

DOI: 10.11830/ISSN.1000-5013.202206030



求解耦合非线性 Klein-Gordon-Schrödinger 方程 的能量稳定方法

郭姣姣, 庄清渠

(华侨大学 数学科学学院, 福建 泉州 362021)

摘要: 研究基于指数标量辅助变量方法的耦合非线性 Klein-Gordon-Schrödinger 方程有效数值方法. 首先, 采用指数标量辅助变量处理方程的非线性项, 构造求解方程的无条件能量稳定格式; 然后, 对方程在时间方向上采用 Crank-Nicolson 格式进行离散, 在空间方向上采用紧致差分格式进行离散, 证明全离散格式的修正能量守恒律. 最后, 通过数值算例进行验证. 结果表明: 文中格式具有有效性, 修正能量具有守恒性.

关键词: 耦合非线性 Klein-Gordon-Schrödinger 方程; 指数标量辅助变量方法; 修正能量; 守恒律

中图分类号: O 241.8

文献标志码: A

文章编号: 1000-5013(2023)04-0533-08

Energy Stable Method for Coupled Nonlinear Klein-Gordon-Schrödinger Equation

GUO Jiaojiao, ZHUANG Qingqu

(School of Mathematical Sciences, Huaqiao University, Quanzhou 362021, China)

Abstract: The efficient numerical method of coupled nonlinear Klein-Gordon-Schrödinger equation based on exponential scalar auxiliary variable method is studied. Firstly, the nonlinear terms of the equation are treated with exponential scalar auxiliary variables, and an unconditional energy stable scheme is constructed to the solution of the equation. Then, the equation is discretized by Crank-Nicolson scheme in time direction and by compact difference scheme in space direction, the modified energy conservation law of the full discrete scheme is proved. Finally, it is verified by numerical examples that the proposed scheme is effective and the modified energy is conserved.

Keywords: coupled nonlinear Klein-Gordon-Schrödinger equation; exponential scalar auxiliary variable method; modified energy; conservation law

耦合非线性 Klein-Gordon-Schrödinger(KGS)方程描述了复中子场和中性介子场之间相互作用的经典动力学过程, 在量子场理论中起着重要作用^[1]. 近几十年来, KGS 方程得到较为广泛的关注与研究. 夏静娜等^[2]利用齐次平衡原则导出 KGS 方程的精确孤立波解. Xiang^[3]构造具有周期初值的 KGS 方程的守恒型谱逼近格式, 并进行误差分析. Zhang^[4]对 KGS 方程构造带参数 θ 的守恒型差分格式, 并进行收敛性分析. Chen 等^[5]利用 Richardson 外推法构造一种线性隐式有限差分格式, 该格式在时间方向上具有二阶精度, 在空间方向上具有八阶精度. Hong 等^[6]对 KGS 方程的 5 种差分格式的经典保守

收稿日期: 2022-06-22

通信作者: 庄清渠(1980-), 男, 副教授, 博士, 主要从事微分方程数值解法的研究. E-mail: qqzhuang@hqu.edu.cn.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11771083); 福建省自然科学基金资助项目(2021J01306)

性质进行比较,并对比这些格式的数值. Zhang 等^[7]基于两种不同的离散梯度得到 KGS 方程的两种能量守恒格式.

基于近年发展起来的标量辅助变量(SAV)方法^[8-9]及拉格朗日乘子法^[10-11],Zhang 等^[12]构造了求解 KGS 方程的 3 种保结构数值求解格式,并对 3 种格式进行比较. 基于拉格朗日乘子法的格式需要求解 3 组常系数线性系统及 1 个非线性代数系统,而基于传统的 SAV 方法的格式只需求解两组常系数线性系统. 然而,为了保证格式的稳定性,传统的 SAV 方法需在计算前给定一个常数 C_0 ($C_0>0$),使模型满足非线性自由能与 C_0 的和大于零. 由于 C_0 的取值会影响数值逼近结果的精度^[13],为了消除传统的 SAV 方法中 C_0 取值的影响,Liu 等^[14]在 SAV 方法的基础上提出求解相场模型的指数标量辅助变量(ESAV)方法,严格证明 ESAV 半离散格式的无条件能量稳定性,并给出详细的计算过程. 基于此,本文提出一种求解耦合非线性 Klein-Gordon-Schrödinger 方程的能量稳定方法.

1 问题与 ESAV 格式

考虑带周期边界条件的 KGS 方程的无条件能量稳定数值求解格式,即

$$\left. \begin{aligned} i\phi_t + \alpha\phi_{xx} + \phi\phi &= 0, & x \in \Omega, \quad t \in (0, T], \\ \phi_u - \phi_{xx} + \phi - |\phi|^2 &= 0, & x \in \Omega, \quad t \in (0, T]. \end{aligned} \right\} \tag{1}$$

式(1)中: $i=\sqrt{-1}; \Omega=[a, b]; \phi(x, t)$ 为复值函数; $\phi(x, t)$ 为实值函数; α 为实常数.

式(1)的初始条件为 $\phi(x, 0)=\phi_0(x), \phi(x, 0)=\phi_0(x), \phi_t(x, 0)=\phi_1(x), x \in \Omega$.

