

# 一类带波算子的非线性薛定谔方程的能量守恒哈密顿边值方法

作者: Luigi Brugnano Chengjian ZhangDongfang Li

- 一类带波算子的非线性薛定谔方程的能量守恒哈密顿边值方法
  - 摘要
  - 1. 简介
  - 2. 空间中的傅里叶展开
  - 3. Fourier-Galerkin 空间半离散化
  - 4. 哈密顿边值法
  - 5. 数值算例
  - 6. Conclusions
  - 参考

## 摘要

在本文中，我们研究了非线性薛定谔方程在周期性边界条件下的波算子的有效解。在这种情况下，已知其解决方案保留了相关的功能。通过在空间中使用傅里叶展开，问题首先被转化为哈密顿形式，具有相同的哈密顿泛函。

Fourier-Galerkin 空间半离散化然后提供了一个大尺寸的哈密顿 ODE 问题，其时间解是通过 HBVM 类中的能量守恒方法（哈密顿边界值方法）进行的。还考虑了针对所产生问题的方法的有效实施，并报告了一些数值示例。

关键词: 非线性薛定谔方程 哈密顿问题 波算子 能量守恒法 哈密顿边值法

## 1. 简介

在本文中，我们使用波算子处理以下非线性薛定谔方程的数值解：

$$u_{tt}(x, t) - c^2 u_{xx}(x, t) + 2i\alpha u_t(x, t) + \beta(x) f'(|u(x, t)|^2) u(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \Omega := [a, b] \times [0, \infty) \quad (1.1)$$

其中，像往常一样，下标表示 *w. r. t.* 的偏导数。给定的变量。此外， $i$  是虚数单位， $\alpha$  和  $c \neq 0$  是实常数， $\beta$  和  $f$  是实函数，其中  $f'$  是  $f$  的导数。这种类型的方程在物理学中有许多不同的应用，例如 Klein-Gordon 方程的非相对论极限 [25,26,28]，等离子体物理学中的 Langmuir 波包络近似 [4]，平面光弹模型 [2,34] 等等。它一直是研究的主题，无论是从理论角度（例如，参见 [21]），而且最近还从数值的角度来看（例如，参见 [1,19,20,23,24,29-33]）。

我们在这里考虑方程(1.1) 的初始条件

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad u_t(x, 0) = v_0(x), \quad x \in [a, b], \quad \text{以及周期性边界条件.} \quad (1.2)$$

因此， $u_0$  和  $v_0$  都将被假定为周期函数，足够规则（作为周期函数）。我们还将假设  $\beta$  是周期性的并且适当地有规律，即使周期性不是严格需要的（参见下面的备注 3.2）。还假定  $f$  是适当的正则。由以下定理 2.1 可知，问题 (1.1) 和 (1.2) 的解守恒泛函：

$$\mathcal{H}[u](t) = \frac{1}{2} \int_a^b |u_t(x, t)|^2 + c^2 |u_x(x, t)|^2 + \beta(x) f(|u(x, t)|^2) dx \quad (1.3)$$

于是

$$\mathcal{H}[u](t) = \mathcal{H}[u](0), \quad \forall t \geq 0 \quad (1.4)$$

因此，守恒性质 (1.3) 和 (1.4) 对于此类问题的正确数值模拟很重要。例如，当  $\beta(x), f(\xi) > 0, x \in [a, b], \xi \geq 0$  时，(1.3) 的守恒意味着解决方案。反过来，这意味着解决方案的有界性，基于对  $\beta, f, u_0, v_0$  的规律性假设（参见例如 [33] 或下面的推论 2.1）。除此之外，哈密顿函数的守恒已被证明赋予数值解更多的鲁棒性（参见，例如，[3, 6]，分别用于非线性薛定谔方程和半线性波动方程）。出于这个原因，在本文中，我们关注问题 (1.1) 和 (1.2) 的数值解，同时精确地保留对 (1.3) 的

任意高阶近似。我们要强调的是，我们将在这里考虑在  $(1.1)x \in [a, b]$  中的情况（即  $1D$  情况），即使参数可以自然地扩展到  $x \in [a_1, b_1] \times \dots \times [a_d, b_d]$  的情况， $d \geq 1$ （在这种情况下， $u_{xx}$  变为  $\Delta u$ ）。

在这个前提下，论文的结构如下：在第 2 节中，我们将问题转化为实数形式，同时验证了守恒性质 (1.3) 和 (1.4)，此外，我们将问题转化为哈密顿形式，通过考虑空间中的傅立叶展开；接下来，在第 3 节中，我们考虑一个半离散问题，它相当于一个大尺寸的 ODE 哈密顿系统；在第 4 节中，我们概述了有关哈密顿边值方法 (HBVM) 的基本事实，我们将使用它在节省能量的同时及时解决问题，并解释其针对手头问题的有效实施的细节；在第 5 节中，我们收集了一些测试问题；最后，在第 6 节中，我们报告了一些结论性意见。

## 2. 空间中的傅里叶展开

首先，让我们以实际形式提出问题 (1.1) 和 (1.2)。通过设置

$$u(x, t) = \varphi(x, t) + i\psi(x, t), \quad u_0(x) = \varphi_0(x) + i\psi_0(x), \quad v_0(x) = \varphi_1(x) + i\psi_1(x), \quad (2.1)$$

所涉及函数的实部和虚部，我们看到 (1.1) 可以重写为

$$\begin{aligned} \varphi_{tt} - c^2 \varphi_{xx} - 2\alpha\psi_t + \beta(x)f'(\varphi^2 + \psi^2)\varphi &= 0 \\ \psi_{tt} - c^2 \psi_{xx} + 2\alpha\varphi_t + \beta(x)f'(\varphi^2 + \psi^2)\psi &= 0, \quad (x, t) \in \Omega \end{aligned} \quad (2.2)$$

此后，为了简洁起见，我们经常避免明确提及参数  $(x, t)$ 。最后，初始条件 (1.2) 变为

$$\varphi(x, 0) = \varphi_0(x), \quad \psi(x, 0) = \psi_0(x), \quad \varphi_t(x, 0) = \varphi_1(x), \quad \psi_t(x, 0) = \psi_1(x), \quad x \in [a, b] \quad (2.3)$$

具有周期性边界条件。以类似的方式，泛函 (1.3) 变为

$$\mathcal{H}[\varphi, \psi](t) = \frac{1}{2} \int_a^b \varphi_t(x, t)^2 + \psi_t(x, t)^2 + c^2 [\varphi_x(x, t)^2 + \psi_x(x, t)^2] + \beta(x)f(\varphi(x, t)^2 + \psi(x, t)^2) dx \quad (2.4)$$

在后面，为了简洁起见，如果没有必要，我们还将省略函数  $\mathcal{H}$  中出现的函数的参数  $(x, t)$ 。通过使用 (2.2) 可以证明函数  $\mathcal{H}$  的守恒。

**定理 2.1.** 泛函 (2.4) 在问题 (2.2) 和 (2.3) 的解中是守恒的。

**证明**事实上，通过使用 (2.2)，可以通过部分积分，考虑到周期性边界条件，并像往常一样用点表示时间导数：

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{H}}[\varphi, \psi](t) &= \int_a^b \varphi_t \varphi_{tt} + \psi_t \psi_{tt} + c^2 [\varphi_x \varphi_{xt} + \psi_x \psi_{xt}] + \beta(x)f'(\varphi^2 + \psi^2)(\varphi \varphi_t + \psi \psi_t) dx \\ &= \int_a^b \varphi_t \varphi_{tt} + \psi_t \psi_{tt} - c^2 [\varphi_t \varphi_{xx} + \psi_t \psi_{xx}] + \beta(x)f'(\varphi^2 + \psi^2)(\varphi \varphi_t + \psi \psi_t) dx \\ &= \int_a^b \varphi_t [\varphi_{tt} - c^2 \varphi_{xx} + \beta(x)f'(\varphi^2 + \psi^2)\varphi] + \psi_t [\psi_{tt} - c^2 \psi_{xx} + \beta(x)f'(\varphi^2 + \psi^2)\psi] dx \\ &= \int_a^b \varphi_t [2\alpha\psi_t] + \psi_t [-2\alpha\varphi_t] dx = 0 \end{aligned}$$

这意味着该定理成立。

接下来，由于周期性边界条件，我们在空间中扩展函数  $\varphi$  和  $\psi$ ，通过使用  $L^2[a, b]$  中的周期性函数的以下正交基，

$$c_j(x) = \sqrt{\frac{2 - \delta_{j0}}{b - a}} \cos\left(2\pi j \frac{x - a}{b - a}\right), \quad j \geq 0, \quad s_j(x) = \sqrt{\frac{2}{b - a}} \sin\left(2\pi j \frac{x - a}{b - a}\right), \quad j \geq 1, \quad (2.5)$$

使用  $\delta_{j0}$  Kronecker delta，使得对于  $i$  和  $j$  的所有允许值：

$$\int_a^b c_i(x)c_j(x)dx = \delta_{ij} = \int_a^b s_i(x)s_j(x)dx, \quad \int_a^b c_i(x)s_j(x)dx = 0. \quad (2.6)$$

因此，对于合适的时间相关系数  $\gamma_j(t)$ 、 $\eta_j(t)$ 、 $\alpha_j(t)$ 、 $\beta_j(t)$ ，有展开式：

$$\begin{aligned}\varphi(\mathbf{x}, t) &= c_0(\mathbf{x})\gamma_0(t) + \sum_{j \geq 1} c_j(\mathbf{x})\gamma_j(t) + s_j(\mathbf{x})\eta_j(t) \\ \psi(\mathbf{x}, t) &= c_0(\mathbf{x})\alpha_0(t) + \sum_{j \geq 1} c_j(\mathbf{x})\alpha_j(t) + s_j(\mathbf{x})\beta_j(t).\end{aligned}\tag{2.7}$$

