二维非线性 Schrödinger 方程的两类局部守恒算法

钱旭^{1,2}, 宋松和^{1*}

1. 国防科技大学理学院, 长沙 410072;

2. 国防科技大学海洋科学与工程研究院, 长沙 410073

E-mail: qianxu@nudt.edu.cn, shsong@nudt.edu.cn

收稿日期: 2016-05-11; 接受日期: 2017-06-23; 网络出版日期: 2017-07-18; * 通信作者

国家自然科学基金 (批准号: 11501570 和 11571366)、国防科技大学科研计划 (批准号: JC15-02-02) 和中国博士后科学基金 (批准号: 2017M613362) 资助项目

摘要 本文针对二维非线性 Schrödinger 方程, 提出两类局部守恒算法. 不需要考虑边界条件, 即可保持任意时空区域上相应的局部能量守恒律和局部动量守恒律. 在合适的边界条件下, 它们能自然地保持电荷、全局能量或全局动量守恒律. 本文同时对算法进行了守恒分析和误差分析. 在数值实验部分, 本文构造了类似的多辛 Preissman 算法进行比较, 数值结果验证了其长时间计算的优势.

关键词 Schrödinger 方程 局部守恒特征 能量守恒律 动量守恒律 保结构算法

MSC (2010) 主题分类 65M06, 65M12, 65Z05

1 引言

本文考虑二维非线性 Schrödinger (2D-NLS) 方程

$$i\psi_t + \psi_{xx} + \psi_{yy} + \beta|\psi|^2\psi = 0, \quad i = \sqrt{-1}, \quad (1.1)$$

其中, $x, y \in \mathbb{R}$, β 为常数, $\psi(x, y, t)$ 为复值波函数. 该方程描述了具有守恒性、弱非线性和强色散系统演化的过程, 以及三维水波在深水区的传播. 同时也在等离子物理中 Langmuir 波的 Zakharov 模型中被导出^[1]. 其在有限时间内, 极有可能产生奇异解^[2]. 由于对于 Schrödinger 方程, 特别是高维情形, 理论研究还非常有限, 数值研究该模型就成了一条重要的途径. Crank-Nicolson 有限差分格式^[3], 基于自适应多重网格方法的守恒差分格式^[4], 局部间断 Galerkin 方法^[5], 以及辛与多辛方法^[6,7] 已被用以求解该方程. 但相对于一维情形, 针对二维情形的数值方法还十分有限.

同样地, 对于 2D-NLS 方程 (1.1), 也存在若干守恒律和不变量. 如何保持这些守恒性质是构造数值算法必须考虑的问题. 辛与多辛等一系列保结构算法^[8-14], 能够有效保持系统内部结构, 已用于部分

英文引用格式: Qian X, Song S H. Numerical analysis of two local conservative methods for two-dimensional nonlinear Schrödinger equation (in Chinese). Sci Sin Math, 2018, 48: 345–360, doi: 10.1360/SCM-2016-0308

二维 Hamilton 偏微分方程的数值计算^[15,16]. 相较于保辛算法, 保能量和保动量算法有其自身的优势. 保辛算法对时间步长的选择较保能量或保动量算法敏感. 有一些实际算例 (参见文献 [17,18]), 保辛算法在较大的时间步长下易引起数值不稳定. 在混沌的动力系统, 仅需要保持能量、动量或者体积这些守恒量, 辛性的概念跟系统关系不大, 也没法运用到其他统计力学的例子. 总的来说, 构造数值算法时, 选择保辛算法或者其他守恒算法必须根据方程本身和实际问题的背景. 另外, 大部分保结构算法的构造是依赖边界条件的, 如周期边界条件. 也就是说, 若边界条件不满足, 相应的离散守恒律没有办法被完全保持. 到目前为止, 我们还没有发现一种通用的保结构算法可以完全不依赖于边界条件. Bridges 和 Reich^[8] 针对 Hamilton 偏微分方程引入的多辛算法, 克服了辛算法定义在整个时间层上的局限, 转而关注局部时空区域上的守恒特征. 因此, 多辛算法可以被看作一种局部守恒算法. Wang 等^[19] 和 Cai 等^[20] 构造了几种局部保结构算法用于求解一些一维的偏微分方程, 这些算法不需要考虑边界条件, 同时能够保持局部时空区域的守恒律. 这些有益的尝试都拓展了保结构算法的理论和应用.