式(1)满足电荷(Q)守恒律和能量(E)守恒律,有

$$Q(t) = \int_{\Omega} |\phi(x, t)|^2 dx = \int_{\Omega} |\phi(x, 0)|^2 dx = Q(0),$$

$$E(t) = \int_{\Omega} (\alpha |\phi_x(x, t)|^2 + \frac{1}{2} \phi(x, t)^2 + \frac{1}{2} \phi_t(x, t)^2 + \frac{1}{2} \phi_x(x, t)^2 - \phi(x, t) |\phi(x, t)|^2) dx = E(0).$$

为了采用 ESAV 方法求解式(1),引入指数标量辅助变量 $r, r = \exp(E_1(t)) = \exp(\int_{\Omega} |\phi|^2 dx)$,

则式(1)可改写为

$$\left. \begin{aligned} i\phi_t &= -\alpha\phi_{xx} - r \cdot H_1(\phi, \phi), & x \in \Omega, \quad t \in (0, T], \\ u_t &= \phi_{xx} - \phi + r \cdot H_2(\phi, \phi), & x \in \Omega, \quad t \in (0, T], \\ \phi_t &= u, & x \in \Omega, \quad t \in (0, T], \\ \frac{d(\ln r)}{dt} &= r \int_{\Omega} (2\text{Re}(H_1(\phi, \phi) \cdot \bar{\phi}_t) + H_2(\phi, \phi) \cdot \phi_t) dx, & x \in \Omega, \quad t \in (0, T]. \end{aligned} \right\} \tag{2}$$

式(2)中: $H_1(\phi, \phi) = \frac{\phi\phi}{\exp(E_1(t))} = \frac{\phi\phi}{\exp(\int_{\Omega} |\phi|^2 dx)}$; $H_2(\phi, \phi) = \frac{|\phi|^2}{\exp(E_1(t))} = \frac{|\phi|^2}{\exp(\int_{\Omega} |\phi|^2 dx)}$.

定理 1 式(2)满足修正能量守恒律,有

$$\frac{d\tilde{E}}{dt} = 0. \tag{3}$$

式(3)中: \tilde{E} 为修正能量, $\tilde{E} = \frac{1}{2} \|u\|^2 + \frac{1}{2} \|\phi_x\|^2 + \frac{1}{2} \|\phi\|^2 + \alpha \|\phi_x\|^2 - \ln r$.

证明:将式(2)中第 1 个方程与 $2\phi_t$ 作内积,并取实部;式(2)中第 2,3 个方程分别与 $u, -(\phi_{xx} - \phi + r \cdot H_2(\phi, \phi))$ 作内积. 将以上作内积所得的 3 个式子相加,并结合式(2)中最后一个方程,即可证得式(3). 证明完毕.

2 全离散格式

为了得到式(2)的全离散格式,在空间方向上采用紧致差分格式进行离散,在时间方向上采用 Crank-Nicolson 格式进行离散. 将 $[a, b]$ 分成 N 个部分,记空间步长为 $h = \frac{b-a}{N}$,空间节点为 $x_j = a + jh$

($j=0,1,\cdots,N$). 令 $\tau>0$ 为时间步长, 并记 $M=\frac{T}{\tau}, t_n=n\tau, n=0,1,\cdots,M$. 记函数 $f(x,t)$ 在节点 (x_j, t_n) 上的解析解为 $f(x_j, t_n)$, 它的数值解相应地记为 f_j^n . 引入算子 $\delta_x, \delta_{\bar{x}}, \delta_x^2, A_h$, 有

$$\delta_x f_j^n = \frac{f_{j+1}^n - f_j^n}{h}, \quad \delta_{\bar{x}} f_j^n = \frac{f_j^n - f_{j-1}^n}{h}, \quad \delta_x^2 f_j^n = \frac{f_{j+1}^n - 2f_j^n + f_{j-1}^n}{h^2}, \quad A_h f_j^n = \frac{f_{j+1}^n + 10f_j^n + f_{j-1}^n}{12}.$$

由文献[15]可知: $A_h\left(\frac{\partial^2 f^n}{\partial x^2}\right) = \delta_x^2 f_j^n + O(h^4)$.

再记

$$\boldsymbol{D} = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \\ & 1 & -2 & 1 \\ 1 & \cdots & 1 & -2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{K} = \frac{1}{12} \begin{bmatrix} 10 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 10 & 1 & \\ & 1 & 10 & 1 \\ 1 & \cdots & 1 & 10 \end{bmatrix}.$$

式中: \boldsymbol{D} 为差分算子 δ_x^2 对应的 N 阶实对称矩阵; \boldsymbol{K} 为紧致差分算子 A_h 对应的 N 阶实对称正定矩阵, 因此, 存在实对称正定矩阵 \boldsymbol{P} , 使 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{K}^{-1}$.

对于任意 $\boldsymbol{f}, \boldsymbol{g} \in V_h = \{\boldsymbol{f} | \boldsymbol{f} = (f_1, \cdots, f_N)^T, f_0 = f_N\}$, 分别定义内积和范数为 $(\boldsymbol{f}, \boldsymbol{g})_h = h \sum_{j=1}^N f_j \bar{g}_j$, $\|\boldsymbol{f}\|_h^2 = h \sum_{j=1}^N |f_j|^2$.

在 $(x_j, t_{n+1/2})$ 处考虑式(2)中前两个方程, 将 A_h 作用于方程两端, 并略去余项, 可得

$$\left. \begin{aligned} \frac{i}{\tau} A_h(\psi_j^{n+1} - \psi_j^n) &= -\frac{\alpha}{2} \delta_x^2(\psi_j^{n+1} + \psi_j^n) - A_h(\tilde{r}^{n+1/2} \cdot \tilde{H}_1^{n+1/2})_j, \\ \frac{1}{\tau} A_h(u_j^{n+1} - u_j^n) &= \frac{1}{2} \delta_x^2(\phi_j^{n+1} + \phi_j^n) - A_h\left(\frac{\phi_j^{n+1} + \phi_j^n}{2} + \tilde{r}^{n+1/2} \cdot \tilde{H}_2^{n+1/2}\right)_j. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

式(4)中: $\tilde{r}^{n+1/2} = \frac{3}{2}r^n - \frac{1}{2}r^{n-1}$; $\tilde{H}_1^{n+1/2} = H_1(\tilde{\psi}^{n+1/2}, \tilde{\phi}^{n+1/2})$; $\tilde{H}_2^{n+1/2} = H_2(\tilde{\psi}^{n+1/2}, \tilde{\phi}^{n+1/2})$; $\tilde{\psi}^{n+1/2} = \frac{3}{2}\psi^n - \frac{1}{2}\psi^{n-1}$; $\tilde{\phi}^{n+1/2} = \frac{3}{2}\phi^n - \frac{1}{2}\phi^{n-1}$.