因此，周期性边界条件得到满足。通过定义无限向量，可以将展开式 (2.7) 转换为更紧凑的形式

$$\mathbf{w}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} c_0(\mathbf{x}) \\ c_1(\mathbf{x}) \\ s_1(\mathbf{x}) \\ c_2(\mathbf{x}) \\ s_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}_1(t) = \begin{pmatrix} \gamma_0(t) \\ \gamma_1(t) \\ \eta_1(t) \\ \gamma_2(t) \\ \eta_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}_2(t) = \begin{pmatrix} \alpha_0(t) \\ \alpha_1(t) \\ \beta_1(t) \\ \alpha_2(t) \\ \beta_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix},\tag{2.8}$$

如下：

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \mathbf{w}(\mathbf{x})^\top \mathbf{q}_1(t), \quad \psi(\mathbf{x}, t) = \mathbf{w}(\mathbf{x})^\top \mathbf{q}_2(t).\tag{2.9}$$

这样做，我们可以很容易地计算偏导数：

$$\begin{aligned}\varphi_t(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{w}(\mathbf{x})^\top \dot{\mathbf{q}}_1(t), & \varphi_{tt}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{w}(\mathbf{x})^\top \ddot{\mathbf{q}}_1(t), \\ \varphi_x(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{w}'(\mathbf{x})^\top \mathbf{q}_1(t), & \varphi_{xx}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{w}''(\mathbf{x})^\top \mathbf{q}_1(t),\end{aligned}\tag{2.10}$$

对于  $\psi$  也是如此。以下结果成立。

**引理 2.1.** 让我们定义矩阵

$$J_2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -J_2^\top = -J_2^{-1}, \quad I_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\tag{2.11}$$

和以下无限矩阵：

$$\tilde{D} = \frac{2\pi}{b-a} \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 1 \cdot J_2 & & \\ & & 2 \cdot J_2 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} = -\tilde{D}^\top\tag{2.12}$$

$$D = \tilde{D}^\top \tilde{D} \equiv \left( \frac{2\pi}{b-a} \right)^2 \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 1^2 \cdot I_2 & & \\ & & 2^2 \cdot I_2 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}\tag{2.13}$$

然后

$$\mathbf{w}'(\mathbf{x}) = \tilde{D}\mathbf{w}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{w}''(\mathbf{x}) = -D\mathbf{w}(\mathbf{x})\tag{2.14}$$

**证明.** (2.14) 中的第一个等式遵循 (见 (2.8) 和 (2.11) 和 (2.12) )

$$\tilde{D}\mathbf{w}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -s_1(\mathbf{x}) \\ c_1(\mathbf{x}) \\ -2s_2(\mathbf{x}) \\ 2c_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \mathbf{w}'(\mathbf{x}).$$

通过观察 (见 (2.13))  $-D = \tilde{D}^2$ ，第二个等式也推导出来。

作为前面引理的结果，(2.10) 中的空间导数可以表示为

$$\varphi_x(x, t) = (\tilde{D}\mathbf{w}(x))^\top \mathbf{q}_1(t), \quad \varphi_{xx}(x, t) = -(D\mathbf{w}(x))^\top \mathbf{q}_1(t) \quad (2.15)$$

对于  $\psi_x$  和  $\psi_{xx}$  也是如此。通过考虑，由于正交性条件 (2.6)，

$$\int_a^b \mathbf{w}(x)\mathbf{w}(x)^\top dx = I \quad (2.16)$$

恒等算子，很容易推导出 (2.2) 可以在“频率”空间中重铸为，

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{q}}_1 + c^2 D\mathbf{q}_1 - 2\alpha\dot{\mathbf{q}}_2 + \int_a^b \mathbf{w}\beta f' \left( (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_1)^2 + (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_2)^2 \right) (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_1) dx &= 0 \\ \ddot{\mathbf{q}}_2 + c^2 D\mathbf{q}_2 + 2\alpha\dot{\mathbf{q}}_1 + \int_a^b \mathbf{w}\beta f' \left( (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_1)^2 + (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_2)^2 \right) (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_2) dx &= 0, \quad t > 0, \end{aligned} \quad (2.17)$$

其中，为简洁起见，我们还跳过了函数  $\beta$  和  $\mathbf{w}$  的参数  $x$ 。为了将问题转化为一阶形式，让我们定义无限向量

$$\mathbf{p}_1(t) = \dot{\mathbf{q}}_1(t) - \alpha\mathbf{q}_2(t), \quad \mathbf{p}_2(t) = \dot{\mathbf{q}}_2(t) + \alpha\mathbf{q}_1(t) \quad (2.18)$$

从而 (2.17) 重写为

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}}_1 &= \mathbf{p}_1 + \alpha\mathbf{q}_2, \\ \dot{\mathbf{q}}_2 &= \mathbf{p}_2 - \alpha\mathbf{q}_1 \\ \dot{\mathbf{p}}_1 &= -c^2 D\mathbf{q}_1 + \alpha(\mathbf{p}_2 - \alpha\mathbf{q}_1) - \int_a^b \mathbf{w}\beta f' \left( (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_1)^2 + (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_2)^2 \right) (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_1) dx \\ \dot{\mathbf{p}}_2 &= -c^2 D\mathbf{q}_2 - \alpha(\mathbf{p}_1 + \alpha\mathbf{q}_2) - \int_a^b \mathbf{w}\beta f' \left( (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_1)^2 + (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_2)^2 \right) (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_2) dx, \quad t > 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

初始条件：

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_1(0) &= \int_a^b \mathbf{w}(x)\varphi_0(x) dx, \quad \mathbf{q}_2(0) = \int_a^b \mathbf{w}(x)\psi_0(x) dx \\ \mathbf{p}_1(0) &= \int_a^b \mathbf{w}(x)(\varphi_1(x) - \alpha\psi_0(x)) dx, \quad \mathbf{p}_2(0) = \int_a^b \mathbf{w}(x)(\psi_1(x) + \alpha\varphi_0(x)) dx \end{aligned} \quad (2.20)$$

那么下面的结果成立。定理 2.2。方程组 (2.19) 是哈密顿量和哈密顿量

$$\begin{aligned} H(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) &= \frac{1}{2} \left[ (\mathbf{p}_1 + \alpha\mathbf{q}_2)^\top (\mathbf{p}_1 + \alpha\mathbf{q}_2) + (\mathbf{p}_2 - \alpha\mathbf{q}_1)^\top (\mathbf{p}_2 - \alpha\mathbf{q}_1) \right. \\ &\quad \left. + c^2 [\mathbf{q}_1^\top D\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2^\top D\mathbf{q}_2] + \int_a^b \beta f \left( (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_1)^2 + (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_2)^2 \right) dx \right] \end{aligned} \quad (2.21)$$

此外， $H$  等价于 (2.4) 中定义的函数  $\mathcal{H}$ 。

**证明。** 证明的第一部分很简单，因为人们很容易意识到

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}_i}, \quad i = 1, 2$$

为了证明  $H$  等价于 (2.4) 中定义的泛函  $\mathcal{H}$ ，根据 (2.9)(2.16) 和 (2.19) 可以观察到：



$$\begin{aligned}
(\mathbf{p}_1 + \alpha \mathbf{q}_2)^\top (\mathbf{p}_1 + \alpha \mathbf{q}_2) &= \dot{\mathbf{q}}_1^\top \dot{\mathbf{q}}_1 = \int_a^b (\mathbf{w}^\top \dot{\mathbf{q}}_1)^\top (\mathbf{w}^\top \dot{\mathbf{q}}_1) dx = \int_a^b \varphi_t^2 dx \\
(\mathbf{p}_2 - \alpha \mathbf{q}_1)^\top (\mathbf{p}_2 - \alpha \mathbf{q}_1) &= \dot{\mathbf{q}}_2^\top \dot{\mathbf{q}}_2 = \int_a^b (\mathbf{w}^\top \dot{\mathbf{q}}_2)^\top (\mathbf{w}^\top \dot{\mathbf{q}}_2) dx = \int_a^b \psi_t^2 dx \\
\mathbf{q}_1^\top D \mathbf{q}_1 &= \mathbf{q}_1^\top \tilde{D} \tilde{D}^\top \mathbf{q}_1 = \int_a^b \mathbf{q}_1^\top \tilde{D} \mathbf{w} \mathbf{w}^\top \tilde{D}^\top \mathbf{q}_1 dx = \int_a^b \varphi_x^2 dx \\
\mathbf{q}_2^\top D \mathbf{q}_2 &= \mathbf{q}_2^\top \tilde{D} \tilde{D}^\top \mathbf{q}_2 = \int_a^b \mathbf{q}_2^\top \tilde{D} \mathbf{w} \mathbf{w}^\top \tilde{D}^\top \mathbf{q}_2 dx = \int_a^b \psi_x^2 dx
\end{aligned}$$

和

$$\int_a^b \beta f \left( (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_1)^2 + (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_2)^2 \right) dx = \int_a^b \beta 1$$

因此，从 (2.21) 可以得到

$$H(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \frac{1}{2} \int_a^b [\varphi_t^2 + \psi_t^2 + c^2 (\varphi_x^2 + \psi_x^2) + \beta f (\varphi^2 + \psi^2)] dx.$$

这样就完成了证明。

正如引言中所预期的，(2.21) 的守恒问题 (2.19) 和 (2.20) 的求解具有相关的含义，如下面的结果所示。

**推论 2.1.** 假设对于问题 (2.19) 和 (2.20)，其中一个有  $\beta, f > 0$ ，而且，

$$H(\mathbf{q}_1(0), \mathbf{q}_2(0), \mathbf{p}_1(0), \mathbf{p}_2(0)) < \infty$$

