\frac{1}{2} \kappa (\Phi^* + \Phi^m) + \frac{1}{2} D^\alpha (Q^* + Q^m) - \frac{\beta}{4} ((Q^*)^3 + (Q^m)^2 \cdot Q^* \\ & + (Q^*)^2 \cdot Q^m + (Q^m)^3 + 2Q^* \cdot (P^*)^2 + 2Q^m \cdot (P^*)^2), \quad (4.75) \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\tau} (P^* - P^m) = \frac{1}{2} (\Phi^* + \Phi^m), \quad (4.76)$$

$$\frac{1}{\tau} (Q^* - Q^m) = \frac{1}{2} (\Psi^* + \Psi^m), \quad (4.77)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} (\Phi^{m+1} - \Phi^*) = & \frac{1}{2} \kappa (\Psi^{m+1} + \Psi^*) + \frac{1}{2} D^\alpha P^{m+\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{4} ((P^{m+1})^3 + (P^*)^2 \cdot P^{m+1} \\ & + (P^{m+1})^2 \cdot P^* + (P^*)^3 + 2P^{m+1} \cdot (Q^{m+1})^2 + 2P^* \cdot (Q^{m+1})^2), \quad (4.78) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} (\Psi^{m+1} - \Psi^*) = & -\frac{1}{2} \kappa (\Phi^{m+1} + \Phi^*) + \frac{1}{2} D^\alpha Q^{m+\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{4} ((Q^{m+1})^3 + (Q^*)^2 \cdot Q^{m+1} \\ & + (Q^{m+1})^2 \cdot Q^* + (Q^*)^3 + 2Q^{m+1} \cdot (P^*)^2 + 2Q^* \cdot (P^*)^2), \quad (4.79) \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\tau} (P^{m+1} - P^*) = \frac{1}{2} (\Phi^{m+1} + \Phi^*), \quad (4.80)$$

$$\frac{1}{\tau} (Q^{m+1} - Q^*) = \frac{1}{2} (\Psi^{m+1} + \Psi^*), \quad (4.81)$$

其中 Φ^*, Ψ^*, P^*, Q^* 可理解为从前一层迭代得到的中间变量, 作为计算后续层变量的输入.

注 4.1. 类似 FPAVF-P 格式 (4.54)-(4.57), 容易证明上述 FPAVF 格式 (4.46)-(4.49)、FAVF 格式 (4.70)-(4.73) 和 FPAVF-C 格式 (4.74)-(4.81) 均在离散层面上保持原始能量, 但不保持原始质量. 离散能量的形式与 (4.60) 中定义的相同.

注 4.2. 值得强调的是, 用于求解 NFSWEs (3.1)-(3.3) 的其他现有方法仅保持修正后的能量和 (或) 质量. 例如 SAV 方法^[37] 仅保持修正后的能量, 三层线性隐式差分格式^[34] 保持修正后的能量和质量. 然而, 所提出的 FPAVF-P 格式 (4.54)-(4.57) 在离散层面上同时保持原始质量和能量, 这是本章的主要贡献之一. 此外, FPAVF-P 格式 (4.54)-(4.57) 在时间方向具有二阶精度, 在空间方向具有谱精度.

4.5 数值算例

本节给出了一些数值算例, 为了展示守恒性能, 通过以下方式计算能量和质量的相对误差

$$RH^m = |(H^m - H^0)/H^0|, \quad RG^m = |(G^m - G^0)/G^0|, \quad (4.82)$$

其中 H^m, G^m 分别表示 t_m 时刻的离散能量和质量. 在计算过程中为了获得数值误差, 采用以下误差函数

$$\begin{aligned} E(\tau) &= \|U_N^M - U_N^{2M}\|_\infty = \left\| U\left(\frac{T}{M}, \frac{L}{N}\right) - U\left(\frac{T}{2M}, \frac{L}{N}\right) \right\|_\infty, \\ E(N) &= \|U_N^M - U_{2N}^M\|_\infty = \left\| U\left(\frac{T}{M}, \frac{L}{N}\right) - U\left(\frac{T}{M}, \frac{L}{2N}\right) \right\|_\infty. \end{aligned} \quad (4.83)$$

计算时间方向和空间方向的收敛阶

$$\text{order} = \begin{cases} \log_2[E(\tau)/E(\tau/2)], & \text{在时间方向} \\ \log_2[E(N)/E(2N)], & \text{在空间方向.} \end{cases} \quad (4.84)$$

算例 4.1. 考虑一维 NFSWEs

$$u_{tt} + (-\Delta)^{\alpha/2} u + iu_t + |u|^2 u = 0, \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T], \quad (4.85)$$

初值条件为 $u(x, 0) = (1 + i)xe^{-10(1-x)^2}$ 以及 $u_t(x, 0) = 0$.

基于离散守恒律 (4.58), 有 $G^m \equiv G^0$ 和 $H^m \equiv H^0$, 并且 G^0, H^0 仅依赖于给定的初值函数 $u(x, 0)$ 和 $u_t(x, 0)$. 很容易验证初值函数 $u(x, 0)$ 在 x 远离 $x = 1$ 的地方呈指数衰减趋向于零. 这意味着初值函数在有界区间 Ω 之外可以忽略不计. 考虑到机器精

度的限制, 此处, 取 $\Omega = (-25, 25)$. 基于守恒律 (3.6) 和 (3.7), 利用高斯数值积分, 立即得到任意 α 下的原始质量 $G(0) = 0.812482096009503$, 以及 $\alpha = 2$ 时的原始能量 $E(0) = 4.56197648980619$.

首先计算上述四种格式 (FPAVF-P、FPAVF、FAVF 和 FPAVF-C 格式) 在 $T = 1, \alpha = 1.5$ 以及 $\alpha = 2.0$ 时的收敛阶, 见图 4.1-4.2. 很容易发现这四种格式在空间方向均具有谱精度, 而 FPAVF 格式在时间方向表现出一阶精度, 其他格式则表现出二阶精度.

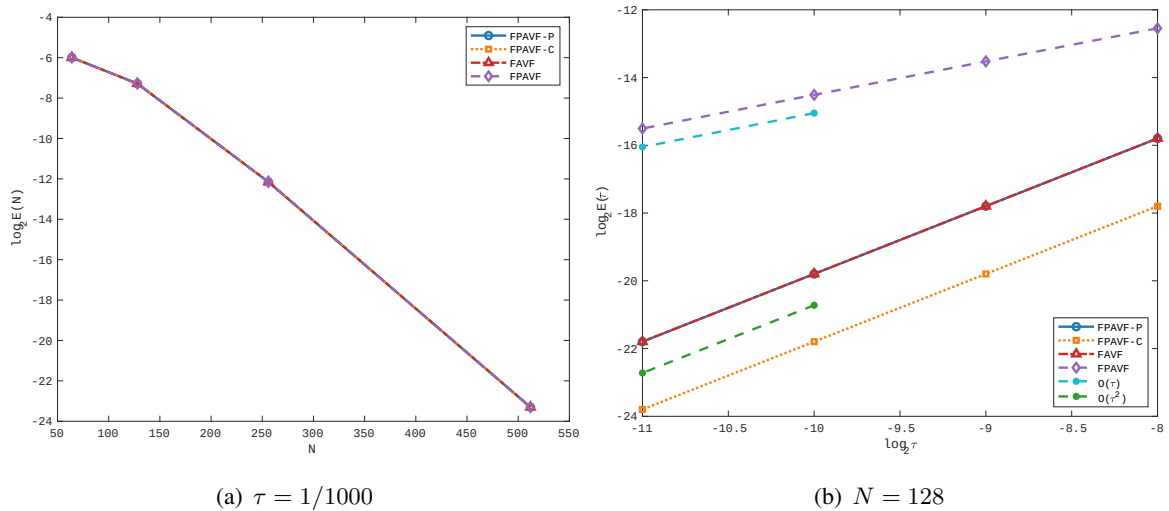


图 4.1 当 $\alpha = 1.5$ 时, 算例 4.1 中四种格式的收敛阶.

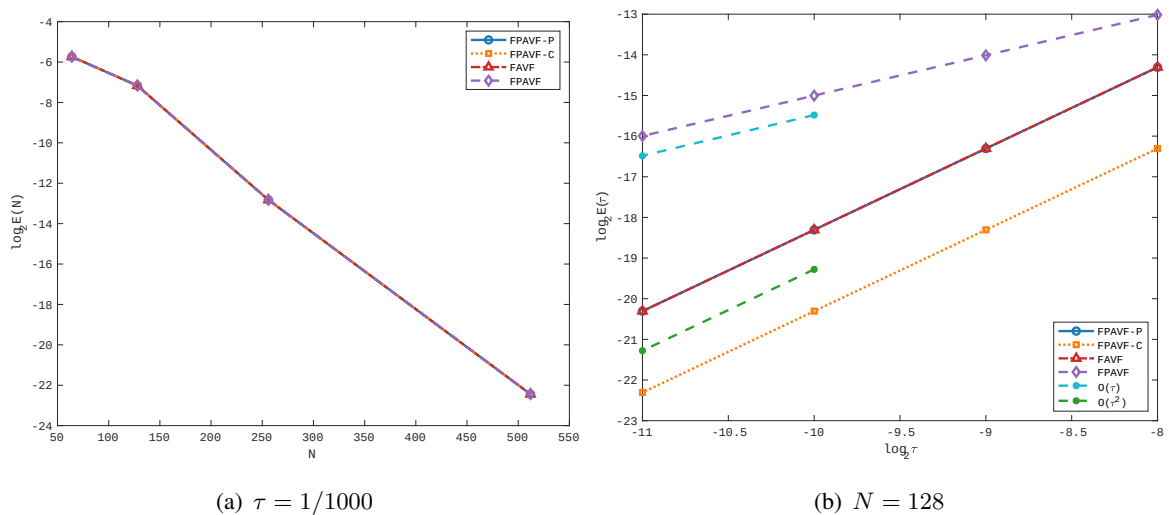


图 4.2 当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.1 中四种格式的收敛阶.