因此, 式(1)的全离散 Crank-Nicolson 紧致差分格式可用矩阵向量积形式表示, 有

$$\left. \begin{aligned} \frac{i}{\tau}(\boldsymbol{\psi}^{n+1} - \boldsymbol{\psi}^n) &= -\frac{\alpha}{2} \boldsymbol{PD}(\boldsymbol{\psi}^{n+1} + \boldsymbol{\psi}^n) - \tilde{r}^{n+1/2} \cdot \tilde{\boldsymbol{H}}_1^{n+1/2}, \\ \frac{1}{\tau}(\boldsymbol{u}^{n+1} - \boldsymbol{u}^n) &= \frac{1}{2} \boldsymbol{PD}(\boldsymbol{\phi}^{n+1} + \boldsymbol{\phi}^n) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\phi}^{n+1} + \boldsymbol{\phi}^n) + \tilde{r}^{n+1/2} \cdot \tilde{\boldsymbol{H}}_2^{n+1/2}, \\ \frac{1}{\tau}(\boldsymbol{\phi}^{n+1} - \boldsymbol{\phi}^n) &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{u}^{n+1} + \boldsymbol{u}^n), \\ \ln r^{n+1} - \ln r^n &= \tilde{r}^{n+1/2} (2\text{Re}(\tilde{\boldsymbol{H}}_1^{n+1/2}, \boldsymbol{\psi}^{n+1} - \boldsymbol{\psi}^n)_h + (\tilde{\boldsymbol{H}}_2^{n+1/2}, \boldsymbol{\phi}^{n+1} - \boldsymbol{\phi}^n)_h). \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

式(5)的初始值 $\boldsymbol{\psi}^1, \boldsymbol{\phi}^1, \boldsymbol{u}^1, r^1$ 相应地通过隐格式进行计算, 有

$$\left. \begin{aligned} \frac{i}{\tau}(\boldsymbol{\psi}^1 - \boldsymbol{\psi}^0) &= -\frac{\alpha}{2} \boldsymbol{PD}(\boldsymbol{\psi}^1 + \boldsymbol{\psi}^0) - \frac{r^1 + r^0}{2} \cdot \boldsymbol{H}_1^{\frac{1}{2}}, \\ \frac{1}{\tau}(\boldsymbol{u}^1 - \boldsymbol{u}^0) &= \frac{1}{2} \boldsymbol{PD}(\boldsymbol{\phi}^1 + \boldsymbol{\phi}^0) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\phi}^1 + \boldsymbol{\phi}^0) + \frac{r^1 + r^0}{2} \cdot \boldsymbol{H}_2^{\frac{1}{2}}, \\ \frac{1}{\tau}(\boldsymbol{\phi}^1 - \boldsymbol{\phi}^0) &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{u}^1 + \boldsymbol{u}^0), \\ \ln r^1 - \ln r^0 &= \frac{r^1 + r^0}{2} (2\text{Re}(\boldsymbol{H}_1^{\frac{1}{2}}, \boldsymbol{\psi}^1 - \boldsymbol{\psi}^0)_h + (\boldsymbol{H}_2^{\frac{1}{2}}, \boldsymbol{\phi}^1 - \boldsymbol{\phi}^0)_h). \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

式(6)中: $\boldsymbol{H}_1^{\frac{1}{2}} = \boldsymbol{H}_1\left(\frac{\boldsymbol{\psi}^1 + \boldsymbol{\psi}^0}{2}, \frac{\boldsymbol{\phi}^1 + \boldsymbol{\phi}^0}{2}\right)$; $\boldsymbol{H}_2^{\frac{1}{2}} = \boldsymbol{H}_2\left(\frac{\boldsymbol{\psi}^1 + \boldsymbol{\psi}^0}{2}, \frac{\boldsymbol{\phi}^1 + \boldsymbol{\phi}^0}{2}\right)$.

引理 1^[16]: 设 \boldsymbol{P} 为任一实值对称正定矩阵, 若网格函数 $\boldsymbol{f}^n \in V_h$, 则有

$$\text{Im}(\boldsymbol{P} \delta_{\bar{x}} \boldsymbol{f}^n, \boldsymbol{f}^n) = 0, \quad \text{Re}(\boldsymbol{P} \delta_{\bar{x}} \boldsymbol{f}^{n+1/2}, \boldsymbol{f}^{n+1} - \boldsymbol{f}^n) = -\frac{1}{2}(\|\boldsymbol{R} \delta_x \boldsymbol{f}^{n+1}\|^2 - \|\boldsymbol{R} \delta_x \boldsymbol{f}^n\|^2).$$

式中: \mathbf{R} 是对 \mathbf{P} 进行 cholesky 分解得到的实值上三角矩阵, 满足 $\mathbf{P}=\mathbf{R}^{\mathrm{T}} \mathbf{R}$.

定理 2 式(5)满足修正能量守恒律, 有

$$\widetilde{E}^{n+1}=\widetilde{E}^n, \quad n=0,1,2, \cdots, M-1 .$$

式中: \widetilde{E}^k 为全离散格式下的修正能量, $\widetilde{E}^k=\alpha\left\|\mathbf{R} \delta_x \boldsymbol{\psi}^k\right\|_h^2+\frac{1}{2}\left\|\mathbf{u}^k\right\|_h^2+\frac{1}{2}\left\|\mathbf{R} \delta_x \boldsymbol{\phi}^k\right\|_h^2+\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{\phi}^k\right\|_h^2-\ln r^k$.

