

多辛 Dirac 方程的高阶整体保能量格式^{*1)}

裘春晓 孙建强 孔嘉萌
(海南大学信息科学技术学院, 海口 570228)

摘要

基于四阶平均向量场方法和拟谱方法构造了 Dirac 方程的高阶整体保能量格式, 利用构造的高阶整体保能量格式数值模拟方程孤立波的演化行为。数值模拟结果表明构造的高阶整体保能量格式可以很好地模拟 Dirac 方程孤立波的演化行为, 并且可以精确地保持方程的整体能量守恒特性。

关键词: 高阶整体保能量格式; 平均向量场方法; Dirac 方程

MR (2010) 主题分类: 65P10

1. 引言

许多非线性偏微分方程如非线性薛定谔方程, sine-Gordon 方程等, 可写成如下多辛 Hamilton 偏微分方程^[1,2]

$$\mathbf{M}_1 \mathbf{z}_1 t + \mathbf{K}_1 \mathbf{z}_1 x = \nabla_{\mathbf{z}_1} S_1(\mathbf{z}_1), \quad \mathbf{z}_1 \in \mathbf{R}^n, \quad (1)$$

其中 \mathbf{M}_1 和 \mathbf{K}_1 为斜对称矩阵, $S_1 : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ 是一个标量光滑函数。

方程 (1) 具有多辛守恒, 局部能量和动量守恒特性。Bridges 等人^[3,4] 提出一些能够保持多辛守恒的多辛算法, 如多辛 Runge-Kutta 方法, 多辛 Preissman 格式, 多辛 Euler box 格式, 多辛谱方法等, 这些多辛算法具有长时间精确数值模拟的能力, 在数值求解非线性偏微分方程中有重要的作用^[5-9]。在周期边界条件下, 方程 (1) 具有整体能量守恒特性。设计精确地保持微分方程 (1) 整体能量守恒数值格式在数值模拟微分方程中具有重要的意义。

近年来, 保能量方法已成为微分方程保结构算法的研究热点。Quispel 和 McLachlan^[10,11] 等人提出了保哈密尔顿系统能量守恒的平均向量场方法, Matuo 等人^[12,13] 提出离散变分求导方法, Brugnano 等人^[14,15] 提出 HBVM 方法, 并应用于具有哈密尔顿系统能量守恒的偏微分方程的计算。平均向量场方法是一类 B 级数方法, 可以利用根级数理论分析格式的精度。最近, 王雨顺等人^[16] 在哈密尔顿系统的二阶平均向量场的方法的基础上提出了多辛偏微分方程的二阶多辛整体保能量格式^[17-19]。这种方法能精确地保持方程的整体能量。然而, 多辛 Hamilton 偏微分方程的高阶整体保能量格式国内外尚少有人研究。Quispel 和 McLachlan 提出了哈密尔顿系统的高阶保能量格式^[11]。我们已在哈密尔顿系统的高阶平均向量场方法方面进行了深入的研究, 给出了哈密尔顿系统的四阶平均向量场格式的矩阵向量形式, 并应用于 GB 方程和 sine-Gordon 方程的计算^[20,21], 取得了很好的数值效果。在这里, 我们利用四阶平均向量场方法提出格式 (1) 中与时间变量偏导数有关的矩阵 \mathbf{M}_1 可逆时的多辛偏微分方程的高阶整体保能量格式并应用于 Dirac 方程的计算。

* 2018 年 10 月 15 日收到。

1) 基金项目: 国家自然科学基金(11961020, 11561018)资助。

本文结构如下: 第 2 部分, 给出多辛偏微分方程高阶整体保能量格式, 并证明格式在时间方向上具有四阶精度和保持方程的整体保能量守恒特性. 第 3 部分, 对 Dirac 方程进行数值模拟, 分析孤立波的数值行为, 并验证格式的高阶整体保能量守恒特性, 最后得出相应的结论.