图 4.3 显示了几种格式在不同 α 值下, 通过 $N = 512$ 和 $\tau = 0.01$ 计算的离散能量演化情况 ($T=500$). 可以观察到, 特别是在 $\alpha = 2$ 时, FPAVF-P、FPAVF、FAVF 和 FPAVF-C 格式计算得到的离散能量均一致收敛到原始能量, 而 SAV 方法^[37] 和三层线性隐式差分格式 (Line-Impl)^[34] 的性能较差. 这一现象与后两者仅保持修正后的能量而不是原始能量的理论分析是一致的.

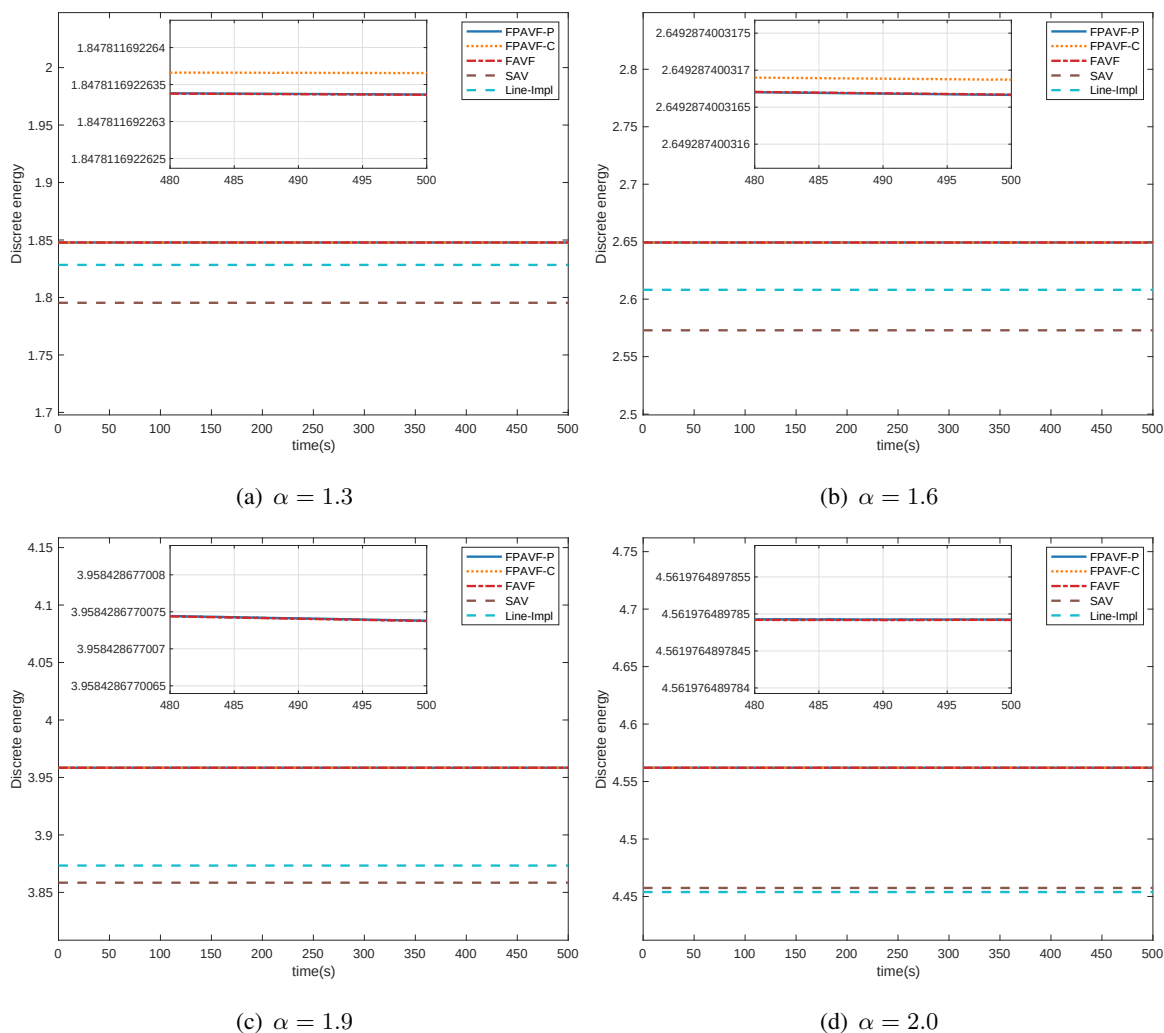
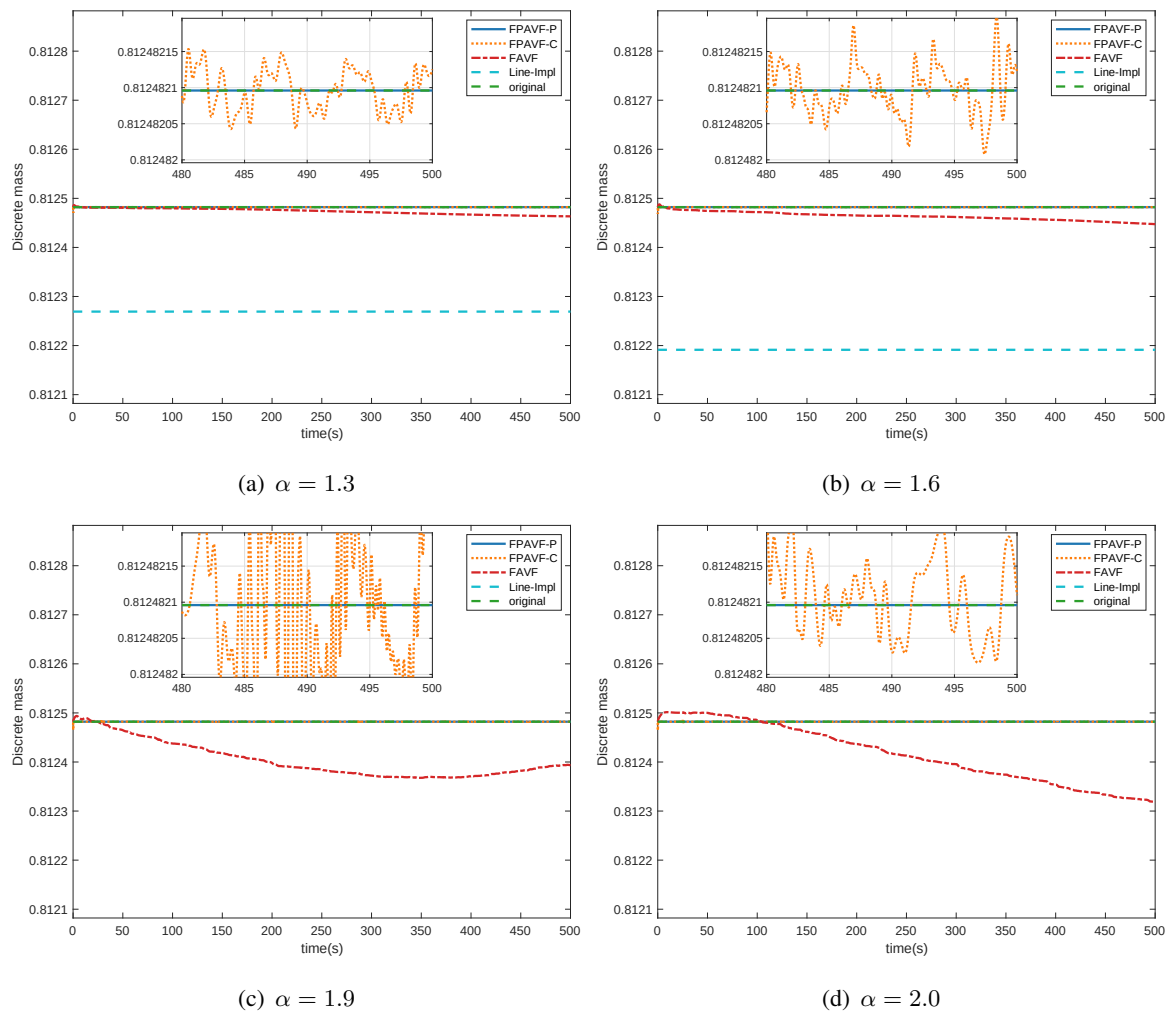


图 4.3 当 $N = 512$, $\tau = 0.01$, 算例 4.1 取不同 α 时的离散能量.

类似地, 图 4.4 显示了在不同 α 值下, 通过 $N = 512$ 和 $\tau = 0.01$ 计算的离散质量演化情况 ($T=500$). 需要强调的是 SAV 方法不具有质量守恒. 可以看到, FPAVF-P 格式收敛到原始质量, 其他方法的性能则相对较差, 特别是 FAVF 格式, 而三层线性隐式差分格式保持了修正后的质量. 此外, 基于 FPAVF-C 格式的离散质量显示出小幅度的频繁振荡.