证明: 对任意 $n \geqslant 1$, 将式(5)第 1 个方程两端与 $2\left(\boldsymbol{\psi}^{n+1}-\boldsymbol{\psi}^n\right)$ 作内积. 然后, 取实部, 根据引理 1 可得

$$a h \sum_{j=1}^N\left|\mathbf{R} \delta_x \phi_j^{n+1}\right|^2-a h \sum_{j=1}^N\left|\mathbf{R} \delta_x \phi_j^n\right|^2=\widetilde{r}^{n+1 / 2} \cdot h \sum_{j=1}^N 2 \operatorname{Re}\left(\left(\widetilde{H}_1^{n+1 / 2}\right)_j \cdot \overline{\phi_j^{n+1}-\phi_j^n}\right) .$$

将式(5)第 2,3 个方程两端分别与 $\tau \cdot \frac{\mathbf{u}^{n+1}+\mathbf{u}^n}{2},-\tau \cdot\left(\frac{1}{2} \mathbf{P D}\left(\boldsymbol{\phi}^{n+1}+\boldsymbol{\phi}^n\right)-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\phi}^{n+1}+\boldsymbol{\phi}^n\right)+\widetilde{r}^{n+1 / 2} \cdot\right.$

$\left.\widetilde{H}_2^{n+1 / 2}\right)$ 作内积再相加, 根据引理 1, 可得 $\frac{\left\|\mathbf{u}^{n+1}\right\|_h^2-\left\|\mathbf{u}^n\right\|_h^2}{2}+\frac{h}{2}\left(\sum_{j=1}^N\left|\mathbf{R} \delta_x \phi_j^{n+1}\right|^2-\sum_{j=1}^N\left|\mathbf{R} \delta_x \phi_j^n\right|^2\right)+$
 $\frac{\left\|\boldsymbol{\phi}^{n+1}\right\|_h^2-\left\|\boldsymbol{\phi}^n\right\|_h^2}{2}=\widetilde{r}^{n+1 / 2} \cdot h \sum_{j=1}^N\left(\left(\widetilde{H}_2^{n+1 / 2}\right)_j \cdot\left(\phi_j^{n+1}-\phi_j^n\right)\right) .$

将上述作内积后的两个等式相加, 并利用式(5)中最后一个方程可得 $\alpha\left\|\mathbf{R} \delta_x \boldsymbol{\psi}^{n+1}\right\|_h^2+\frac{1}{2}\left\|\mathbf{u}^{n+1}\right\|_h^2+$

$$\frac{1}{2}\left\|\mathbf{R} \delta_x \boldsymbol{\phi}^{n+1}\right\|_h^2+\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{\phi}^{n+1}\right\|_h^2-\ln r^{n+1}=\alpha\left\|\mathbf{R} \delta_x \boldsymbol{\psi}^n\right\|_h^2+\frac{1}{2}\left\|\mathbf{u}^n\right\|_h^2+\frac{1}{2}\left\|\mathbf{R} \delta_x \boldsymbol{\phi}^n\right\|_h^2+\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{\phi}^n\right\|_h^2-\ln r^n .$$

由此 $\widetilde{E}^{n+1}=\widetilde{E}^n, n=1,2, \cdots, M-1$. 利用式(6), 类似可证明 $\widetilde{E}^1=\widetilde{E}^0$. 证明完毕.

式(5)的求解. 首先, 将式(5)前 3 个方程分别改写为

$$\frac{\mathrm{i}}{\tau} \boldsymbol{\psi}^{n+1}+\frac{\alpha}{2} \mathbf{P D} \boldsymbol{\psi}^{n+1}=\mathbf{F}_1, \tag{7}$$

$$\frac{1}{2} \boldsymbol{\phi}^{n+1}-\frac{1}{2} \mathbf{P D} \boldsymbol{\phi}^{n+1}+\frac{1}{\tau} \mathbf{u}^{n+1}=\mathbf{F}_2, \tag{8}$$

$$\frac{1}{\tau} \boldsymbol{\phi}^{n+1}-\frac{1}{2} \mathbf{u}^{n+1}=\mathbf{F}_3 . \tag{9}$$

式(7)~(9)中: $\mathbf{F}_1=\frac{\mathrm{i}}{\tau} \boldsymbol{\psi}^n-\frac{\alpha}{2} \mathbf{P D} \boldsymbol{\psi}^n-\widetilde{r}^{n+1 / 2} \cdot \widetilde{H}_1^{n+1 / 2} ; \mathbf{F}_2=\frac{1}{2} \mathbf{P D} \boldsymbol{\phi}^n-\frac{1}{2} \boldsymbol{\phi}^n+\frac{1}{\tau} \mathbf{u}^n+\widetilde{r}^{n+1 / 2} \cdot \widetilde{H}_2^{n+1 / 2} ; \mathbf{F}_3=$
 $\frac{1}{\tau} \boldsymbol{\phi}^n+\frac{1}{2} \mathbf{u}^n$.

因此, 由式(7)可解得 $\boldsymbol{\psi}^{n+1}$. 联立式(8), (9), 可得

$$\frac{1}{2} \boldsymbol{\phi}^{n+1}+\frac{2}{\tau} \boldsymbol{\phi}^{n+1}-\frac{1}{2} \mathbf{P D} \boldsymbol{\phi}^{n+1}=\mathbf{F}_2+\frac{2}{\tau} \mathbf{F}_3 . \tag{10}$$

由此可得 $\boldsymbol{\phi}^{n+1}$, 进而有

$$\mathbf{u}^{n+1}=\frac{2}{\tau} \boldsymbol{\phi}^{n+1}-2 \mathbf{F}_3 . \tag{11}$$

最后, 由式(5)的最后一个方程可得

$$r^{n+1}=r^n \cdot \exp \left(\widetilde{r}^{n+1 / 2}\left(2 \operatorname{Re}\left(\widetilde{H}_1^{n+1 / 2}, \boldsymbol{\psi}^{n+1}-\boldsymbol{\psi}^n\right)_h+\left(\widetilde{H}_2^{n+1 / 2}, \boldsymbol{\phi}^{n+1}-\boldsymbol{\phi}^n\right)_h\right)\right) . \tag{12}$$

此外, 初始值 $\boldsymbol{\psi}^1, \boldsymbol{\phi}^1, \mathbf{u}^1, r^1$ 可通过式(6), 采用预估校正法进行类似的求解.