然后，问题的解决方案是一致有界的。

**证明。** 该陈述很容易从 (2.21) 的守恒推导出来，这意味着  $\|\mathbf{q}_i\|_2^2$ ，因此， $\|\mathbf{p}_i\|_2^2, i = 1, 2$ ，是有界的。

### 3. Fourier-Galerkin 空间半离散化

为了使问题 (2.19) 和 (2.20) 在计算机上可以解决，需要将无限展开式 (2.7) 截断为有限和。因此，固定一个方便的大值  $N \gg 1$ ，一个近似 (2.7) 为

$$\begin{aligned}
\varphi(x, t) &\approx \hat{\varphi}(x, t) = c_0(x) \gamma_0(t) + \sum_{j=1}^N c_j(x) \gamma_j(t) + s_j(x) \eta_j(t) \\
\psi(x, t) &\approx \hat{\psi}(x, t) = c_0(x) \alpha_0(t) + \sum_{j=1}^N c_j(x) \alpha_j(t) + s_j(x) \beta_j(t)
\end{aligned} \tag{3.1}$$

通过将无限向量和矩阵 (2.8) 和 (2.12) 和 (2.13) 分别替换为

$$\mathbf{w}(x) = \begin{pmatrix} c_0(x) \\ c_1(x) \\ s_1(x) \\ \vdots \\ c_N(x) \\ s_N(x) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}_1(t) = \begin{pmatrix} \gamma_0(t) \\ \gamma_1(t) \\ \eta_1(t) \\ \vdots \\ \gamma_N(t) \\ \eta_N(t) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}_2(t) = \begin{pmatrix} \alpha_0(t) \\ \alpha_1(t) \\ \beta_1(t) \\ \vdots \\ \alpha_N(t) \\ \beta_N(t) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2N+1} \tag{3.2}$$

和

$$\tilde{D} = \frac{2\pi}{b-a} \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 1 \cdot J_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & N \cdot J_2 \end{pmatrix} = -\tilde{D}^\top \in \mathbb{R}^{2N+1 \times 2N+1} \quad (3.3)$$

$$D = \tilde{D}^\top \tilde{D} \equiv \left( \frac{2\pi}{b-a} \right)^2 \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 1^2 \cdot I_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & N^2 \cdot I_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2N+1 \times 2N+1} \quad (3.4)$$

为了不使符号复杂化，我们继续对无限向量和矩阵以及相应的截断版本使用相同的符号，即使在下文中，它们将表示有限的符号。因此，一个人获得了展开

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{w}(\mathbf{x})^\top \mathbf{q}_1(t), \quad \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{w}(\mathbf{x})^\top \mathbf{q}_2(t), \quad (3.5)$$

代替 (2.8) 和 (2.9)。此外，类似于 (2.10) 的表达式适用于  $\hat{\varphi}$  和  $\hat{\psi}$  的偏导数，并且引理 2.1 的结果继续正式适用于截断向量 (3.2)。结果，方程式 (2.14)-(2.16) 继续正式成立有限近似，即使现在函数 (3.5) 不再满足方程 (2.2)。然而，本着 Galerkin 方法的精神，通过要求残差与函数空间正交

$$\mathcal{V}_N = \text{span} \{ \mathbf{c}_0(\mathbf{x}), \mathbf{c}_1(\mathbf{x}), \mathbf{s}_1(\mathbf{x}), \dots, \mathbf{c}_N(\mathbf{x}), \mathbf{s}_N(\mathbf{x}) \}, \quad (3.6)$$

对于所有  $t$ ，近似值 (3.5) 都属于其中，人们再次正式获得方程 (2.19)，初始条件仍然由 (2.20) 正式给出。显然，(2.19) 是哈密顿量，哈密顿量仍然由 (2.21) 给出，尽管后者现在只是泛函 (2.4) 的近似值。然而，从傅里叶方法理论 [17] 可知，在对  $\varphi_0$ 、 $\psi_0$ 、 $\varphi_1$ 、 $\psi_1$ 、 $\beta$  和  $f$ 、 $\varphi$ 、 $\psi$  和  $\mathcal{H}$  的截断近似值以超过指数的方式收敛于它们，因为  $N \rightarrow \infty$ （这一事实通常被称为光谱精度）。

**备注 3.1.** 选择  $N$  的一个标准是检查残差（见 (2.20)）

$$\| \varphi_0 - \mathbf{w}^\top \mathbf{q}_1(0) \|, \quad \| \psi_0 - \mathbf{w}^\top \mathbf{q}_2(0) \|, \quad \| (\varphi_1 - \alpha \psi_0) - \mathbf{w}^\top \mathbf{p}_1(0) \|, \quad \| (\psi_1 + \alpha \varphi_0) - \mathbf{w}^\top \mathbf{p}_2(0) \|, \quad (3.7)$$

对应于初始条件，足够小，而且，值的差异

$$H(\mathbf{q}_1(0), \mathbf{q}_2(0), \mathbf{p}_1(0), \mathbf{p}_2(0))$$

当从  $N$  传递到  $N+1$  时，在舍入误差级别内。

最后，为了获得全空间半离散化，需要方便地近似出现在 (2.19) 中的积分。为此，如 [6] 中所观察到的，可以使用复合梯形规则，在横坐标处评估，

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{a} + i \frac{\mathbf{b} - \mathbf{a}}{m}, \quad i = 0, \dots, m \quad (3.8)$$

$m$  适当大（参见，例如，[18, Th. 5.1.4] 和 [22, Th. 1.1]）。因此，具有维度  $4(2N+1)$  的截断问题 (2.19)，通过复合梯形规则在横坐标 (3.8) 处近似积分，定义了空间中要及时积分的半离散问题。相应的半离散哈密顿量由 (2.21) 形式给出，其中出现的积分通过基于横坐标 (3.8) 的复合梯形规则近似。

**备注 3.2.** 我们观察到，当 (1.1) 中的函数  $\beta(\mathbf{x})$  在  $[\mathbf{a}, \mathbf{b}]$  中不是周期性的时，则必须使用不同的求积来计算 (2.19) 中的积分，就地基于横坐标 (3.8) 的复合梯形规则。例如，高阶高斯公式。

**备注 3.3.** 很明显，所提出的傅里叶-伽辽金空间半离散化是针对周期性边界条件的情况量身定制的。为了完整起见，我们提到对于一般边界条件，应考虑不同的空间半离散化，此外，哈密顿泛函 (2.4) 可能不再守恒（即使它的变化仍然可以正确再现，如图所示，例如，在 [6] 中为半线性波动方程）。还必须强调的是，所使用的空间半离散化极大地影响了全离散方法的有效实现，如下一节所示。事实上，所选择的半离散化将导致具有对角块的近似雅可比行列式，这使得该方法的实现非常有效。

## 4. 哈密顿边值法

为了获得完全离散的方法，我们现在需要将哈密顿问题 (2.19) 和 (2.20) 与向量  $\mathbf{w}$ 、 $\mathbf{q}_1$ 、 $\mathbf{q}$  整合和由 (3.2) 和 (3.4) 定义的矩阵  $\mathbf{D}$ 。从具有哈密顿结构的 PDE 获得哈密顿半离散 ODE 问题这一事实很重要，如 [27] 中所观察到的，如果使用合适的几何积分器，能够利用此属性。出于这个原因，我们将在这里考虑用于数值求解 (2.19) 和 (2.20) 的能量守恒 Runge-Kutta 方法，称为哈密顿边界值方法 (HBVM)。此类方法已在一系列论文 [5, 8, 9, 11, 12] 中进行了研究，并已沿多个方向 [10, 16] 进行了推广，包括应用于哈密顿偏微分方程 [3, 6]（另请参阅最近的专著 [7]，对此类方法进行全面介绍）。更详细地说， $\mathbf{HBVM}(\mathbf{k}, \mathbf{s})$  方法是具有 Butcher 画面的  $\mathbf{k}$ -stage Runge-Kutta 方法

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & \mathcal{I}_s \mathcal{P}_s^\top \Omega \\ \hline & \mathbf{b}^\top \end{array}, \quad \mathbf{b} = (b_1 \ \dots \ b_k)^\top, \quad \mathbf{c} = (c_1 \ \dots \ c_k)^\top \quad (4.1)$$

其中，通过设置  $\{P_j\}_{j \geq 0}$  勒让德多项式基础，在  $[0, 1]$  上正交，

$$P_i \in \Pi_i, \quad \int_0^1 P_i(x) P_j(x) dx = \delta_{ij}, \quad \forall i, j = 0, 1, \dots$$

$(b_i, c_i)$  是  $2\mathbf{k}$  阶 Gauss-Legendre 求积公式的权重和横坐标 (*i. e.*,  $P_k(c_i) = 0, i = 1, \dots, k$ ) 和

$$\mathcal{P}_s = (P_{j-1}(c_i)), \mathcal{I}_s = \left( \int_0^{c_i} P_{j-1}(x) dx \right) \in \mathbb{R}^{k \times s}, \quad \Omega = \text{diag}(\mathbf{b}) \in \mathbb{R}^{k \times k} \quad (4.2)$$

还已知（例如，参见 [7]） $\mathbf{HBVM}(\mathbf{k}, \mathbf{s})$  方法应用于求解 ODE-IVP

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}(\mathbf{y}), \quad t \in [0, h], \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$$

使用  $h$  考虑步长，定义多项式近似  $\sigma \in \Pi_s$  使得

$$\sigma(0) = \mathbf{y}_0, \quad \mathbf{y}_1 := \sigma(h) \approx \mathbf{y}(h), \quad \dot{\sigma}(ch) = \sum_{j=0}^{s-1} P_j(c) \hat{\gamma}_j, \quad c \in [0, 1] \quad (4.3)$$

其中

$$\hat{\gamma}_j := \sum_{i=1}^k b_i P_j(c_i) g(\sigma(c_i h)) \equiv \int_0^1 P_j(c) g(\sigma(ch)) dc + \Delta_j(h), \quad j = 0, \dots, s-1 \quad (4.4)$$

和正交误差

$$\Delta_j(h) = \begin{cases} 0, & \text{if } g(\sigma) \in \Pi_v, \text{ with } v \leq 2k-1-j \\ O(h^{2k-j}), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.5)$$