图 4.4 当 $N = 512, \tau = 0.01$, 算例 4.1 取不同 α 时的离散质量.表 4.1 当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.1 在时刻 $t = t_m$ 的离散能量 H^m .

t	FAVF	FPAVF	FPAVF-C	SAV	Line-Impl	FPAVF-P
0	4.561976489785	4.561976489785	4.561976489785	4.457414815200	4.453861069486	4.561976489785
10	4.561976489785	4.561976489785	4.561976489785	4.457414815200	4.453861069486	4.561976489785
100	4.561976489785	4.561976489785	4.561976489782	4.457414815197	4.453861069489	4.561976489785
200	4.561976489785	4.561976489785	4.561976489779	4.457414815195	4.453861069492	4.561976489785
300	4.561976489785	4.561976489785	4.561976489776	4.457414815192	4.453861069494	4.561976489785
400	4.561976489785	4.561976489785	4.561976489772	4.457414815190	4.453861069497	4.561976489785
500	4.561976489785	4.561976489785	4.561976489768	4.457414815187	4.453861069500	4.561976489785

原始能量: 4.561976489806

更准确地说, 表 4.1-4.4 显示了在 $t = t_m$ 时取不同 α 下的离散能量 H^m 和离散质量 G^m 的值, 这些值是通过取 $N = 512$ 和 $\tau = 0.01$ 获得的. 从表 4.1 可以看出, 提出的四种

格式均保持了原始能量, 而 SAV 格式和三层线性隐式差分格式仅保持了修正后的能量. 类似地, 从表 4.2-4.4 观察到 FPAVF-P 格式收敛到原始质量, 其他方法性能较差, 而三层线性隐式差分格式仅保持了修正后的质量.

表 4.2 当 $\alpha = 1.3$ 时, 算例 4.1 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m .

t	FAVF	FPAVF	FPAVF-C	Line-Impl	FPAVF-P
0	0.81248 2096011643	0.81248 6108372853	0.81248 1093228288	0.812 269212105079	0.812482096009 232
10	0.81248 1652913507	0.81 5448411130831	0.81248 2228623069	0.812 269212105449	0.812482096009 234
100	0.81247 9701090339	0.81 5337307670638	0.81248 2081439882	0.812 269212105119	0.812482096009 236
200	0.81247 6755660814	0.81 5352772611703	0.81248 2091028916	0.812 269212105298	0.812482096009 256
300	0.81247 1706145304	0.81 5369448311709	0.81248 2102752682	0.812 269212105193	0.812482096009 262
400	0.81246 6871593141	0.81 5375406648485	0.81248 2112407629	0.812 269212105361	0.812482096009 263
500	0.81246 3332390332	0.81 5391313914498	0.81248 2125179718	0.812 269212105409	0.812482096009 261
原始质量: 0.812482096009503					

表 4.3 当 $\alpha = 1.6$ 时, 算例 4.1 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m .

t	FAVF	FPAVF	FPAVF-C	Line-Impl	FPAVF-P
0	0.81248 2096014526	0.81248 7932904355	0.81248 0637459791	0.812 191342790779	0.812482096009 232
10	0.81247 9542844467	0.81 5290680597744	0.81248 2338980161	0.812 191342790869	0.812482096009 234
100	0.81247 1993678066	0.81 4964610988901	0.81248 2077830270	0.812 191342790519	0.812482096009 245
200	0.81246 5076996841	0.81 4934135072654	0.81248 2168949170	0.812 191342790438	0.812482096009 252
300	0.81246 1964307183	0.81 5026734196011	0.81248 2132284732	0.812 191342790211	0.812482096009 255
400	0.81245 6227758388	0.81 5045189971354	0.81248 2132454783	0.812 191342790067	0.812482096009 255
500	0.81244 7472460440	0.81 5097180030255	0.81248 2122664758	0.812 191342789578	0.812482096009 251
原始质量: 0.812482096009503					

表 4.4 当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.1 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m .

t	FAVF	FPAVF	FPAVF-C	Line-Impl	FPAVF-P
0	0.81248 2096027426	0.81249 2566135382	0.81247 9480708946	0.812 007279829162	0.812482096009 232
10	0.81250 1574603936	0.81 5690689466538	0.81248 2208549750	0.812 007279829185	0.812482096009 233
100	0.81248 5179319911	0.81 5559529804266	0.81248 224295188	0.812 007279829068	0.812482096009 234
200	0.81243 6598720768	0.81 5737264057778	0.81248 2177481325	0.812 007279828906	0.812482096009 234
300	0.81239 5565737519	0.81 5914179675223	0.81248 2122649446	0.812 007279828999	0.812482096009 235
400	0.81235 3830841431	0.81 6227202656059	0.81248 2101787071	0.812 007279828969	0.812482096009 235
500	0.81231 7849493374	0.81 6336221770707	0.81248 2109657662	0.812 007279829037	0.812482096009 234
原始质量: 0.812482096009503					

对于 $\alpha \neq 2$ 的原始能量计算比较困难, 于是从相对误差的角度验证了离散守恒定律,

见图 4.5-4.6. 同样, 图中显示 FPAVF-P 格式在保持原始质量守恒方面具有最佳性能. 随着 α 的增加, 它在保持原始能量方面的性能将更好. 这些观察与之前的理论结果一致.

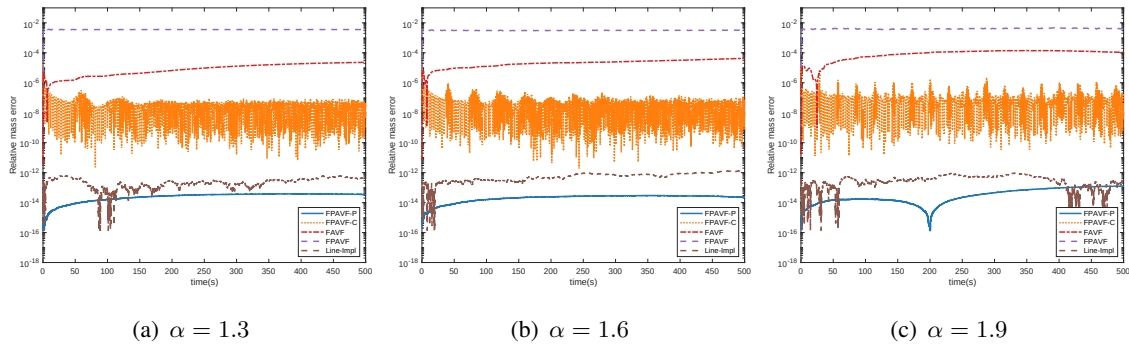


图 4.5 当 $N = 512, \tau = 0.01$ 时, 算例 4.1 取不同 α 时的相对质量误差.

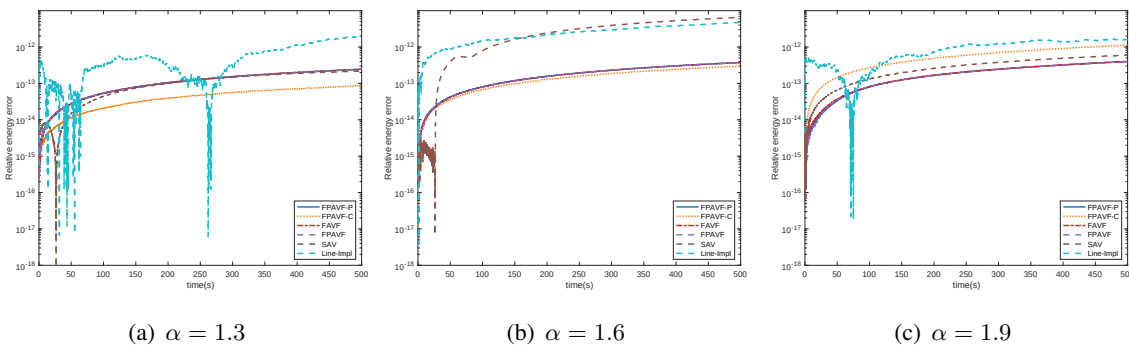


图 4.6 当 $N = 512, \tau = 0.01$, 算例 4.1 取不同 α 时的相对能量误差.

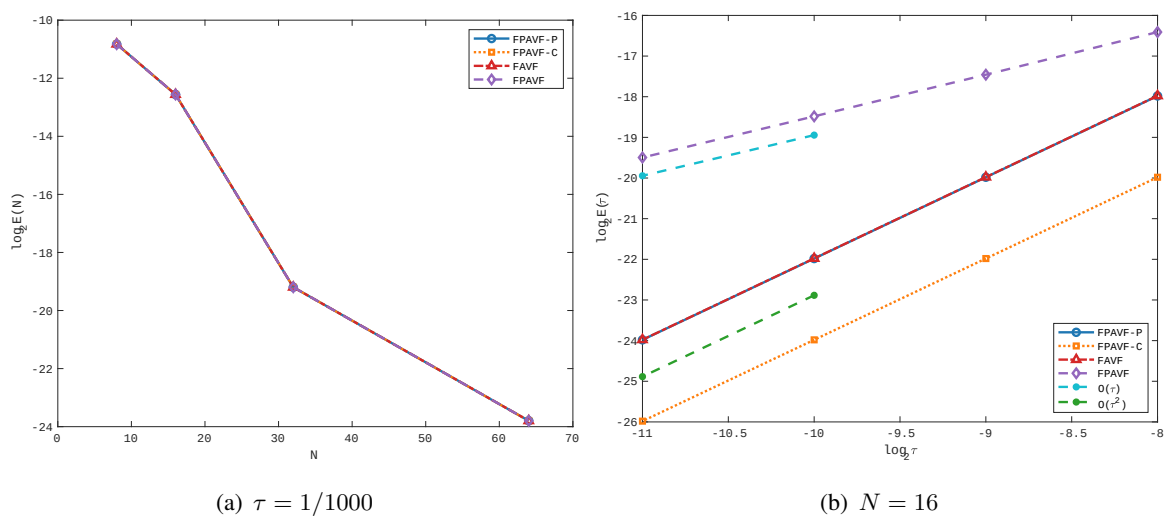


图 4.7 当 $\alpha = 1.5$ 时, 算例 4.2 中四种格式的收敛阶.