全离散格式(式(5), (6))可以通过以下 4 个步骤快速求解. 1) 通过式(6)可得初始值 $\boldsymbol{\psi}^1, \boldsymbol{\phi}^1, \mathbf{u}^1, r^1$; 2) 计算 $\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \mathbf{F}_3$; 3) 依次从式(7), (10), (11)求解 $\boldsymbol{\psi}^{n+1}, \boldsymbol{\phi}^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}$; 4) 由式(12)可得 r^{n+1} .

3 数值实验

将全离散格式进行数值实验, 验证该格式在时间方向上具有二阶精度, 在空间方向上具有四阶精度, 能够有效地保持修正能量 \widetilde{E} 的守恒, 并模拟孤立波的演化行为. 定义数值解的 L_{∞} 误差为

$$\left\|e_{\psi}^n\right\|_{\infty}=\max _j\left|\psi_j^n-\psi\left(x_j, t_n\right)\right|, \quad\left\|e_{\phi}^n\right\|_{\infty}=\max _j\left|\phi_j^n-\phi\left(x_j, t_n\right)\right|, \quad\left\|e_u^n\right\|_{\infty}=\max _j\left|u_j^n-u\left(x_j, t_n\right)\right| .$$

同时记电荷误差 $e_Q^n = |Q^n - Q^0|$, 能量误差 $e_E^n = |E^n - E^0|$, 修正能量误差 $e_{\tilde{E}}^n = |\tilde{E}^n - \tilde{E}^0|$.
定义收敛阶 Rate 为

$$\text{Rate} = \log\left(\frac{\|e_s^n(k+1)\|_\infty}{\|e_s^n(k)\|_\infty}\right) / \log\left(\frac{I_{k+1}}{I_k}\right).$$

式中: e_s^n 可分别表示 $e_\psi^n, e_\phi^n, e_u^n$; I 可分别表示 h, τ .

算例 1 在数值实验中选取初始条件, 有

$$\left. \begin{aligned} \phi_0(x, v, x_0) &= \frac{3\sqrt{2}}{4\sqrt{1-v^2}} \operatorname{sech}^2\left(\frac{1}{2\sqrt{1-v^2}}(x-x_0)\right) \exp(ivx), \\ \phi_1(x, v, x_0) &= \frac{3\sqrt{2}}{4(1-v^2)} \operatorname{sech}^2\left(\frac{1}{2\sqrt{1-v^2}}(x-x_0)\right), \\ \phi_1(x, v, x_0) &= -\frac{3}{4\sqrt{(1-v^2)^3}} \frac{\operatorname{sech}\left(\frac{1}{2\sqrt{1-v^2}}(x-x_0)\right)}{\cosh^3\left(\frac{1}{2\sqrt{1-v^2}}(x-x_0)\right)}. \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

式(13)中: $|v|$ 为波的传播速度, 且 $|v| < 1$; x_0 为初始常数.

此时, 式(1)具有解析孤立波解^[5,7], 即

$$\left. \begin{aligned} \phi(x, t, v, x_0) &= \frac{3\sqrt{2}}{4\sqrt{1-v^2}} \operatorname{sech}^2\left(\frac{1}{2\sqrt{1-v^2}}(x-vt-x_0)\right) \exp\left(i\left(vx + \frac{1-v^2+v^4}{2(1-v^2)}t\right)\right), \\ \phi(x, t, v, x_0) &= \frac{3\sqrt{2}}{4(1-v^2)} \operatorname{sech}^2\left(\frac{1}{2\sqrt{1-v^2}}(x-vt-x_0)\right), \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

计算中取参数 $\alpha = 0.5, v = 0.3, x_0 = -5, \Omega = [-40, 40]$.

首先, 检验时间方向的精度. 数值计算中, 固定空间步长 $h = 0.1$. 不同时间步长下数值解在 $T = 1$ 时刻的误差及相应的收敛阶, 如表 1 所示. 表 1 中: $\text{Rate}_\psi, \text{Rate}_\phi, \text{Rate}_u$ 分别为 $\|e_\psi^n\|_\infty, \|e_\phi^n\|_\infty, \|e_u^n\|_\infty$ 的收敛阶. 由表 1 可知: 格式在时间方向上是二阶收敛的.

表 1 $h = 0.1$ 时的误差及收敛阶
Tab. 1 Errors and convergence orders when $h = 0.1$

τ	$\ e_\psi^n\ _\infty$	Rate_ψ	$\ e_\phi^n\ _\infty$	Rate_ϕ	$\ e_u^n\ _\infty$	Rate_u
0.100 00	0.002 7	—	$9.273\ 0 \times 10^{-4}$	—	0.002 0	—
0.050 00	$7.360\ 1 \times 10^{-4}$	1.875 2	$2.701\ 1 \times 10^{-4}$	1.779 5	$5.333\ 0 \times 10^{-4}$	1.907 0
0.025 00	$1.917\ 0 \times 10^{-4}$	1.940 9	$7.195\ 6 \times 10^{-5}$	1.908 4	$1.357\ 1 \times 10^{-4}$	1.974 4
0.012 50	$4.833\ 3 \times 10^{-5}$	1.987 8	$1.814\ 5 \times 10^{-5}$	1.987 5	$3.378\ 8 \times 10^{-5}$	2.005 9
0.006 25	$1.166\ 9 \times 10^{-5}$	2.050 3	$4.245\ 0 \times 10^{-6}$	2.095 7	$8.049\ 9 \times 10^{-6}$	2.069 5

其次, 检验空间方向的精度. 数值计算中, 固定时间步长 $\tau = 0.000\ 1$. 不同空间步长下数值解在 $T = 1$ 时刻的误差及相应的收敛阶, 如表 2 所示. 由表 2 可知: 文中格式在空间方向上是四阶收敛的.