在前面的陈述的基础上，以下结果成立。

**定理 4.1.** 对于所有  $\mathbf{k} \geq \mathbf{s}$ ， $\mathbf{k}$ -stage Runge-Kutta  $\mathbf{HBVM}(\mathbf{k}, \mathbf{s})$  方法 (4.1):

- 是对称的，订单为  $2\mathbf{s}$ ;
- 当  $\mathbf{k} = \mathbf{s}$  时简化为 (辛)  $\mathbf{s}$ -stage Gauss 搭配法;
- 当  $\mathbf{f}$  是度的多项式时，它对于问题 (2.19)-(2.21) 是能量守恒的

$$\tilde{v} \leq \mathbf{k}/\mathbf{s} \quad (4.6)$$

- 在非多项式情况下，通过参考在 (2.21) 处定义的哈密顿函数进行设置，

$$\mathbf{y} := \begin{pmatrix} \mathbf{q}_1 \\ \mathbf{q}_2 \\ \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{4(2N+1)}, \quad H(\mathbf{y}) := H(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \quad (4.7)$$

$\mathbf{y}_0 := \mathbf{y}(0)$ ， $\mathbf{y}_1 \approx \mathbf{y}(h)$  是新的近似值， $h$  使用的步长，有一个

$$H(\mathbf{y}_1) - H(\mathbf{y}_0) = O(h^{2k+1}). \quad (4.8)$$

证明。对于前两点，我们参考，例如，[7,11]。关于最后两点，让我们重写 (2.19) 和 (2.20)，对未知数的向量使用更紧凑的符号 (4.7)，如

$$\dot{\mathbf{y}} = J\nabla H(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \quad J = \begin{pmatrix} \mathbf{O}_{4N+2} & \mathbf{I}_{4N+2} \\ -\mathbf{I}_{4N+2} & \mathbf{O}_{4N+2} \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

$\mathbf{O}_{4N+2}$  和  $\mathbf{I}_{4N+2}$  分别是  $4N+2 \times 4N+2$  零和单位矩阵。因此，通过考虑 (4.3)-(4.5)，该方法将导出多项式近似  $\sigma \in \Pi_s$  使得

$$\sigma(0) = \mathbf{y}_0, \quad \sigma(h) =: \mathbf{y}_1, \quad \dot{\sigma}(ch) = \sum_{j=0}^{s-1} P_j(c) \hat{\gamma}_j, \quad c \in [0, 1]$$

其中

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}_j &:= \sum_{i=1}^k b_i P_j(c_i) J\nabla H(\sigma(c_i h)) \equiv \gamma_j(\sigma) + \Delta_j(h), \\ \gamma_j(\sigma) &= \int_0^1 P_j(c) J\nabla H(\sigma(ch)) dc, \\ \Delta_j(h) &= \begin{cases} 0, & \text{if } J\nabla H(\sigma) \in \Pi_v, \\ O(h^{2k-j}), & \text{otherwise.} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.10)$$

因此，考虑到 (见 (4.9))  $J^\top J = \mathbf{I}$ ，维数  $4(2N+1)$  的单位矩阵，有

$$\begin{aligned} H(\mathbf{y}_1) - H(\mathbf{y}_0) &= H(\sigma(h)) - H(\sigma(0)) = h \int_0^1 \nabla H(\sigma(ch))^\top \dot{\sigma}(ch) dc \\ &= h \int_0^1 \nabla H(\sigma(ch))^\top \dot{\sigma}(ch) dc = h \int_0^1 \nabla H(\sigma(ch))^\top \sum_{j=0}^{s-1} P_j(c) [\gamma_j(\sigma) + \Delta_j(h)] dc \\ &= h \sum_{j=0}^{s-1} \left[ \int_0^1 P_j(c) J\nabla H(\sigma(ch)) dc \right]^\top J [\gamma_j(\sigma) + \Delta_j(h)] = h \sum_{j=0}^{s-1} \gamma_j(\sigma)^\top J [\gamma_j(\sigma) + \Delta_j(h)] \\ &= h \sum_{j=0}^{s-1} \gamma_j(\sigma)^\top J \Delta_j(h) = \begin{cases} 0, & \text{if } J\nabla H(\sigma) \in \Pi_v, \text{ with } v \leq 2k - s, \\ O(h^{2k+1}), & \text{otherwise.} \end{cases} \end{aligned}$$

在第二种情况下，(4.8) 如下。在前一种情况下，哈密顿量是守恒的，假设  $J\nabla H(\sigma) \in \Pi_v$  和  $v \leq 2ks$ ，即 (见 (2.21))， $\mathbf{f} \in \Pi_{\tilde{v}}$  与

$$(\tilde{v} - 1)2s + s \leq 2k - s,$$

(4.6) 由此而来。

**备注 4.1.** 从 (4.6) 可以清楚地看出，通过选择足够大的  $k$ ，在多项式情况下，总是可以获得精确的能量守恒。然而，同样在非多项式情况下，通过选择足够大的  $k$ ，仍然可以获得实际的能量守恒，因为它足以使误差 (4.8) 落在舍入误差水平内。

反过来，使用较大的  $k$  值不会使 Runge-Kutta 方法 (4.1) 的实施成本过高，因为正如我们将在下面概述的那样，由其应用产生的离散问题具有 (块) 维度  $s$ ，独立于  $k$ 。事实上，通过考虑问题 (2.19) 和 (2.20) 的公式 (4.9)，表示  $\mathbf{e} = (\mathbf{1}, \dots, \mathbf{1})^\top \in \mathbb{R}^k$  和设置

$$Y \equiv \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_k \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{4k(2N+1)}, \quad \nabla H(Y) := \begin{pmatrix} \nabla H(Y_1) \\ \vdots \\ \nabla H(Y_k) \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

用于求解 (4.9) 的方法 (4.1) 的阶段向量，以及在阶段评估的  $\nabla H$ ，分别获得  $k$  向量方程的非线性集

$$Y = \mathbf{e} \otimes \mathbf{y}_0 + h \mathcal{L}_s \mathcal{P}_s^\top \Omega \otimes J\nabla H(Y). \quad (4.12)$$

但是，通过进一步设置向量

$$\hat{\boldsymbol{\gamma}} \equiv \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\gamma}}_0 \\ \vdots \\ \hat{\boldsymbol{\gamma}}_{s-1} \end{pmatrix} := \mathcal{P}_s^\top \Omega \otimes J\nabla H(Y), \quad (4.13)$$

包含向量系数 (4.10)，因此 (4.12) 可以写为

$$Y = \mathbf{e} \otimes \mathbf{y}_0 + h\mathcal{I}_s \otimes I\hat{\boldsymbol{\gamma}}. \quad (4.14)$$

通过将 (4.14) 代入 (4.13)，可以得到等式

$$G(\hat{\boldsymbol{\gamma}}) := \hat{\boldsymbol{\gamma}} - \mathcal{P}_s^\top \Omega \otimes J\nabla H(\mathbf{e} \otimes \mathbf{y}_0 + h\mathcal{I}_s \otimes I\hat{\boldsymbol{\gamma}}) = \mathbf{0} \quad (4.15)$$

其 (块) 维度为  $\mathbf{s}$ ，独立于  $\mathbf{k}$ 。一旦解决了离散问题 (4.15)，新的近似值由下式给出

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h\hat{\boldsymbol{\gamma}}_0.$$

实际上，考虑到 (4.2), (4.10) 和 (4.13)，设置  $\mathbf{e}_1 \in \mathbb{R}^s$  为第一个单位向量，并考虑到  $P_0(\mathbf{x}) \equiv 1$ ，有

$$\hat{\boldsymbol{\gamma}}_0 = \mathbf{e}_1^\top \mathcal{P}_s^\top \Omega \otimes J\nabla H(Y) = \mathbf{e}^\top \Omega \otimes J\nabla H(Y) \equiv \sum_{i=1}^k b_i J\nabla H(Y_i),$$

(我们指的是，例如，[7, 11] 以获得完整的详细信息)。因此，解决由 HBVM( $\mathbf{k}, \mathbf{s}$ ) 方法 (4.1) 产生的离散问题 (4.15) 的复杂性大大简化，w.r.t. 求解阶段方程。 (4.12)。除此之外，考虑到

$$\mathcal{P}_s^\top \Omega \mathcal{I}_s = X_s := \begin{pmatrix} \xi_0 & -\xi_1 & & & \\ \xi_1 & 0 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -\xi_{s-1} & \\ & & \xi_{s-1} & 0 & \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{s \times s}, \quad \xi_i = \frac{1}{2\sqrt{|4i^2 - 1|}} \quad (4.16)$$

一个用于求解 (4.15) 的简化牛顿迭代读取

FOR  $r = 0, 1, \dots$ :

solve  $[I_s \otimes I - hX_s \otimes J\nabla^2 H(\mathbf{y}_0)] \Delta^r = -G(\hat{\boldsymbol{\gamma}}^r)$

set  $\hat{\boldsymbol{\gamma}}^{r+1} = \hat{\boldsymbol{\gamma}}^r + \Delta^r$

END

例如，从  $\hat{\boldsymbol{\gamma}}^0 = \mathbf{0}$  开始。我们观察到 (4.17) 中线性系统的系数矩阵的维数比连续问题 (2.19) 的维数大  $\mathbf{s}$  倍，我们需要在每个积分步骤中将其分解。但是，我们可以沿两个方向简化此过程，如下所述。

首先，通过设置  $I_\ell$  维度的单位矩阵

$$\ell := 2N + 1, \quad (4.18)$$

并考虑在 (3.4) 中定义的矩阵  $D$ ，有

$$\nabla^2 H(\mathbf{y}_0) = \begin{pmatrix} (c^2 D + \alpha^2 I_\ell + F_{11}) & F_{12} & & -\alpha I_\ell \\ F_{12} & (c^2 D + \alpha^2 I_\ell + F_{22}) & \alpha I_\ell & \\ & \alpha I_\ell & I_\ell & \\ -\alpha I_\ell & & & I_\ell \end{pmatrix}$$