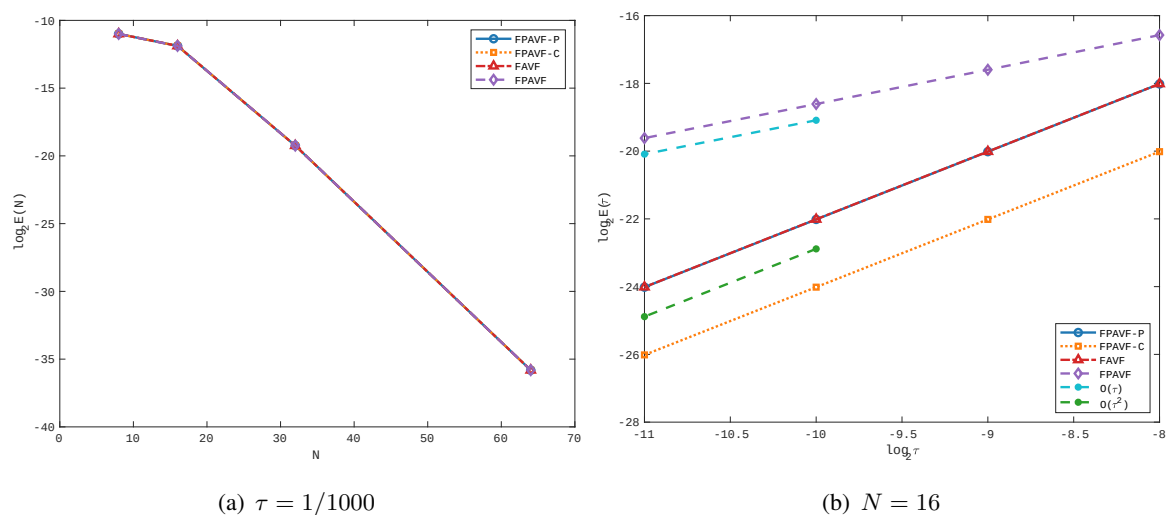


图 4.8 当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.2 中四种格式的收敛阶.

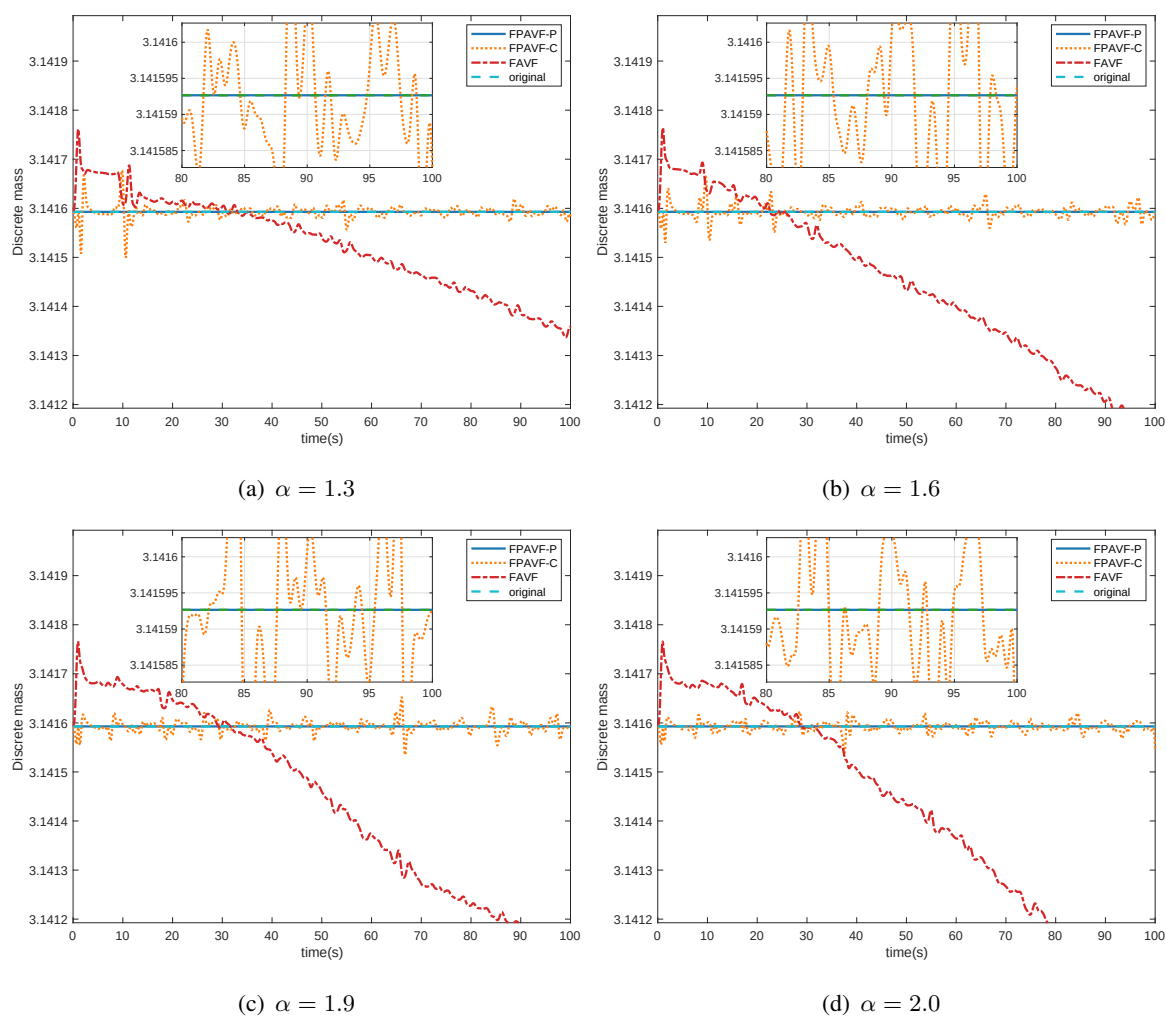


图 4.9 当 $N = 64, \tau = 0.01$, 算例 4.2 取不同 α 时的离散质量.

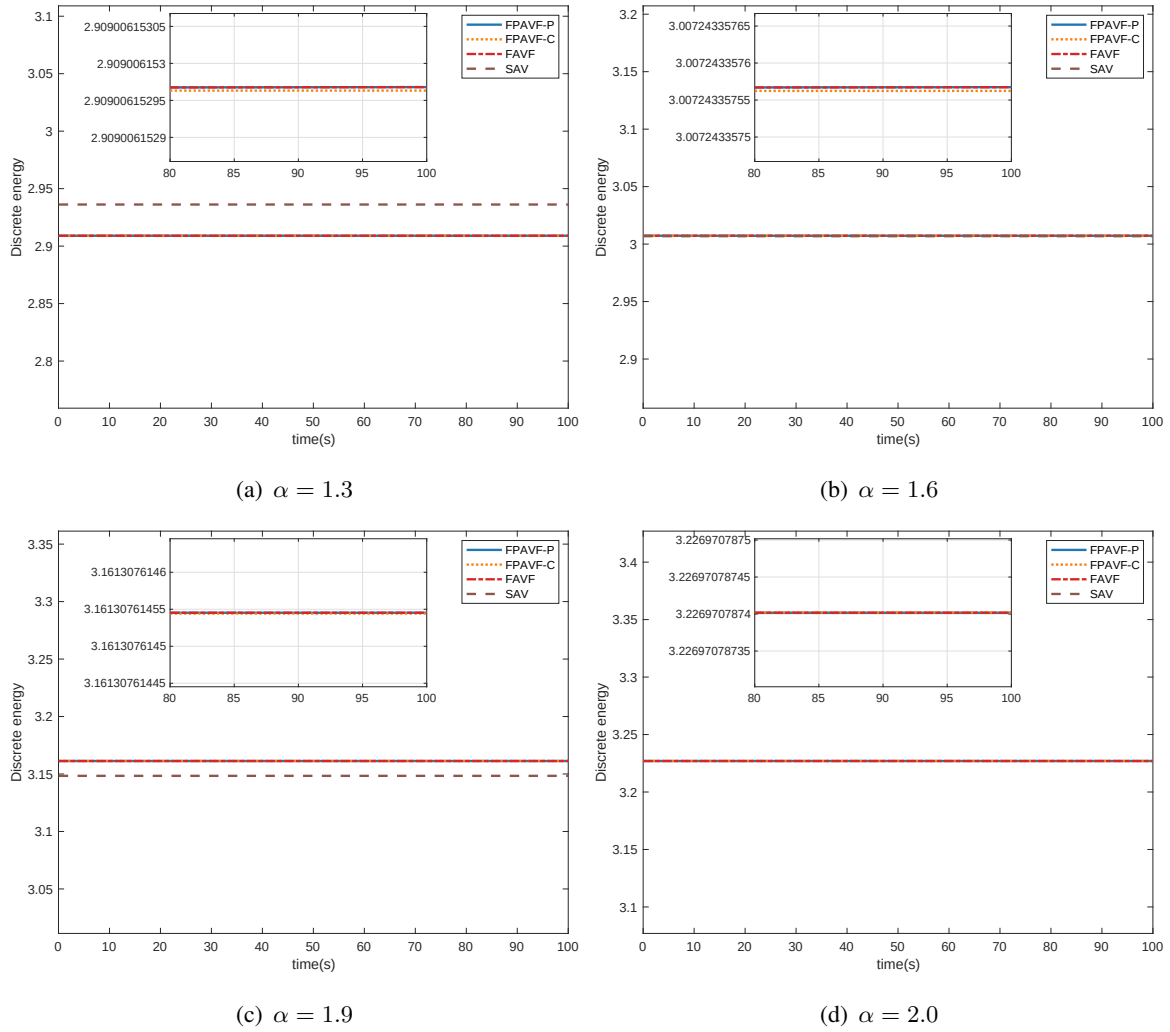


图 4.10 当 $N = 64, \tau = 0.01$, 算例 4.2 取不同 α 时的离散能量.