2. 多辛偏微分方程的高阶整体保能量格式

对于给定的多辛 Hamilton 偏微分方程 (1), 设有周期边界条件, 在空间方向上对 (1) 进行拟谱离散后可得到如下形式:

$$\mathbf{M}\mathbf{z}_t + \mathbf{K}\mathbf{D}\mathbf{z} = \nabla_{\mathbf{z}}S(\mathbf{z}), \quad (2)$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_1 & O & \cdots & O \\ O & \mathbf{D}_1 & \cdots & O \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ O & O & \cdots & \mathbf{D}_1 \end{bmatrix}, \quad (\mathbf{D}_1)_{k,l} = \begin{cases} \frac{1}{2}\mu(-1)^{k+l}\cot(\mu\frac{x_k - x_l}{2}), & k \neq l, \\ 0, & k = l. \end{cases} \quad (3)$$

为一阶谱矩阵. $k, l = 1, \dots, N$, \mathbf{M} 为可逆矩阵, $x_k = a + hk, x \in \Omega, \Omega = [a, b]$ 为空间区域, $h = \frac{b-a}{N}$ 为空间步长^[22,23].

王雨顺等人应用二阶平均向量场方法到多辛 Hamilton 偏微分方程 (2) 并得到以下格式

$$\mathbf{M}\frac{\mathbf{z}^{n+1} - \mathbf{z}^n}{\tau} + \mathbf{K}\mathbf{D}\frac{\mathbf{z}^{n+1} + \mathbf{z}^n}{2} = \int_0^1 \nabla_{\mathbf{z}}S((1-\xi)\mathbf{z}^n + \xi\mathbf{z}^{n+1})d\xi. \quad (4)$$

格式 (4) 具有整体保能量守恒性质和二阶精度^[18].

我们应用四阶平均向量场方法到 (2) 得如下格式:

$$\frac{\mathbf{z}^{n+1} - \mathbf{z}^n}{\tau} + \left(\mathbf{I} - \frac{\tau^2}{12}\mathbf{J}^2\right)\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{D}\frac{\mathbf{z}^{n+1} + \mathbf{z}^n}{2} = \left(\mathbf{I} - \frac{\tau^2}{12}\mathbf{J}^2\right)\mathbf{M}^{-1}\int_0^1 \nabla_{\mathbf{z}}S((1-\xi)\mathbf{z}^n + \xi\mathbf{z}^{n+1})d\xi, \quad (5)$$

其中 $\mathbf{J} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{T}, \mathbf{T} = \nabla_{\mathbf{z}\mathbf{z}}S(\mathbf{z}) - \mathbf{K}\mathbf{D}$.

定理 1. 新格式 (5) 具有四阶精度.

证明. 格式 (2) 可以写成以下形式:

$$\mathbf{z}_t = \mathbf{M}^{-1}\nabla_{\mathbf{z}}\left(S(\mathbf{z}) - \frac{1}{2}\mathbf{z}^T\mathbf{K}\mathbf{D}\mathbf{z}\right), \quad (6)$$

其中 \mathbf{M}^{-1} 是反矩阵. 然后用四阶平均向量场方法应用到格式 (6). 我们可以得到

$$\frac{\mathbf{z}^{n+1} - \mathbf{z}^n}{\tau} = \left(\mathbf{I} - \frac{\tau^2}{12}\mathbf{J}^2\right)\mathbf{M}^{-1}\int_0^1 \nabla_{\mathbf{z}}(S((1-\xi)\mathbf{z}^n + \xi\mathbf{z}^{n+1}) - \frac{1}{2}\hat{\mathbf{z}}^T\mathbf{K}\mathbf{D}\hat{\mathbf{z}})d\xi, \quad (7)$$

其中 $\hat{\mathbf{z}} = (1-\xi)\mathbf{z}^n + \xi\mathbf{z}^{n+1}$. 显然格式 (7) 具有四阶精度. 通过计算, (7) 等价 (5). 因此, (5) 有四阶精度.

定理 2. 新格式 (5) 满足能量守恒

$$E(\mathbf{z}^{n+1}) = E(\mathbf{z}^n), \quad (8)$$