其中

$$F_{ij} = \int_a^b \beta \mathbf{w} \mathbf{w}^\top \left[ 2f'' \left( (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_1)^2 + (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_2)^2 \right) (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_i) (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_j) + \delta_{ij} f' \left( (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_1)^2 + (\mathbf{w}^\top \mathbf{q}_2)^2 \right) \right] dx.$$

因此, 当  $N \gg 1$  (见 (3.4)) 时, 可以假设

$$\left( \frac{2\pi c}{b-a} N \right)^2 \gg \|\beta\| (\|f''\| + \|f'\|).$$

因此, 通过设置

$$D(c, \alpha) := c^2 D + \alpha^2 I_\ell, \quad (4.19)$$

我们可以考虑近似的Hessian矩阵

$$\nabla^2 H(\mathbf{y}_0) \approx \begin{pmatrix} D(c, \alpha) & & & -\alpha I_\ell \\ & D(c, \alpha) & \alpha I_\ell & \\ & \alpha I_\ell & I_\ell & \\ -\alpha I_\ell & & & I_\ell \end{pmatrix} =: M \quad (4.20)$$

这是恒定的。其次, 用简化的 Hessian (4.20) 代替简化的牛顿迭代 (4.17), 我们考虑“分裂牛顿”混合迭代。该迭代最初是在 [13] (另见 [14]) 中设计的, 已在计算代码 BiM [15] (可在 IVP Solvers 的测试集 [35] 中获得) 中实现, 并且也已被考虑对于 HBVM [5,9], 当应用于哈密顿偏微分方程时证明是非常有效的, 如 [6] 中所示的半线性波动方程和 [3] 中的非线性薛定谔方程。我们在这里勾勒出解决问题 (2.19) 的主要事实, 因为每个 PDE 都有自己的结构属性可以利用, 以使非线性迭代有效。更详细地说, 迭代 (4.17) 被以下迭代替换:

s	1	2	3	4	5	6
$\rho_s$	0.5000	0.2887	0.1967	0.1475	0.1173	0.0971

表 1

在 (4.22) 中定义的参数.

FOR  $r = 0, 1, \dots$ :

set  $\boldsymbol{\eta}^r = - > G(\hat{\boldsymbol{\gamma}}^r)$

set  $\boldsymbol{\eta}_1^r = \rho_s \mathbf{X}_s^{-1} \otimes I \boldsymbol{\eta}^r$

set  $\Delta^r = I_s \otimes \Sigma [\boldsymbol{\eta}_1^r + I_s \otimes \Sigma(\boldsymbol{\eta}^r - \boldsymbol{\eta}_1^r)]$

set  $\hat{\boldsymbol{\gamma}}^{r+1} = \hat{\boldsymbol{\gamma}}^r + \Delta^r$

END

例如, 从  $\hat{\boldsymbol{\gamma}}^0 = \mathbf{0}$  开始。这里  $\mathbf{X}_s$  是在 (4.16) 处定义的矩阵,

$$\rho_s = \min_{\lambda \in \sigma(\mathbf{X}_s)} |\lambda|, \quad (4.22)$$

(参数  $\rho_s$  的一些值列在表 1 中) 和 (见 (4.9)、(4.18) 和 (4.20))

$$\Sigma := (I - h\rho_s JM)^{-1} \in \mathbb{R}^{4\ell \times 4\ell} \quad (4.23)$$

后一个矩阵与连续问题 (2.19) 的大小相同, 是常数, 因此只需计算一次。此外, 通过考虑 (见 (4.19))

$$\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} I_\ell & -\delta I_\ell & -\varepsilon I_\ell & O_\ell \\ \delta I_\ell & I_\ell & O_\ell & -\varepsilon I_\ell \\ \varepsilon D(c, \alpha) & O_\ell & I_\ell & -\delta I_\ell \\ O_\ell & \varepsilon D(c, \alpha) & \delta I_\ell & I_\ell \end{pmatrix}, \quad \text{其中 } \varepsilon := h\rho_s, \delta := \alpha\varepsilon \quad (4.24)$$

并且  $O_\ell$  零  $\ell \times \ell$  矩阵, 具有块对角结构, 以下结果成立。

定理 4.2。让我们定义维度  $4\ell \equiv 4(2N1)$  的置换矩阵  $P$  使得

$$P \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ 4\ell \end{pmatrix} = (1, \ell + 1, 2\ell + 1, 3\ell + 1, 2, \ell + 2, 2\ell + 2, 3\ell + 2, \dots, \ell, 2\ell, 3\ell, 4\ell)^\top$$

然后

$$\Sigma = P^\top \begin{pmatrix} \Sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \Sigma_\ell \end{pmatrix} P$$

此处，通过照常设置  $\lfloor x \rfloor$  小于或等于  $x$  的最大整数，

$$\Sigma_i = \begin{pmatrix} 1 & -\delta & -\varepsilon & 0 \\ \delta & 1 & 0 & -\varepsilon \\ \xi_i & 0 & 1 & -\delta \\ 0 & \xi_i & \delta & 1 \end{pmatrix}^{-1}, \quad \xi_i := \varepsilon \left[ \left( \frac{2\pi c \lfloor i/2 \rfloor}{b-a} \right)^2 + \alpha^2 \right], \quad i = 1, \dots, \ell \quad (4.25)$$

证明。从 (4.19) 和 (4.24) 可以得到

$$\Sigma^{-1} = \varepsilon c^2 F + G \otimes I_\ell$$

其中

$$F = \begin{pmatrix} O_\ell & O_\ell & O_\ell & O_\ell \\ O_\ell & O_\ell & O_\ell & O_\ell \\ D & O_\ell & O_\ell & O_\ell \\ O_\ell & D & O_\ell & O_\ell \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} 1 & -\delta & -\varepsilon & 0 \\ \delta & 1 & 0 & -\varepsilon \\ \varepsilon \alpha^2 & 0 & 1 & -\delta \\ 0 & \varepsilon \alpha^2 & \delta & 1 \end{pmatrix}$$

该陈述随后通过考虑  $P^\top (G \otimes I_\ell) P = I_\ell \otimes G$  并且凭借 (3.4)，

$$P^\top F P = \begin{pmatrix} F_1 & & \\ & \ddots & \\ & & F_\ell \end{pmatrix}$$

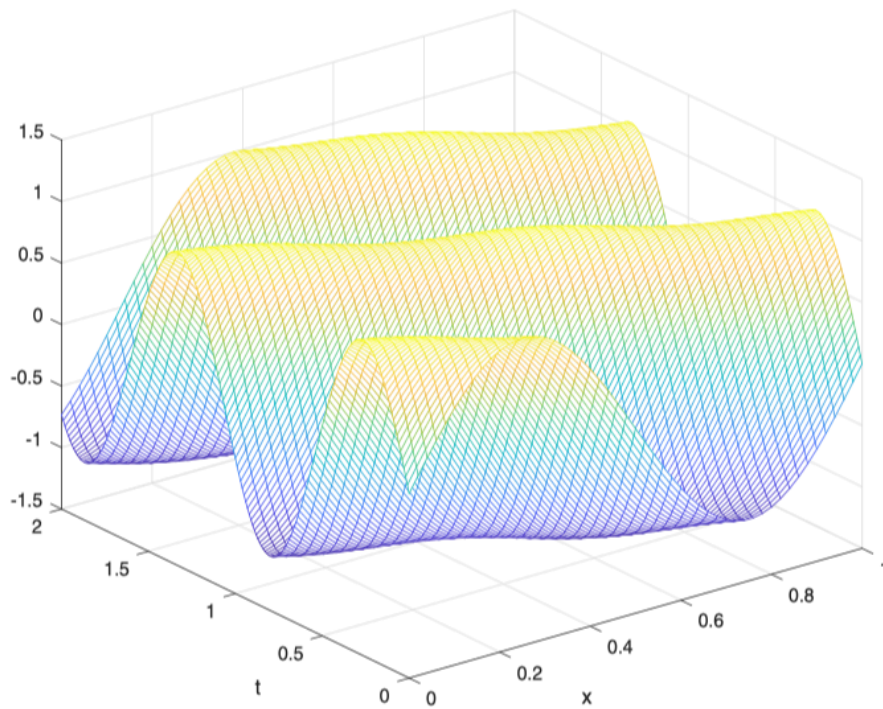
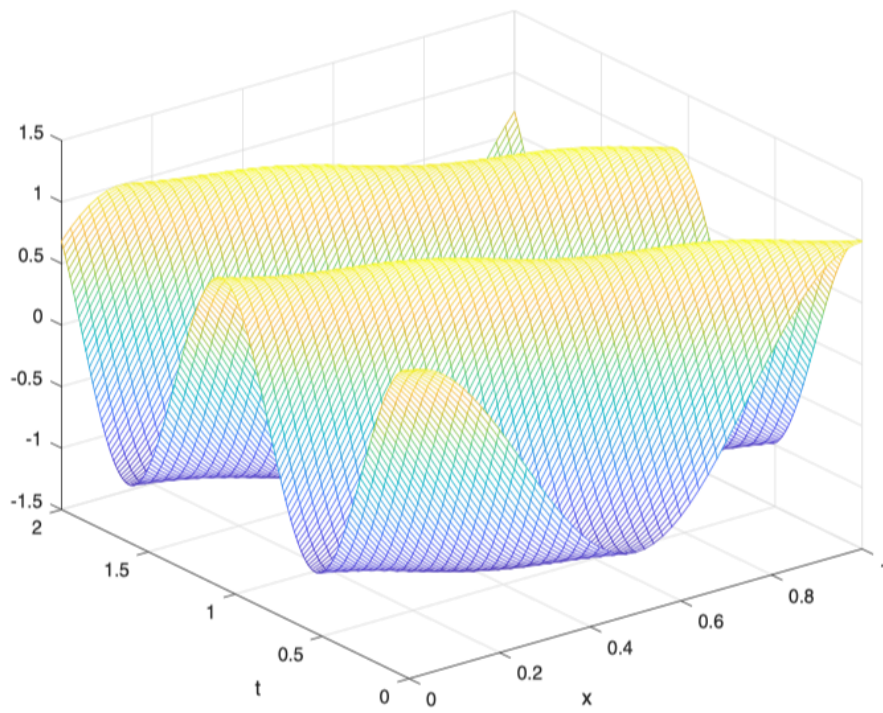