表 2 $\tau = 0.000\ 1$ 时的误差及收敛阶
Tab. 2 Errors and convergence orders when $\tau = 0.000\ 1$

h	$\ e_\psi^n\ _\infty$	Rate_ψ	$\ e_\phi^n\ _\infty$	Rate_ϕ	$\ e_u^n\ _\infty$	Rate_u
1.000 0	0.014 7	—	0.008 0	—	0.012 9	—
0.500 0	$6.546\ 9 \times 10^{-4}$	4.488 9	$4.332\ 1 \times 10^{-4}$	4.206 9	$6.358\ 7 \times 10^{-4}$	4.342 5
0.250 0	$4.092\ 4 \times 10^{-5}$	3.999 8	$2.565\ 1 \times 10^{-5}$	4.078 0	$3.813\ 8 \times 10^{-5}$	4.059 4
0.125 0	$2.530\ 7 \times 10^{-6}$	4.015 3	$1.606\ 3 \times 10^{-6}$	3.997 2	$2.357\ 9 \times 10^{-6}$	4.015 7
0.062 5	$1.526\ 3 \times 10^{-7}$	4.051 4	$9.365\ 8 \times 10^{-8}$	4.100 2	$1.721\ 8 \times 10^{-7}$	3.775 5

取空间步长 $h = 0.1$, 时间步长 $\tau = 0.01$. $|\phi|, \phi$ 的精确解及数值解在不同时刻的波形图, 如图 1, 2 所示. 由图 1, 2 可知: 文中格式是准确有效的.

为了考察守恒律的保持情况, 取 $h = 0.1, \tau = 0.01, T = 100$ 进行计算. 修正能量 \tilde{E} 和修正能量误差 $e_{\tilde{E}}^n$ 随时间的变化情况, 如图 3, 4 所示. 由图 3, 4 可知: 格式保持修正能量 \tilde{E} 守恒, 与能量守恒定律一致.

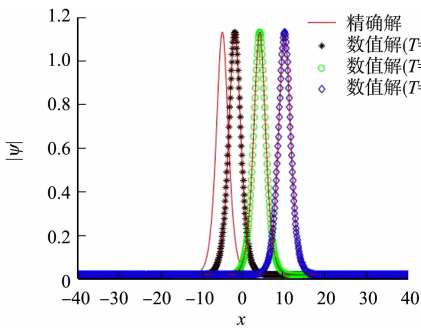


图 1 $|\psi|$ 的数值解与精确解

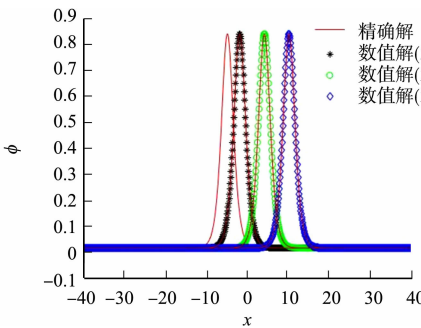


图 2 ϕ 的数值解与精确解

Fig. 1 Numerical solution and exact solution of $|\psi|$ Fig. 2 Numerical solution and exact solution of ϕ
当 $h=0.1, \tau=0.1, 0.01, 0.001$ 时, 数值计算得到的电荷误差 e_Q^n 及能量误差 e_E^n , 如图 5, 6 所示. 由图 5, 6 可知: 电荷误差和能量误差随着时间步长的减小而减小.

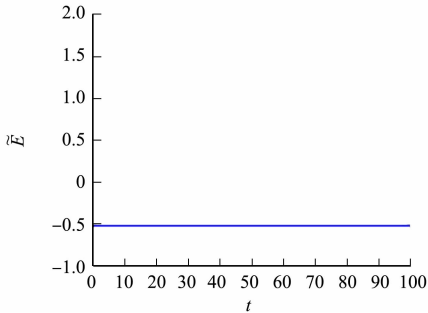


图 3 修正能量随着时间的变化情况

Fig. 3 Changes of modified energy with time

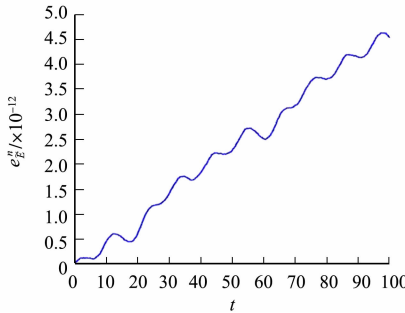


图 4 修正能量误差随着时间的变化情况

Fig. 4 Changes of modified energy error with time

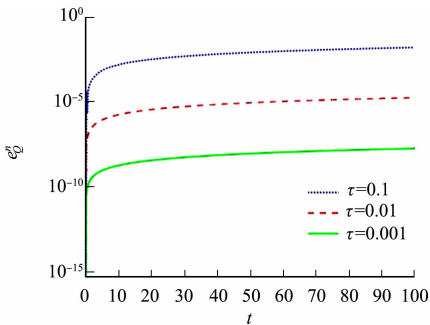


图 5 电荷误差随着时间的变化情况

Fig. 5 Changes of electric error with time

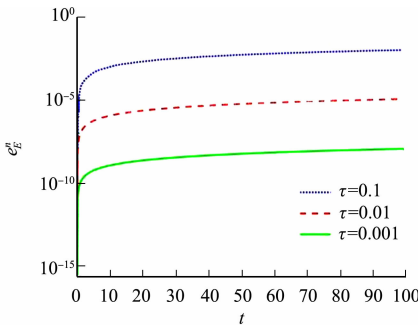


图 6 能量误差随着时间的变化情况

Fig. 6 Changes of energy error with time

算例 2 考虑式(1)具有两个相向碰撞的孤立波的演化行为, 分别为对称碰撞的孤立波和非对称碰撞的孤立波, 初始条件为

$$\left. \begin{aligned} \psi_0 &= \psi(x, 0, v_1, x_1) + \psi(x, 0, v_2, x_2), \\ \phi_0 &= \phi(x, 0, v_1, x_1) + \phi(x, 0, v_2, x_2), \\ \phi_1 &= \phi_t(x, 0, v_1, x_1) + \phi_t(x, 0, v_2, x_2). \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

式(15)中: v_1, v_2 分别为第 1, 2 列孤立波的速度; x_1, x_2 分别为第 1, 2 列孤立波的切相, 它们在运动一段时间后会发生碰撞, 此时无法求得精确解, 但有一些碰撞的现象.