算例 4.2. 考虑如下二维 NFSWEs

$$u_{tt} + (-\Delta)^{\alpha/2} u + iu_t + |u|^2 u = 0, \quad (x, y, t) \in \Omega \times [0, T], \quad (4.86)$$

初值条件为

$$\begin{aligned} u(x, y, 0) &= \operatorname{sech}(x^2 + y^2), \\ u_t(x, y, 0) &= \sin(x + y) \operatorname{sech}(-2(x^2 + y^2)), \end{aligned} \quad (4.87)$$

其中 $\Omega = [-5, 5] \times [-5, 5]$.

与一维情况类似, 首先计算 FPAVF-P、FPAVF、FAVF 和 FPAVF-C 格式在 $\alpha = 1.5$ 和 $\alpha = 2.0$ 时的收敛阶. 如图 4.7-4.8 所示, 这四种格式在空间方向上均具有谱精度, 而 FPAVF 格式在时间方向上只有一阶精度, 其他格式在时间方向则表现出二阶精度. 注意到原始质量 $G(t)$ 与 α 无关, 通过高斯数值积分, 得到原始质量 $G(0) = 3.14159265323701$. 类似地, 可以得到 $\alpha = 2$ 时的原始能量 $E(0) = 3.22697078976648$.

与一维问题不同, 二维情况下没有三层线性隐式格式, 因此只比较了 SAV 方法与本章提出的 FPAVF-P、FAVF 和 FPAVF-C 格式的性能. 图 4.9-4.10 中展示了在不同 α 下通过 $N = 64$ 和 $\tau = 0.01$ 计算的离散质量和离散能量 ($T=100$). 更加详细的比较结果见表 4.5-4.8, 观察这些数据, 可得到与一维问题同样符合理论分析的结果.

表 4.5 当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.2 在时刻 $t = t_m$ 的离散能量 H^m .

t	FAVF	FPAVF	FPAVF-C	SAV	FPAVF-P
0	3.22697078740176	3.22697078740176	3.22697078740173	3.21234862767094	3.22697078740176
10	3.22697078740176	3.22697078740176	3.22697078740168	3.21234862767062	3.22697078740176
20	3.22697078740176	3.22697078740176	3.22697078740172	3.21234862767066	3.22697078740176
40	3.22697078740175	3.22697078740176	3.22697078740182	3.21234862767033	3.22697078740176
60	3.22697078740176	3.22697078740176	3.22697078740191	3.21234862767035	3.22697078740176
80	3.22697078740176	3.22697078740175	3.22697078740199	3.21234862767073	3.22697078740176
100	3.22697078740175	3.22697078740176	3.22697078740207	3.21234862767045	3.22697078740176
原始能量: 3.22697078976648					

表 4.6 当 $\alpha = 1.3$ 时, 算例 4.2 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m .

t	FAVF	FPAVF	FPAVF-C	FPAVF-P
0	3.14159297667455	3.14159361842152	3.14159241227909	3.14159265358976
10	3.14160952253933	3.13595374862870	3.14166505643569	3.14159265358963
20	3.14161343543099	3.14421089321261	3.14158965037808	3.14159265358952
40	3.14157539023564	3.14362067013654	3.14159917106759	3.14159265358932
60	3.14150249358846	3.14217508702013	3.14159868539556	3.14159265358912
80	3.14143174175214	3.14159826267015	3.14158946625201	3.14159265358895
100	3.14135672071641	3.14328710863969	3.14158227319751	3.14159265358880
原始质量: 3.14159265323701				

表 4.7 当 $\alpha = 1.6$ 时, 算例 4.2 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m .

t	FAVF	FPAVF	FPAVF-C	FPAVF-P
0	3.14159297668940	3.14159361814729	3.14159241218683	3.14159265358976
10	3.14163389358031	3.13754191888209	3.14160072631792	3.14159265358928
20	3.14161716177523	3.14433222488425	3.14159044899067	3.14159265358919
40	3.14149554093894	3.14475213344308	3.14160500647197	3.14159265358901
60	3.14139997924855	3.14288256207779	3.14160023436812	3.14159265358885
80	3.14127488637752	3.14241392600216	3.14158768432513	3.14159265358871
100	3.14115287766347	3.14489331385338	3.14159412822417	3.14159265358860
原始质量: 3.14159265323701				

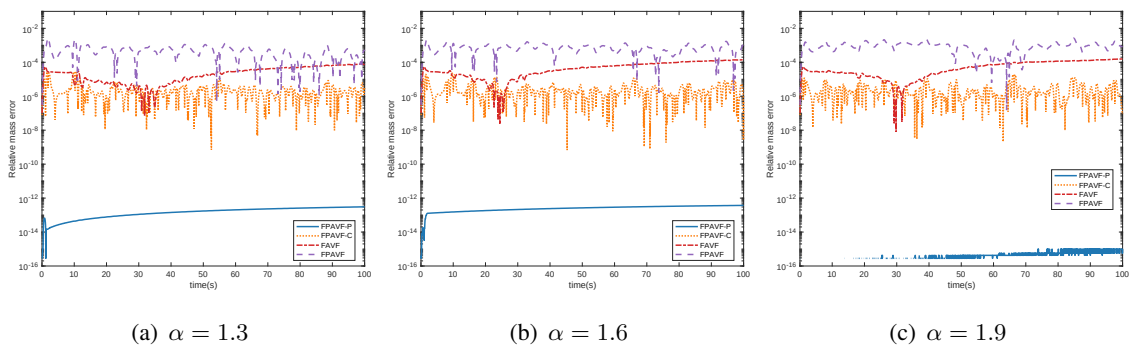
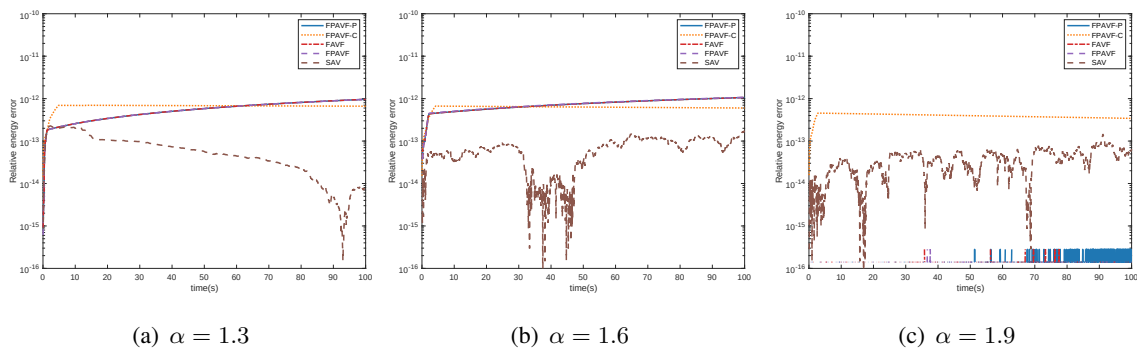
表 4.8 当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.2 在时刻 $t = t_m$ 的离散质量 G^m .

t	FAVF	FPAVF	FPAVF-C	FPAVF-P
0	3.14159297725470	3.14159361919902	3.14159241149324	3.14159265358976
10	3.14168000260412	3.14369215006721	3.14160070161208	3.14159265358976
20	3.14164544531849	3.14521250122401	3.14158745249453	3.14159265358976
40	3.14150535695500	3.14531702832209	3.14160031804829	3.14159265358976
60	3.14136438511727	3.14552013864766	3.14159560564481	3.14159265358976
80	3.14118013227991	3.14739329967543	3.14158800109644	3.14159265358976
100	3.14101125059928	3.15011874273391	3.14154787019595	3.14159265358976

原始质量: 3.14159265323701

图 4.11 中记录了相对质量误差随时间的变化. 可以观察到, FPAVF-P 格式在原始质量上收敛得很好, 其他三种方法性能较差, 尤其是 FAVF 格式和 FPAVF 格式 (FPAVF 格式的结果未显示, 因为它更为糟糕).