图 1. 问题 (5.1) 和 (5.2) 解的实部 (上图) 和虚部 (下图)

其中

$$F_i = \left( \frac{2\pi}{b-a} \left\lfloor \frac{i}{2} \right\rfloor \right)^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, \ell$$

这样就完成了证明。



$k = s = 1$					
$n$	$err_u$	rate	$err_H$	rate	it
1	1.979e+0	-	1.406e-02	-	10.0
2	1.072e+0	0.9	8.089e-03	0.8	9.1
3	3.711e-01	1.5	6.902e-03	0.2	7.1
4	9.936e-02	1.9	2.325e-03	1.6	6.3
5	2.521e-02	2.0	6.261e-04	1.9	6.0
6	6.324e-03	2.0	1.595e-04	2.0	5.0
7	1.583e-03	2.0	4.006e-05	2.0	5.0
8	3.957e-04	2.0	1.003e-05	2.0	4.0
9	9.894e-05	2.0	2.508e-06	2.0	4.0
10	2.474e-05	2.0	6.269e-07	2.0	4.0
$k = 2, s = 1$					
$n$	$err_u$	rate	$err_H$	rate	it
1	1.970e+0	-	2.809e-02	-	11.0
2	1.066e+0	0.9	7.653e-03	1.9	9.0
3	3.740e-01	1.5	8.458e-04	3.2	7.6
4	1.009e-01	1.9	6.162e-05	3.8	6.4
5	2.565e-02	2.0	4.000e-06	3.9	6.0
6	6.439e-03	2.0	2.524e-07	4.0	5.0
7	1.611e-03	2.0	1.581e-08	4.0	5.0
8	4.030e-04	2.0	7.913e-10	4.3	4.0
9	1.008e-04	2.0	2.132e-14	**	4.0
10	2.519e-05	2.0	2.132e-14	**	4.0
$k = 3, s = 1$					
$n$	$err_u$	rate	$err_H$	rate	it
1	1.972e+0	-	4.375e-04	-	10.0
2	1.067e+0	0.9	1.598e-04	1.5	9.0
3	3.744e-01	1.5	1.235e-05	3.7	7.8
4	1.009e-01	1.9	3.048e-07	5.3	6.4
5	2.565e-02	2.0	5.353e-09	5.8	6.0
6	6.439e-03	2.0	1.421e-14	**	5.0
7	1.611e-03	2.0	1.421e-14	**	5.0
8	4.030e-04	2.0	1.421e-14	**	4.0
9	1.008e-04	2.0	1.421e-14	**	4.0
10	2.519e-05	2.0	1.421e-14	**	4.0
$k = 10, s = 1$					
$n$	$err_u$	rate	$err_H$	rate	it
1	1.972e+0	-	2.202e-11	-	10.3
2	1.067e+0	0.9	7.105e-15	11.6	9.0
3	3.744e-01	1.5	7.105e-15	**	8.0
4	1.009e-01	1.9	7.105e-15	**	6.9
5	2.565e-02	2.0	7.105e-15	**	6.0
6	6.439e-03	2.0	7.105e-15	**	5.0
7	1.611e-03	2.0	7.105e-15	**	5.0
8	4.030e-04	2.0	7.105e-15	**	4.0
9	1.008e-04	2.0	1.421e-14	**	4.0
10	2.519e-05	2.0	1.421e-14	**	4.0

表 2

问题 (5.1) 和 (5.2),  $T = 2$ , 通过取消  $N = 1, m = 3$  用于空间半离散化和  $HBVM(k, 1)$  及时解决步长  $h = 2^{-n}$ 。

作为定理 4.2 的结果, 为了执行混合迭代 (4.21), 需要计算 (见 (4.18)) (4.25) 中的  $\ell 4 \times 4$  矩阵。实际上, 大约有一半, 因为从 (4.25) 可以很容易地意识到

$$\xi_{2i} = \xi_{2i+1} \Rightarrow \Sigma_{2i} = \Sigma_{2i+1}, \quad i = 1, \dots, N \equiv (\ell - 1)/2$$

总之, 执行迭代 (4.21) 的线性代数成本在要解决的问题 (2.19) 的维度上是线性的, 无论是在所需的操作方面还是在内存要求方面。

## 5. 数值算例

在本节中, 我们提供了几个数值示例, 旨在确认所提出方法的守恒特性和准确性。

第一个问题是

$$u_{tt} - u_{xx} + iu_t + \sin(2|u|^2)u = 0, \quad (x, t) \in [0, 1] \times [0, T] \quad (5.1)$$

$k = s = 2$					
$n$	$err_u$	rate	$err_H$	rate	it
1	6.417e-01	-	5.007e-03	-	19.3
2	6.317e-02	3.3	1.818e-03	1.5	16.6
3	4.307e-03	3.9	1.570e-04	3.5	13.2
4	2.760e-04	4.0	9.807e-06	4.0	11.0
5	1.736e-05	4.0	6.157e-07	4.0	9.1
6	1.087e-06	4.0	3.853e-08	4.0	8.0
7	6.794e-08	4.0	2.409e-09	4.0	7.0
8	4.247e-09	4.0	1.506e-10	4.0	6.0
$k = 3, s = 2$					
$n$	$err_u$	rate	$err_H$	rate	it
1	6.438e-01	-	4.284e-03	-	19.0
2	6.330e-02	3.3	1.871e-04	4.5	16.8
3	4.386e-03	3.9	4.260e-06	5.5	13.6
4	2.812e-04	4.0	6.826e-08	6.0	11.0
5	1.769e-05	4.0	1.073e-09	6.0	9.3
6	1.107e-06	4.0	1.421e-14	**	8.0
7	6.922e-08	4.0	1.421e-14	**	7.0
8	4.327e-09	4.0	7.105e-15	**	6.0
$k = 4, s = 2$					
$n$	$err_u$	rate	$err_H$	rate	it
1	6.427e-01	-	3.375e-04	-	19.3
2	6.345e-02	3.3	2.068e-05	4.0	16.8
3	4.388e-03	3.9	1.174e-07	7.5	13.6
4	2.812e-04	4.0	5.108e-10	7.8	11.0
5	1.769e-05	4.0	1.421e-14	**	9.3
6	1.107e-06	4.0	7.105e-15	**	8.0
7	6.922e-08	4.0	7.105e-15	**	7.0
8	4.327e-09	4.0	7.105e-15	**	6.0
$k = 10, s = 2$					
$n$	$err_u$	rate	$err_H$	rate	it
1	6.431e-01	-	1.958e-08	-	19.5
2	6.344e-02	3.3	1.421e-14	**	17.4
3	4.388e-03	3.9	7.105e-15	**	14.2
4	2.812e-04	4.0	7.105e-15	**	11.2
5	1.769e-05	4.0	7.105e-15	**	9.8
6	1.107e-06	4.0	1.421e-14	**	8.0
7	6.922e-08	4.0	7.105e-15	**	7.1
8	4.327e-09	4.0	1.421e-14	**	6.0

表 3

问题 (5.1) 和 (5.2),  $T = 2$ , 解  $N = 1$ ,  $m = 3$  用于空间半离散化,  $HBVM(k, 2)$  及时步长  $h = 2^{-n}$ 。

其中函数  $f$  (见 (1.1)) 是非多项式的, 具有初始条件

$$u(x, 0) = \exp(2\pi i x), \quad u_t(x, 0) = 2\pi i \exp(2\pi i x), \quad x \in [0, 1]. \quad (5.2)$$

相应的函数 (1.3) 由下式给出

$$\mathcal{H}[u](t) = \frac{1}{2} \int_0^1 |u_t|^2 + |u_x|^2 + \sin^2(|u|^2) dx. \quad (5.3)$$

此外, 问题 (5.1) 和 (5.2) 的解决方案结果为

$$u(x, t) = \rho(t) \exp(2\pi i(x + \omega(t))),$$

与  $\rho(t) \approx 1$  和  $\omega(t)$  实函数和平滑函数, 如图 1 所示。因此, 在 (3.1) 中选择  $N = 1$  和  $m = 3$  在 (3.8) 中足以精确表示解和方程。哈密顿泛函 (5.3) 的对应值由下式给出

$$\mathcal{H}[u] \equiv H_0 = 4\pi^2 + \frac{\sin^2(1)}{2} \approx 39.83. \quad (5.4)$$

在表 2 中，我们列出了使用  $\text{HBVM}(k, s)$  获得的结果，其中  $s = 1$  和  $k = 1, 2, 3$ , and 10，当固定  $T = 2$  并使用时间步长  $h = 2^{-n}$ ,  $n = 1, \dots, 10$ 。类似地，在表 3 中，我们列出了使用  $\text{HBVM}(k, s)$  获得的结果，其中  $s = 2$  和计算解中的误差，已通过数值估计，而  $\text{err}_H$  是数值哈密顿量中的误差，其值由 (5.4) 给出。我们还列出了相应的估计收敛速度 (\*\* 表示已达到舍入误差水平)，以及每步的平均混合迭代次数 (4.21)。根据定理 4.1，从这两个表中的数字可以很容易地推导出  $\text{HBVM}(k, s)$  方法：

- 有规定的阶  $2s$ ；
- 对于较小的  $k$  值，哈密顿误差随  $2k$  的阶数减少，而当使用  $k = 10$  且时间步长小于  $h = 0.25$  时，可以获得实际的能量守恒；
- 混合迭代的平均次数随着时间步长而减少（正如显然预期的那样），此外，对于  $s$  固定，它明显独立于  $k$ 。