对称碰撞. 式(1)在初始条件(式(15))下, 取一对对称碰撞孤立子 $v_1=0.5, x_1=-15$ 和 $v_2=-0.5, x_2=15$ (速度大小相同, 方向相反, 初始相位关于原点对称), $\Omega=[-40, 40], h=0.1, \tau=0.01, T=80$. 孤立波 $|\psi|, \phi$ 的对称碰撞, 如图 7, 8 所示. 图 7, 8 中: 两孤立波在发生碰撞后分离, $|\psi|, \phi$ 的对称碰撞是有弹性的, 碰撞后 $|\psi|, \phi$ 均有余波产生. 两孤立波在对称碰撞下修正能量和修正能量误差, 如图 9, 10 所示. 由图 9, 10 可知: 格式依旧保持修正能量 \tilde{E} 守恒.

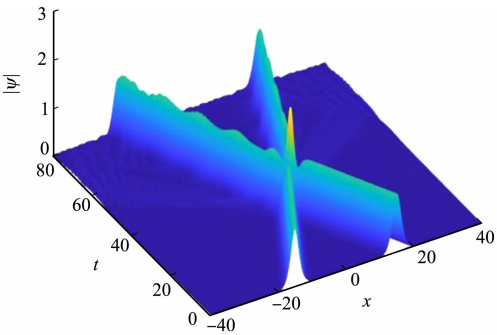


图 7 孤立波 $|\psi|$ 的对称碰撞

Fig. 7 Symmetric collision of solitary wave $|\psi|$

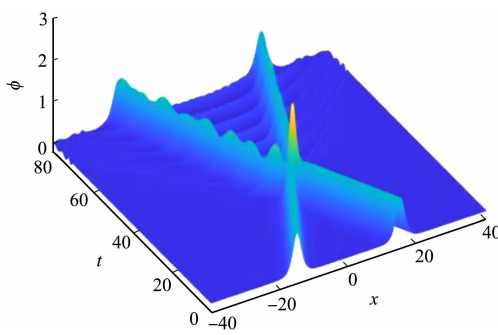


图 8 孤立波 ϕ 的对称碰撞

Fig. 8 Symmetric collision of solitary wave ϕ

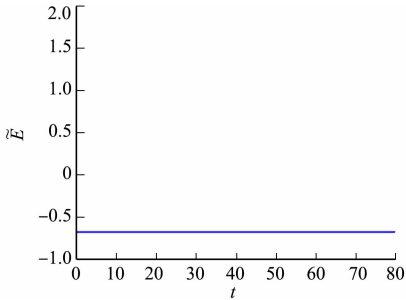


图 9 对称碰撞下的修正能量

Fig. 9 Modified energy under symmetric collision

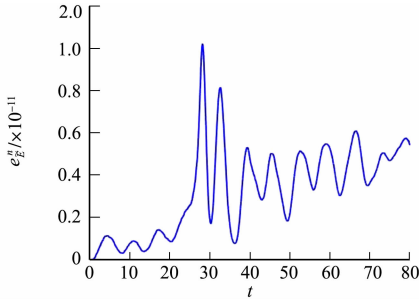


图 10 对称碰撞下的修正能量误差

Fig. 10 Modified energy error under symmetric collision

非对称碰撞. 式(1)在初始条件下, 取一对非对称碰撞孤立子 $v_1=0.2, x_1=-5$ 和 $v_2=-0.7, x_2=13, \Omega=[-40, 40], h=0.1, \tau=0.01, T=50$. 孤立波 $|\psi|, \phi$ 的非对称碰撞, 如图 11, 12 所示. 由图 11, 12 可知: 两孤立波在发生碰撞后分离, $|\psi|, \phi$ 的非对称碰撞也是有弹性的, 碰撞后 $|\psi|, \phi$ 均有余波产生. 两孤立波在非对称碰撞下修正能量和修正能量误差, 如图 13, 14 所示. 由图 13, 14 可知: 格式依旧保持修正能量 \tilde{E} 守恒.