此外, 从图 4.12 中相对能量误差随时间的变化可以看出, 本章提出的三种格式都能很好地保持原始能量, 而 SAV 方法只能保持修正的能量. 这些现象再次验证了理论结果的正确性.

图 4.11 当 $N = 64, \tau = 0.01$, 算例 4.2 取不同 α 时的相对质量误差.图 4.12 当 $N = 64, \tau = 0.01$, 算例 4.2 取不同 α 时的相对能量误差.

最后, 分别在图 4.13-4.16 中展示了 $\alpha = 1.3, 1.6, 1.99, 2$ 时二维非线性分数阶薛定谔波动方程的演化过程 (取 $N = 128, \tau = 0.01$). 可以观察到, 阶数 α 将显著影响波的形状, 当 α 变大时, 波的形状变化更快. 特别地, 当 $\alpha \rightarrow 2$ 时, 数值解收敛到整数阶非线性薛定谔波动方程 [15, 24, 25].

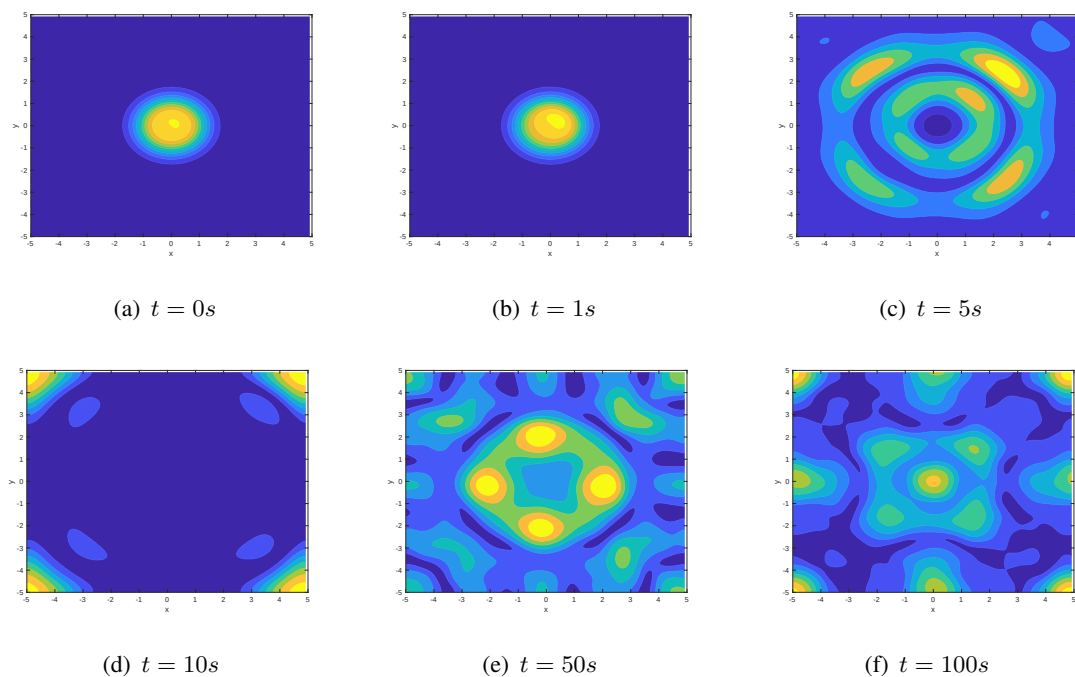


图 4.13 当 $\alpha = 1.3$ 时, 算例 4.2 的波传播图.

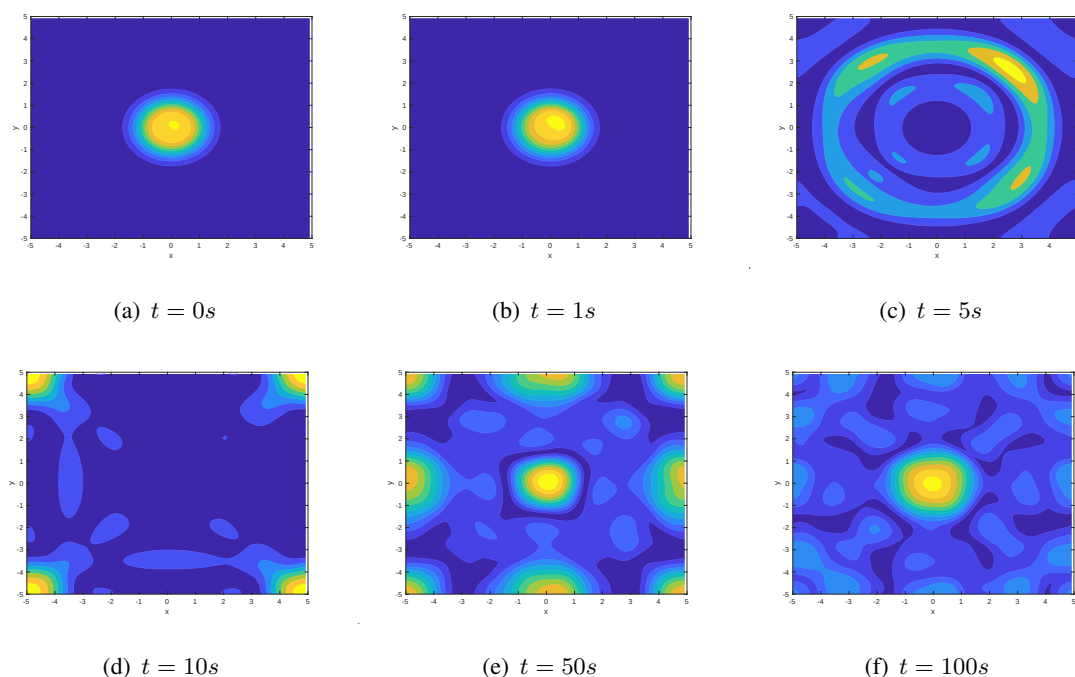
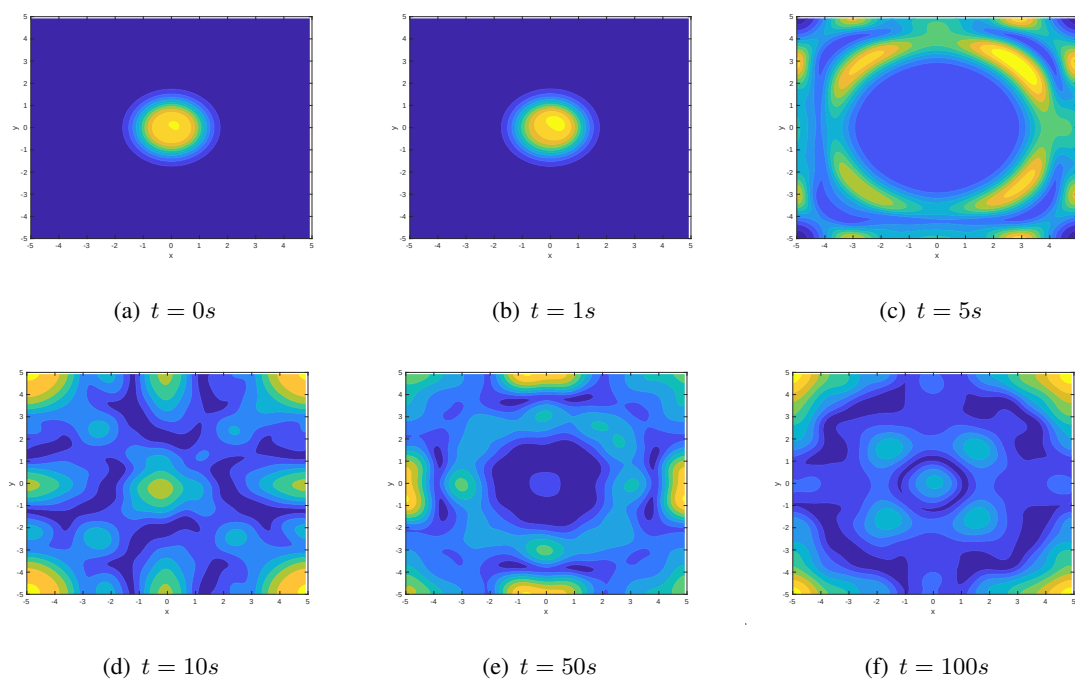
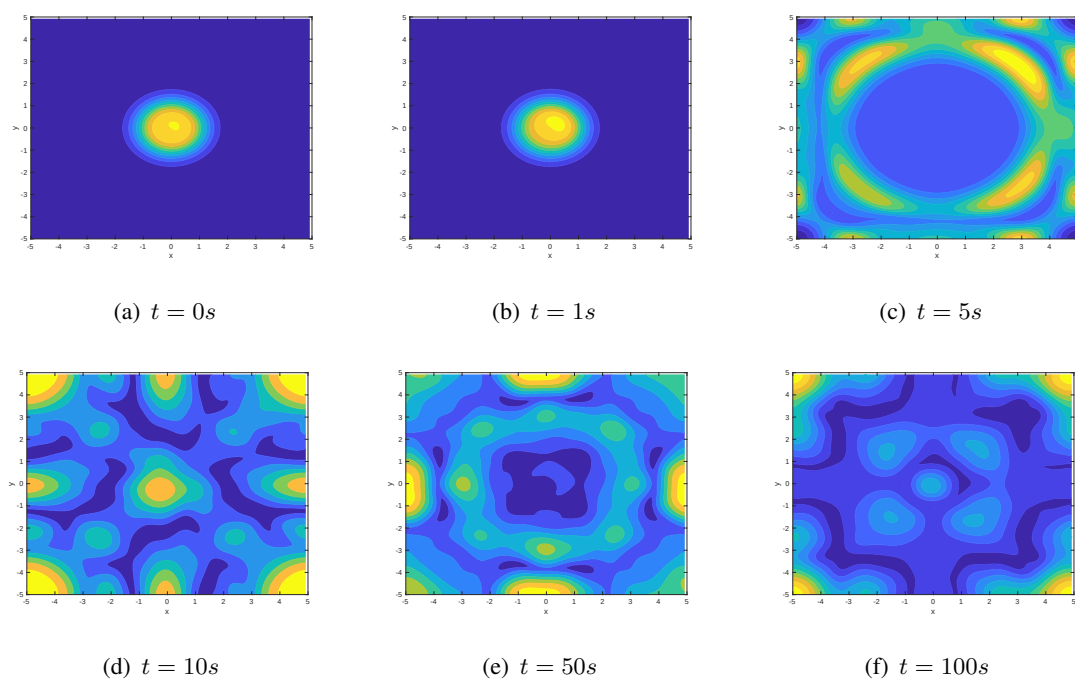


图 4.14 当 $\alpha = 1.6$ 时, 算例 4.2 的波传播图.