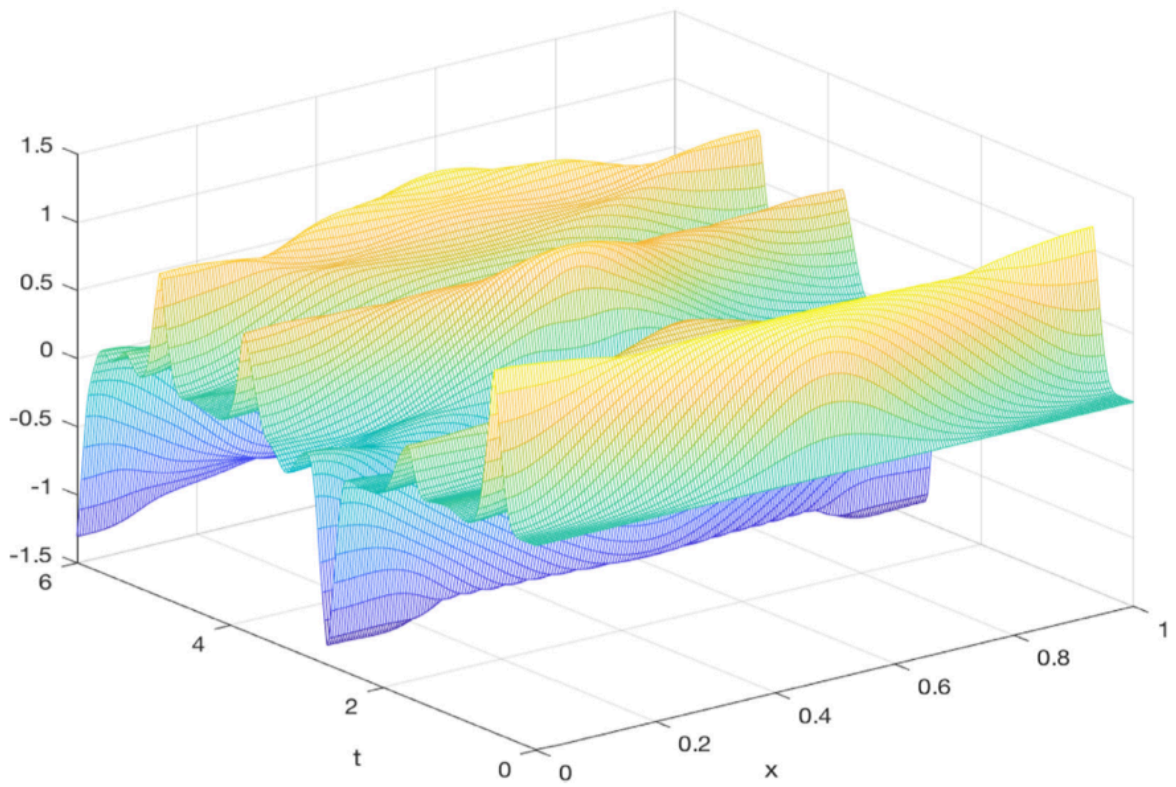
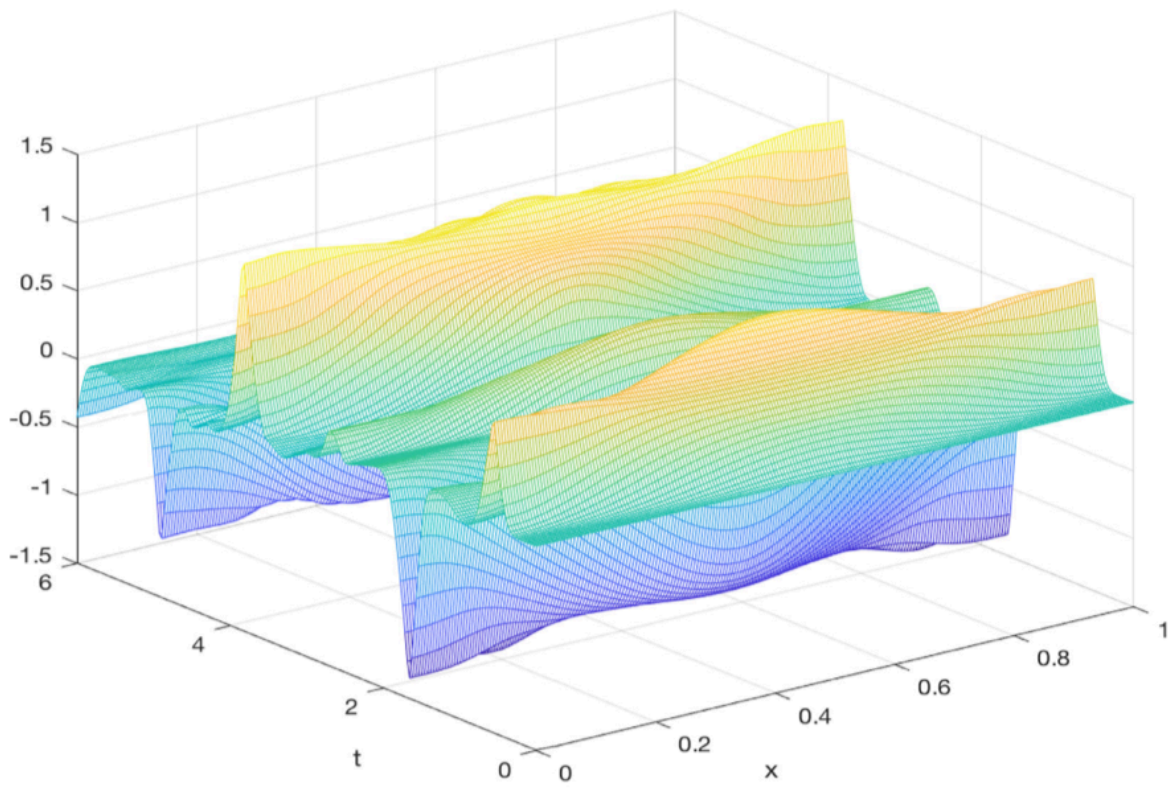


图2 问题 (5.5) 和 (5.6) 解的实部 (上图) 和虚部 (下图)

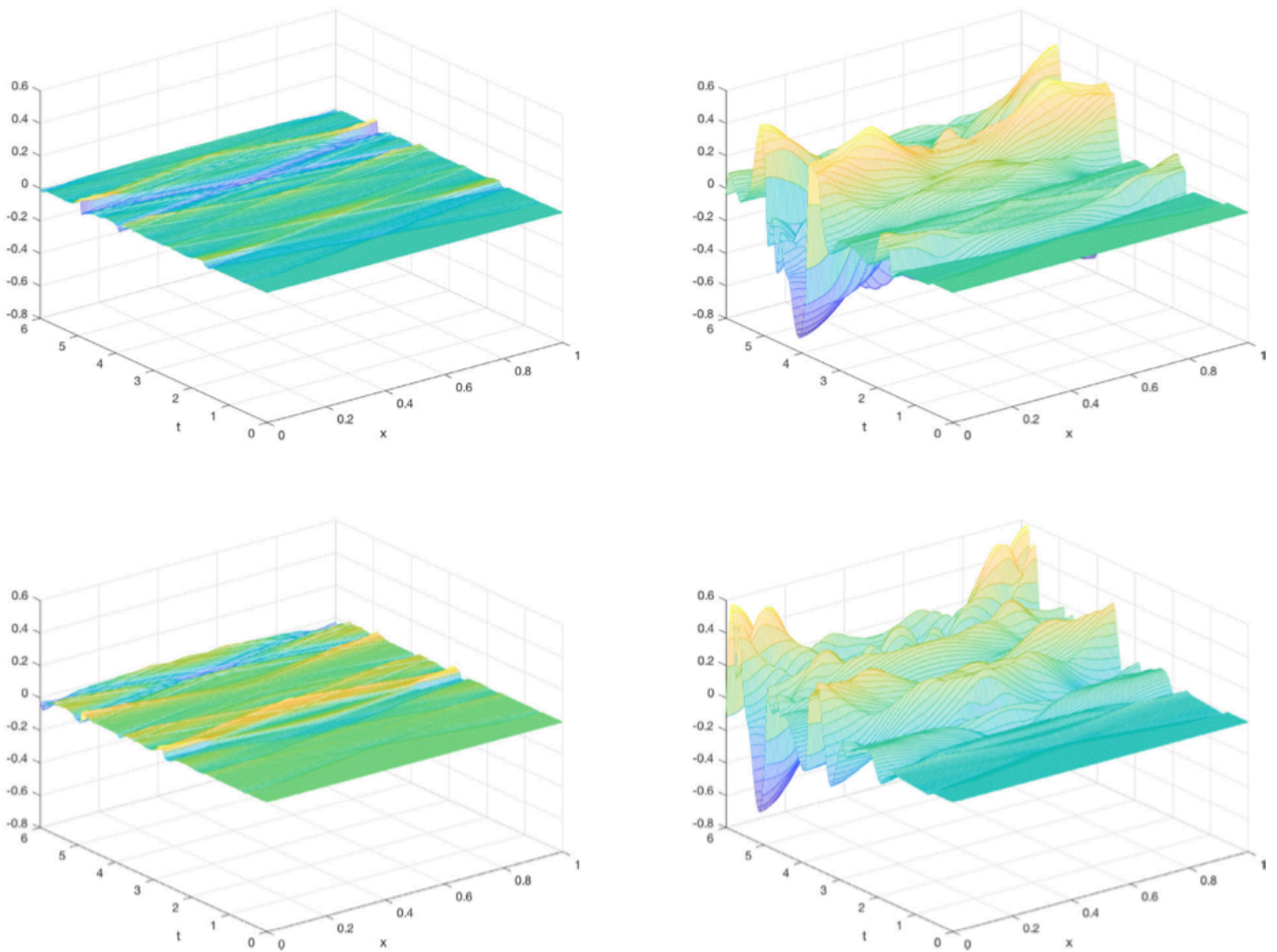


图3 使用 HBVM(20,2) (左图) 和 HBVM(2,2) (右图) 求解问题 (5.5) 和 (5.6) 的实部 (上图) 和虚部 (下图) 中的计算误差) 时间步长  $h = 0.03$