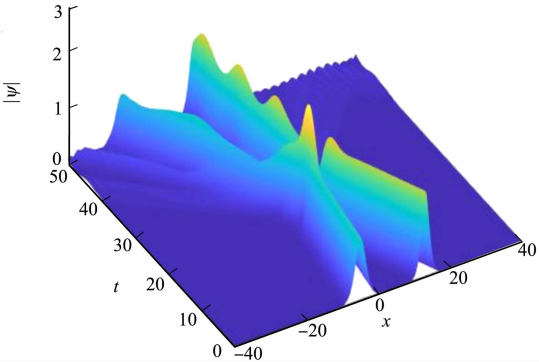


图 11 孤立波 $|\psi|$ 的非对称碰撞

Fig. 11 Asymmetric collision of solitary wave $|\psi|$

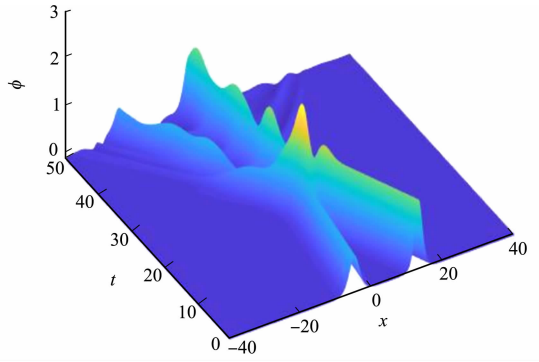


图 12 孤立波 ϕ 的非对称碰撞

Fig. 12 Asymmetric collision of solitary wave ϕ

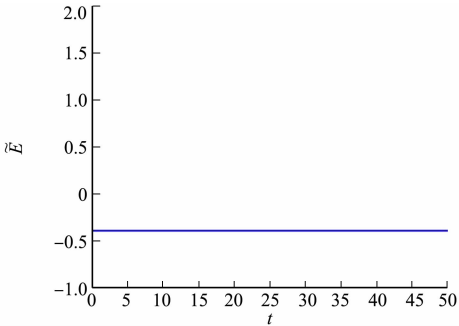


图 13 非对称碰撞下的修正能量

Fig. 13 Modified energy under asymmetric collision

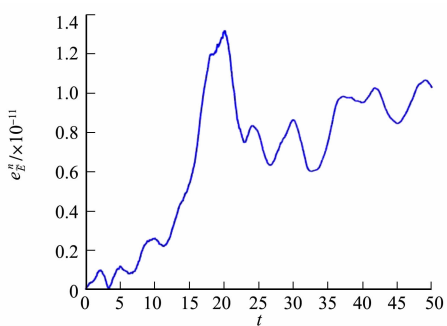


图 14 非对称碰撞下的修正能量误差

Fig. 14 Modified energy error under asymmetric collision

4 结 束 语

利用 ESAV 方法构造耦合非线性 KGS 方程的能量稳定数值求解格式,理论上证明了全离散格式的修正能量守恒定律,并通过数值实验验证格式的有效性 & 修正能量的守恒性.

参考文献:

[1] FUKUDA I, TSUTSUMI M. On coupled Klein-Gordon-Schrödinger equations, II [J]. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 1978, 66(2): 358-378. DOI: 10. 1016/0022-247X(78)90239-1.

[2] 夏静娜, 韩淑霞, 王明亮. Klein-Gordon-Schrödinger 方程组的精确孤立波解 [J]. 应用数学和力学, 2002, 23(1): 52-58. DOI: 10. 3321/j. issn: 1000-0887. 2002. 01. 007.

[3] XIANG Xinmin. Spectral method for solving the system of equations of Schrödinger-Klein-Gordon field [J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 1988, 21: 161-171. DOI: 10. 1016/0377-0427(88)90265-8.

[4] ZHANG Luming. Convergence of a conservative difference scheme for a class of Klein-Gordon-Schrödinger equations in one space dimension [J]. Applied Mathematics and Computation, 2005, 163(1): 343-355. DOI: 10. 1016/j. amc. 2004. 02. 010.

[5] CHEN Juan, CHEN Fangqi. Convergence of a high-order compact finite difference scheme for the Klein-Gordon-Schrödinger equations [J]. Applied Numerical Mathematics, 2019, 143: 133-145. DOI: 10. 1016/j. apnum. 2019. 03. 004.

[6] HONG Jialin, JIANG Shanshan, KONG Linghua, *et al.* Numerical comparison of five difference schemes for coupled Klein-Gordon-Schrödinger equations in quantum physics [J]. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 2007, 40: 9125-9135.

[7] ZHANG Jingjing, KONG Linghua. New energy-preserving schemes for Klein-Gordon-Schrödinger equations [J]. Applied Mathematical Modelling, 2016, 40(15/16): 6969-6982. DOI: 10. 1016/j. apm. 2016. 02. 026.

[8] SHEN Jie, XU Jie, YANG Jiang. The scalar auxiliary variable (SAV) approach for gradient flows [J]. Journal of Computational Physics, 2018, 353: 407-416. DOI: 10. 1016/j. jcp. 2017. 10. 021.

[9] WANG Rui, JI Yanzhou, SHEN Jie, *et al.* Application of scalar auxiliary variable scheme to phase-field equations [J]. Computational Materials Science, 2022, 212: 111556. DOI: 10. 1016/j. commatsci. 2022. 111556.

[10] CHENG Qing, LIU Chun, SHEN Jie. A new Lagrange multiplier approach for gradient flows [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2020, 367: 113070. DOI: 10. 1016/j. cma. 2020. 113070.

[11] CHENG Qing, SHEN Jie. Global constraints preserving scalar auxiliary variable schemes for gradient flows [J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2020, 42(4): A2489-A2513. DOI: 10. 1137/19M1306221.

[12] ZHANG Yanrong, SHEN Jie. Efficient structure preserving schemes for the Klein-Gordon-Schrödinger equations [J]. Journal of Scientific Computing, 2021, 47: 89-47. DOI: 10. 1007/s10915-021-01649-y.

[13] LIN Lianlei, YANG Zhiguo, DONG Suchuan. Numerical approximation of incompressible navier-stokes equations based on an auxiliary energy variable [J]. Journal of Computational Physics, 2019, 388: 1-22. DOI: 10. 1016/j. jcp. 2019. 03. 012.

[14] LIU Zhengguang, LI Xiaoli. The exponential scalar auxiliary variable (E-SAV) approach for phase field models and its explicit computing [J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2020, 42(3): B630-B655. DOI: 10. 1137/19M1305914.

[15] 任全伟, 庄清渠. 一类四阶微积分方程的紧差分格式 [J]. 华侨大学学报 (自然科学版), 2014, 35(2): 232-237. DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 2014. 02. 0232.

[16] 王廷春, 郭柏灵. 一维非线性 Schrödinger 方程的两个无条件收敛的守恒紧致差分格式 [J]. 中国科学: 数学, 2011, 41(3): 207-233. DOI: 10. 1360/0120-846.

(责任编辑: 钱筠 英文审校: 黄心中)