图 4.15 当 $\alpha = 1.99$ 时, 算例 4.2 的波传播图.图 4.16 当 $\alpha = 2.0$ 时, 算例 4.2 的波传播图.

4.6 小结

在本章中, 首先推导出了非线性分数阶薛定谔波动方程的哈密顿系统, 基于等价的哈密顿系统, 通过将改进的分区平均向量场方法与傅里叶拟谱方法结合构建了一个保结构数值格式. 理论分析和数值结果表明, 所提出的方法能够有效地保持原始能量和质量.

5 总结与展望

5.1 本文总结

针对具有周期性边界的 NFSWEs 初边值问题, 本文提出了两类新的保结构数值方法: SAV-RRK 方法和 PAVF-P 方法. SAV-RRK 方法是显式格式, 且具有任意高阶时间精度, 弥补了现有保结构方法在时间精度上未能超过二阶甚至是完全隐式的不足. 该思想也被推广用于数值求解分数阶 Klein-Gordon-Schrödinger 方程等类似方程, 展示了其普适性. PAVF-P 方法能够同时保持连续系统的原始能量和质量守恒, 有效克服了现有方法仅能守恒修正后能量或质量的局限性. 数值实验结果表明这两类方法在长时间数值仿真中具有良好的适用性.

5.2 研究展望

在本文的基础上及研究过程中, 发现存在以下改进空间:

- (1) 边界条件的多样性: 本文仅考虑了具有周期性边界条件的问题, 后续研究可考虑将其扩展至包括 Dirichlet、Neumann 及混合型边界条件, 以增强数值方法的通用性和适应性.
- (2) 稳定性与收敛性分析: 本文主要关注守恒性的研究, 在稳定性与收敛性方面的分析尚显不足. 后续研究将重点对提出的数值方法进行深入的稳定性与收敛性分析, 以增强结果的可信度和实施的有效性.
- (3) 空间离散精度的影响: 本文主要集中于对时间离散的精度分析, 尚未充分探讨空间离散精度是否会对数值结果产生影响. 未来的工作将评估不同精度的空间离散方法对数值解的影响, 以期对数值方法的准确性和稳定性进行更加全面的评估.

参考文献

- [1] Samko S G, Kilbas A A, Marichev O I. Fractional Integrals and Derivatives[M]. Gordon and Breach Science Publishers, Yverdon, 1993.
- [2] Introduction to Fractional Calculus[M]. Chapman and Hall/CRC, 2015: 19-46.
- [3] Handbook of Differential Equations - Stationary Partial Differential Equations[M]. Elsevier, 2008.
- [4] Indefinite Integrals[M]. Chapman and Hall/CRC, 2008: 121-130.
- [5] Zhang X, Crawford J W, Deeks L K, et al. A mass balance based numerical method for the fractional advection-dispersion equation: Theory and application[J]. Water Resour Res, 2005, 41(7): 1-10.
- [6] Carreras B A, Lynch V E, Zaslavsky G M. Anomalous diffusion and exit time distribution of particle tracers in plasma turbulence model[J]. Phys Plasmas, 2001, 8(12): 5096-5103.
- [7] Magin R, Feng X, Baleanu D. Solving the fractional order Bloch equation[J]. Concept Magn Reson A, 2009, 34A(1): 16-23.
- [8] Zaslavsky G M, Stevens D, Weitzner H. Self-similar transport in incomplete chaos[J]. Phys Rev E, 1993, 48(3): 1683-1694.
- [9] Sun H, Chen Y, Chen W. Random-order fractional differential equation models[J]. Signal Process, 2011, 91(3): 525-530.
- [10] Tsutsumi M. Nonrelativistic approximation of nonlinear Klein-Gordon equations in two space dimensions[J]. Nonlinear Anal - Theor, 1984, 8(6): 637-643.
- [11] Machihara S, Nakanishi K, Ozawa T. Nonrelativistic limit in the energy space for nonlinear Klein-Gordon equations[J]. Math Ann, 2002, 322(3): 603-621.
- [12] Colin T, Fabrie P. Semidiscretization in time for nonlinear Schrödinger-waves equations[J]. Discrete Cont Dyn-A, 1998, 4(4): 671-690.
- [13] Bao W, Dong X, Xin J. Comparisons between sine-Gordon and perturbed nonlinear Schrödinger equations for modeling light bullets beyond critical collapse[J]. Phys D: Nonlinear Phenom, 2010, 239(13): 1120-1134.
- [14] Xin J. Modeling light bullets with the two-dimensional sine-Gordon equation[J]. Phys D: Nonlinear Phenom, 2000, 135(3-4): 345-368.
- [15] Zhang L, Chang Q. A conservative numerical scheme for a class of nonlinear Schrödinger equation with wave operator[J]. Appl Math Comput, 2003, 145(2): 603-612.
- [16] Bao W, Cai Y. Uniform Error Estimates of Finite Difference Methods for the Nonlinear Schrödinger Equation with Wave Operator[J]. SIAM J Numer Anal, 2012, 50(2): 492-521.
- [17] Cheng X, Wu F. Several conservative compact schemes for a class of nonlinear Schrödinger equations with wave operator[J]. Bound Value Probl, 2018, 2018(1): 1-17.
- [18] Brugnano L, Zhang C, Li D. A class of energy-conserving Hamiltonian boundary value methods for nonlinear Schrödinger equation with wave operator[J]. Commun Nonlinear Sci, 2018, 60: 33-49.
- [19] Li S, Vu-Quoc L. Finite Difference Calculus Invariant Structure of a Class of Algorithms for the Nonlinear Klein-Gordon Equation[J]. SIAM J Numer Anal, 1995, 32(6): 1839-1875.
- [20] 冯康, 秦孟兆. Hamilton 动力体系的 Hamilton 算法[J]. 自然科学进展, 1991, 1(2): 102-112.

- [21] Karakashian O, Makridakis C. A space-time finite element method for the nonlinear Schrödinger equation: The discontinuous Galerkin method[J]. *Math Comput*, 1998, 67(222): 479-499.
- [22] Zhang R, Yu X, Li M, et al. A conservative local discontinuous Galerkin method for the solution of nonlinear Schrödinger equation in two dimensions[J]. *Sci China Math*, 2017, 60(12): 2515-2530.
- [23] Gong Y, Wang Q, Wang Y, et al. A conservative Fourier pseudo-spectral method for the nonlinear Schrödinger equation[J]. *J Comput Phys*, 2017, 328: 354-370.
- [24] Wang T c, Zhang L m. Analysis of some new conservative schemes for nonlinear Schrödinger equation with wave operator[J]. *Appl Math Comput*, 2006, 182(2): 1780-1794.
- [25] Li X, Zhang L, Wang S. A compact finite difference scheme for the nonlinear Schrödinger equation with wave operator[J]. *Appl Math Comput*, 2012, 219(6): 3187-3197.
- [26] Wang S, Zhang L, Fan R. Discrete-time orthogonal spline collocation methods for the nonlinear Schrödinger equation with wave operator[J]. *J Comput Appl Math*, 2011, 235(8): 1993-2005.
- [27] Guo L, Xu Y. Energy Conserving Local Discontinuous Galerkin Methods for the Nonlinear Schrödinger Equation with Wave Operator[J]. *J Sci Comput*, 2015, 65(2): 622-647.
- [28] Wang D, Xiao A, Yang W. Crank–Nicolson difference scheme for the coupled nonlinear Schrödinger equations with the Riesz space fractional derivative[J]. *J Comput Phys*, 2013, 242: 670-681.
- [29] Wang D, Xiao A, Yang W. A linearly implicit conservative difference scheme for the space fractional coupled nonlinear Schrödinger equations[J]. *J Comput Phys*, 2014, 272: 644-655.
- [30] Ran M, Zhang C. A conservative difference scheme for solving the strongly coupled nonlinear fractional Schrödinger equations[J]. *Commun Nonlinear Sci*, 2016, 41: 64-83.
- [31] Wang P, Huang C. An energy conservative difference scheme for the nonlinear fractional Schrödinger equations[J]. *J Comput Phys*, 2015, 293: 238-251.
- [32] Wang P, Huang C. A conservative linearized difference scheme for the nonlinear fractional Schrödinger equation[J]. *Numer Algorithms*, 2015, 69(3): 625-641.
- [33] Wang Y, Mei L, Li Q, et al. Split-step spectral Galerkin method for the two-dimensional nonlinear space-fractional Schrödinger equation[J]. *Appl Numer Math*, 2019, 136: 257-278.
- [34] Ran M, Zhang C. A linearly implicit conservative scheme for the fractional nonlinear Schrödinger equation with wave operator[J]. *Int J Comput Math*, 2016, 93(7): 1103-1118.
- [35] Li M, Zhao Y L. A fast energy conserving finite element method for the nonlinear fractional Schrödinger equation with wave operator[J]. *Appl Math Comput*, 2018, 338: 758-773.
- [36] Pan K, Zeng J, He D, et al. A fourth-order difference scheme for the fractional nonlinear Schrödinger equation with wave operator[J]. *Appl Anal*, 2022, 101(8): 2886-2902.
- [37] Cheng X, Qin H, Zhang J. Convergence of an energy-conserving scheme for nonlinear space fractional Schrödinger equations with wave operator[J]. *J Comput Appl Math*, 2022, 400: 113762.
- [38] Hu D, Cai W, Gu X M, et al. Efficient energy preserving Galerkin–Legendre spectral methods for fractional nonlinear Schrödinger equation with wave operator[J]. *Appl Numer Math*, 2022, 172: 608-628.
- [39] Zhang X, Ran M, Liu Y, et al. A high-order structure-preserving difference scheme for generalized fractional Schrödinger equation with wave operator[J]. *Math Comput Simulat*, 2023, 210: 532-546.
- [40] Ketcheson D I. Relaxation Runge–Kutta Methods: Conservation and Stability for Inner-Product Norms [J]. *SIAM J Numer Anal*, 2019, 57(6): 2850-2870.
- [41] Ranocha H, Ketcheson D I. Relaxation Runge–Kutta Methods for Hamiltonian Problems[J]. *J Sci*