我们观察到，对于这个问题，对于固定的  $h$  和  $s$ ，解决方案的误差大致相同，而与所使用的  $k$  的值无关。然而，当一个人有特定的解决方案时，情况可能不再如此，这可能会有所不同，具体取决于哈密顿泛函的值，正如 [6] 中正弦-戈登方程的明确所示。不幸的是，我们不知道所考虑的方程式的类似情况。(1.1)。然而，正如下一个例子所示，哈密顿泛函的守恒可能是有用的。让我们考虑以下问题，

$$u_{tt} - u_{xx} + 2.2iu_t + (|u|^{18} - 8|u|^6)u = 0, \quad (x, t) \in [0, 1] \times [0, T] \quad (5.5)$$

其中函数  $f$  (参见 (1.1)) 是度  $v = 10$  的多项式，具有初始条件

$$u(x, 0) = 0, \quad u_t(x, 0) = 9 \sin^{10}(\pi x), \quad x \in [0, 1] \quad (5.6)$$

相应的泛函 (1.3) 现在由下式给出

$$\mathcal{H}[u](t) = \frac{1}{2} \int_0^1 |u_t|^2 + |u_x|^2 + \frac{|u|^{20}}{10} - 2|u|^8 dx \quad (5.7)$$

其常数现在由下式给出

$$\mathcal{H}[u] \equiv H_0 = \frac{81}{2} \int_0^1 \sin^{20}(\pi x) \approx 7.136 \quad (5.8)$$

问题 (5.5) 和 (5.6) 解的实部和虚部绘制在图 2 中， $T = 6$ 。选择 (3.1) 中的  $N = 50$  和 (3.8) 中的  $m = 201$  现在适合获得准确的数值解：事实上，哈密顿量的初始值和初始数据都为近似于全机精度。我们现在固定时间步长  $h = 0.03$ ，从而执行 200 个积分步骤，通过使用 4 阶方法 HBVM(2,2) (即辛 2 阶段高斯方法) 和 HBVM(20,2)。根据定理 4.1，后一种方法是节能的。计算的数值解证实了这一点，对于 HBVM(2,2)，最大能量误差为  $\approx 0.41$ ，对于 HBVM(20,2)，最大能量误差为  $1.33 \times 10^{-14}$ 。在图 3 的上图中，我们绘制了计算解的实部中的误差，而下图中是虚部中的误差。此外，左边的地块涉及



HBVM(20,2) 方法, 最大误差分别为  $\approx 5 \times 10^{-2}$  和  $7 \times 10^{-2}$ 。同样, 右侧的图涉及 HBVM(2,2) 方法, 最大误差分别为  $\approx 7 \times 10^{-1}$  和  $6 \times 10^{-1}$ 。然后得出结论, 能量守恒方法提供的解决方案非常准确 (大约一个数量级), w.r.t.由辛 2 级高斯方法提供的一种。因此, 至少在这种情况下, 能量守恒似乎赋予计算的数值解更多的可靠性。

## 6. Conclusions

---

在本文中, 我们考虑了具有周期性边界条件的波算子非线性薛定谔方程的数值解。该问题首先通过傅里叶-伽辽金空间半离散化转化为哈密顿形式。HBVMs 类中的节能 Runge-Kutta 方法随后被用于时间积分, 同时保存系统的能量。还研究了这些方法的有效实现, 表明它们每步的计算复杂度在半离散问题的维度上是线性的, 并且已经在几个测试问题上评估了它们的有效性。

## 参考

---

- [1] Bao WZ, Cai YY. Uniform error estimates of finite difference methods for the nonlinear Schrödinger equation with wave operator. *SIAM J Numer Anal* 2014;20:492-521.
- [2] Bao W, Dong X, Xin J. Comparisons between sine-gordon and perturbed nonlinear Schrödinger equations for modeling light bullets beyond critical collapse. *Physica D* 2010;239:1120-34.
- [3] Barletti L, Brugnano L, Frasca Caccia G, Iavernaro F. Energy-conserving methods for the nonlinear Schrödinger equation. *Appl Math Comput* 2018;318:3-18.
- [4] Bergé L, Colin T. A singular perturbation problem for an envelope equation in plasma physics. *C R Acad Sci Paris Sér I Math* 1995;320(1):31-4.
- [5] Brugnano L, Frasca Caccia G, Iavernaro F. Efficient implementation of gauss collocation and Hamiltonian boundary value methods. *Numer Algorithms* 2014;65:633-50.
- [6] Brugnano L, Frasca Caccia G, Iavernaro F. Energy conservation issues in the numerical solution of the semilinear wave equation. *Appl Math Comput* 2015;270:842-70.
- [7] Brugnano L, Iavernaro F. Line integral methods for conservative problems. Boca Raton, FL: Chapman et Hall/CRC; 2016.
- [8] Brugnano L, Iavernaro F, Trigiante D. Hamiltonian boundary value methods (energy preserving discrete line integral methods). *J Numer Anal Ind Appl Math* 2010;5(1-2):17-37.
- [9] Brugnano L, Iavernaro F, Trigiante D. A note on the efficient implementation of Hamiltonian BVMs. *J Comput Appl Math* 2011;236:375-83.
- [10] Brugnano L, Iavernaro F, Trigiante D. Energy and quadratic invariants preserving integrators based upon gauss collocation formulae. *SIAM J Numer Anal* 2012;50(6):2897-916.
- [11] Bral 2012;50(6):2897-916. 2012;218:8475-85.
- [12] Brugnano L, Iavernaro F, Trigiante D. Analysis of Hamiltonian boundary value methods (HBVMs): a class of energy-preserving Runge-Kutta methods for the numerical solution of polynomial Hamiltonian systems. *Commun Nonlinear Sci Numer Simul* 2015;20:650-67.
- [13] Brugnano L, Magherini C. Blended implementation of block implicit methods for ODEs. *Appl Numer Math* 2002;42:29-45.
- [14] Brugnano L, Magherini C. Recent advances in linear analysis of convergence for splittings for solving ODE problems. *Appl Numer Math* 2009;59:542-57.
- [15] Brugnano L, Magherini C. The BiM code for the numerical solution of ODEs. *J Comput Appl Math* 2004;164-165:145-58.
- [16] Brugnano L, Sun Y. Multiple invariants conserving Runge-Kutta type methods for Hamiltonian problems. *Numer Algorithms* 2014;65:611-32.

- [17] Canuto C, Hussaini MY, Quarteroni A, Zang TA. Spectral methods in fluid dynamics. New York: Springer-Verlag; 1988.
- [18] Dahlquist G, Björk A. Numerical methods in scientific computing, 1. Philadelphia: SIAM; 2008.
- [19] Guo L, Xu Y. Energy conserving local discontinuous Galerkin methods for the nonlinear Schrödinger equation with wave operator. *J Sci Comput* 2015;65:622-47.
- [20] Hu H, Chen Y. A conservative difference scheme for two-dimensional nonlinear Schrödinger equation with wave operator. *Numer Methods Partial Differ Equ* 2016;32(3):862-76.
- [21] Komech A, Vainberg B. On asymptotic stability of stationary solutions to nonlinear wave and Klein-Gordon equations. *Arch Rational Mech Anal* 1996;134(3):227-48.
- [22] Kurganov A, Rauch J, et al. The order of accuracy of quadrature formulae for periodic functions, *Advances in phase space analysis of partial differential equations*. Bove **A**, et al., editors. Boston: Birkhäuser; **2009**.
- [23] Li X, Zhang L, Wang S. A compact finite difference scheme for the nonlinear Schrödinger equation with wave operator. *Appl Math Comput* 2012;219:3187-97.
- [24] Li X, Zhang L, Zhang T. A new numerical scheme for the nonlinear Schrödinger equation with wave operator. *J Appl Math Comput* 2017;54:109-25.
- [25] Machihara S, Nakanishi K, Ozawa T. Nonrelativistic limit in the energy space for nonlinear Klein-Gordon equations. *Math Ann* 2002;322:603-21.
- [26] Najman B. The nonrelativistic limit of the nonlinear Klein-Gordon equation. *Nonlinear Anal* 1990;15(3):217-28.
- [27] Sanz-Serna JM, Calvo MP. Numerical Hamiltonian problems. London: Chapman & Hall; **1994**.
- [28] Schoene AY. On the nonrelativistic limits of the Klein-Gordon and dirac equations. *J Math Anal Appl* 1979;71(1):36-47.
- [29] Vong S-W, Meng Q-J, Lei S-L. On a discrete-time collocation method for the nonlinear Schrödinger equation with wave operator. *Numer Methods Partial Differ Equ* 2013;29(2):693-705.
- [30] Wang J. Multisymplectic fourier pseudospectral method for the nonlinear Schrödinger equation with wave operator. *J Comput Math* 2007;25(1):31-48.
- [31] Wang L, Kong L, Zhang L, Zhou W, Zheng X. Multi-symplectic preserving integrator for the Schrödinger equation with wave operator. *Appl Math Model* 2015;39:6817-29.
- [32] Wang S, Zhang L, Fan R. Discrete-time orthogonal spline collocation methods for the nonlinear Schrödinger equation with wave operator. *J Comput Appl Math* 2011;235:1993-2005.
- [33] Wang T, Zhang L. Analysis of some new conservative schemes for nonlinear Schrödinger equation with wave operator. *Appl Math Comput* 2006;182:1780-94.
- [34] Xin JX. Modeling light bullets with the two-dimensional sine-Gordon equation. *Physica D* 2000;135:345-68.
- [35] <https://archimede.dm.uniba.it/testset/testsetivpsolvers/>.