- Comput, 2020, 84(1): 17.
- [42] Yang X, Ju L. Linear and unconditionally energy stable schemes for the binary fluid–surfactant phase field model[J]. *Comput Method Appl M*, 2017, 318: 1005-1029.
- [43] Yang X, Ju L. Efficient linear schemes with unconditional energy stability for the phase field elastic bending energy model[J]. *Comput Method Appl M*, 2017, 315: 691-712.
- [44] Zhao J, Wang Q, Yang X. Numerical approximations for a phase field dendritic crystal growth model based on the invariant energy quadratization approach[J]. *Int J Numer Meth Eng*, 2017, 110(3): 279-300.
- [45] Shen J, Xu J, Yang J. The scalar auxiliary variable (SAV) approach for gradient flows[J]. *J Comput Phys*, 2018, 353: 407-416.
- [46] Liu Z, Li X. The Exponential Scalar Auxiliary Variable (E-SAV) Approach for Phase Field Models and Its Explicit Computing[J]. *SIAM J Sci Comput*, 2020, 42(3): B630-B655.
- [47] Cheng Q, Shen J. Multiple Scalar Auxiliary Variable (MSAV) Approach and its Application to the Phase-Field Vesicle Membrane Model[J]. *SIAM J Sci Comput*, 2018, 40(6): A3982-A4006.
- [48] Chen C, Yang X. Efficient numerical scheme for a dendritic solidification phase field model with melt convection[J]. *J Comput Phys*, 2019, 388: 41-62.
- [49] Yang X, Zhang G D. Convergence Analysis for the Invariant Energy Quadratization (IEQ) Schemes for Solving the Cahn–Hilliard and Allen–Cahn Equations with General Nonlinear Potential[J]. *J Sci Comput*, 2020, 82(3): 1-28.
- [50] Cheng Q, Shen J, Yang X. Highly Efficient and Accurate Numerical Schemes for the Epitaxial Thin Film Growth Models by Using the SAV Approach[J]. *J Sci Comput*, 2019, 78(3): 1467-1487.
- [51] Gong Y, Zhao J, Wang Q. Arbitrarily high-order unconditionally energy stable SAV schemes for gradient flow models[J]. *Comput Phys Commun*, 2020, 249: 107033.
- [52] Budd C, Iserles A, McLachlan R I, et al. Geometric integration using discrete gradients[J]. *Philos T R Soc A*, 1999, 357(1754): 1021-1045.
- [53] Quispel G R W, McLaren D I. A new class of energy-preserving numerical integration methods[J]. *J Phys A: Math Theor*, 2008, 41(4): 045206.
- [54] Cai W, Li H, Wang Y. Partitioned averaged vector field methods[J]. *J Comput Phys*, 2018, 370: 25-42.
- [55] Wang P, Huang C. Structure-preserving numerical methods for the fractional Schrödinger equation[J]. *Appl Numer Math*, 2018, 129: 137-158.
- [56] Fu Y, Cai W, Wang Y. Structure-preserving algorithms for the two-dimensional fractional Klein-Gordon-Schrödinger equation[J]. *Appl Numer Math*, 2020, 156: 77-93.
- [57] 孙志忠, 高广花. 分数阶微分方程的有限差分方法[M]. 2 版. 北京: 科学出版社, 2021.
- [58] Yang Q, Liu F, Turner I. Numerical methods for fractional partial differential equations with Riesz space fractional derivatives[J]. *Appl Math Model*, 2010, 34(1): 200-218.
- [59] Demengel F, Demengel G. *Universitext: Functional Spaces for the Theory of Elliptic Partial Differential Equations*[M]. London: Springer, 2012.
- [60] Deng W. Finite element method for the space and time fractional Fokker–Planck equation[J]. *SIAM J Numer Anal*, 2009, 47(1): 204-226.
- [61] Ervin V J, Heuer N, Roop J P. Numerical approximation of a time dependent, nonlinear, Space-Fractional diffusion equation[J]. *SIAM J Numer Anal*, 2007, 45(2): 572-591.
- [62] Xu Q, Hesthaven J S. Discontinuous galerkin method for fractional convection-diffusion equations[J].

- SIAM J Numer Anal, 2014, 52(1): 405-423.
- [63] Zayernouri M, Karniadakis G E. Fractional spectral collocation method[J]. SIAM J Sci Comput, 2014, 36(1): A40-A62.
- [64] Zeng F, Liu F, Li C, et al. A Crank–Nicolson ADI spectral method for a two-dimensional Riesz space fractional nonlinear reaction-diffusion equation[J]. SIAM J Numer Anal, 2014, 52(6): 2599-2622.
- [65] Chen M, Deng W. Fourth order accurate scheme for the space fractional diffusion equations[J]. SIAM J Numer Anal, 2014, 52(3): 1418-1438.
- [66] Meerschaert M M, Tadjeran C. Finite difference approximations for fractional advection–dispersion flow equations[J]. J Comput Appl Math, 2004, 172(1): 65-77.
- [67] Du Q, Gunzburger M, Lehoucq R B, et al. Analysis and approximation of nonlocal diffusion problems with volume constraints[J]. SIAM Rev, 2012, 54(4): 667-696.
- [68] Ding H, Li C, Chen Y. High-order algorithms for Riesz derivative and their applications (II)[J]. J Comput Phys, 2015, 293: 218-237.
- [69] Zhang Y, Ding H, Luo J. Fourth-Order Compact Difference Schemes for the Riemann-Liouville and Riesz Derivatives[J]. Abstr Appl Anal, 2014, 2014: 1-4.
- [70] Gao T, Duan J, Li X, et al. Mean exit time and escape probability for dynamical systems driven by Lévy noises[J]. SIAM J Sci Comput, 2014, 36(3): A887-A906.
- [71] Huang Y, Oberman A. Numerical methods for the fractional Laplacian: A finite difference-quadrature approach[J]. SIAM J Numer Anal, 2014, 52(6): 3056-3084.
- [72] Guo B, Pu X, Huang F. Fractional Partial Differential Equations and Their Numerical Solutions[M]. World Scientific, 2015.
- [73] 张晓. Matlab 微分方程高效解法: 谱方法原理与实现[M]. 北京: 机械工业出版社, 2015.
- [74] Caffarelli L, Silvestre L. An Extension Problem Related to the Fractional Laplacian[J]. Commun Part Diff Eq, 2007, 32(8): 1245-1260.
- [75] Guo B, Han Y, Xin J. Existence of the global smooth solution to the period boundary value problem of fractional nonlinear Schrödinger equation[J]. Appl Math Comput, 2008, 204(1): 468-477.
- [76] Hairer E, Wanner G. Runge–Kutta Methods, Explicit, Implicit[M]. Berlin, Heidelberg: Springer, 2015: 1282-1285.
- [77] Li D, Li X, Zhang Z. Implicit-explicit relaxation Runge-Kutta methods: Construction, analysis and applications to PDEs[J]. Math Comput, 2022, 92(339): 117-146.
- [78] Ranocha H, Lóczy L, Ketcheson D I. General relaxation methods for initial-value problems with application to multistep schemes[J]. Numer Math, 2020, 146(4): 875-906.
- [79] Shu C W, Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes [J]. J Comput Phys, 1988, 77(2): 439-471.
- [80] Wang N, Li M, Huang C. Unconditional Energy Dissipation and Error Estimates of the SAV Fourier Spectral Method for Nonlinear Fractional Generalized Wave Equation[J]. J Sci Comput, 2021, 88(1): 19.