多辛算法能够保持多辛几何结构和相应的守恒律, 对于求解 2D-NLS 方程是非常有效的^[6,7]. 但是, Bridges 和 Reich^[8] 已证明当且仅当 Hamilton 函数 $S(z)$ 为状态变量 z 的二次函数, 则多辛算法能够精确保持能量守恒律. 因此, 2D-NLS 方程的多辛算法能够保持其离散多辛几何结构, 但是它无法精确保持能量和动量守恒律. 另外, 多辛算法虽已大量应用于实际问题, 且有一些具体的策略将 Hamilton 方程化为多辛形式, 但在实际层面, 对于任一给定的偏微分方程, 我们仍无法保证能将其写成多辛形式^[21].

基于以上的考虑, 本文的工作主要着眼于 2D-NLS 方程的局部特征, 直接构造相应的局部守恒算法. 具体地, 本文构造了一种局部能量守恒算法和一种局部动量守恒算法, 同时证明了这两种算法可以完全精确保持局部能量或动量. 在适当的边界条件下, 它们能自然地保持全局能量或动量. 另外, 为了增加算法在长时间计算中的可靠性, 本文对算法进行了误差分析. 在数值实验部分, 本文构造了多辛 Preissman 格式作为比较, 并利用若干数值算例验证了理论分析.

首先, 引入方程 (1.1) 局部守恒律的概念. 令 $\psi(x, y, t) = p(x, y, t) + iq(x, y, t)$, 可以得到方程 (1.1) 的等价形式

$$\begin{aligned} -p_t &= q_{xx} + q_{yy} + \beta(p^2 + q^2)q, \\ q_t &= p_{xx} + p_{yy} + \beta(p^2 + q^2)p, \end{aligned} \quad (1.2)$$

其中, $p(x, y, t)$ 和 $q(x, y, t)$ 为实变量.

引入辅助变量 $u = p_x$, $g = q_x$, $v = p_y$, $w = q_y$, 可以得到 2D-NLS 方程 (1.1) 的一阶系统

$$\begin{aligned} -p_t &= g_x + w_y + \beta(p^2 + q^2)q, \\ q_t &= u_x + v_y + \beta(p^2 + q^2)p, \\ p_x &= u, \quad q_x = g, \quad p_y = v, \quad q_y = w. \end{aligned} \quad (1.3)$$

再引入新的变量 $a = u_x$, $b = g_x$, $c = v_y$, $d = w_y$, 系统 (1.3) 能重新写成一个常微分方程组

$$\begin{aligned} -p_t &= b + d + \beta(p^2 + q^2)q, \\ q_t &= a + c + \beta(p^2 + q^2)p, \\ u_x &= a, \quad p_x = u, \quad g_x = b, \quad q_x = g, \\ v_y &= c, \quad p_y = v, \quad w_y = d, \quad q_y = w. \end{aligned} \quad (1.4)$$

引理 1 2D-NLS 系统 (1.4) 满足局部能量守恒律 (LECL)

$$\partial_t E + \partial_x F_1 + \partial_y F_2 = 0, \quad (1.5)$$

其中, 能量密度 $E = \frac{\beta}{4}(p^2 + q^2)^2 - \frac{1}{2}(u^2 + g^2 + v^2 + w^2)$, 能量通量 $F_1 = up_t + gq_t$, $F_2 = vp_t + wq_t$.

证明 在系统 (1.4) 中, 用 q_t 乘以 $-p_t = g_x + w_y + \beta(p^2 + q^2)q$, 同时用 p_t 乘以 $q_t = u_x + v_y + \beta(p^2 + q^2)p$, 然后把两部分求和, 可得

$$\begin{aligned} 0 &= bq_t + ap_t + dq_t + cp_t + \beta|\psi|^2(qq_t + pp_t) \\ &= \partial_x(gq_t + up_t) - gq_{xt} - up_{xt} + \partial_y(wq_t + vp_t) - wq_{yt} - vp_{yt} + \frac{\beta}{2}|\psi|^2\partial_t|\psi|^2 \\ &= \partial_x(gq_t + up_t) + \partial_y(wq_t + vp_t) - \frac{1}{2}\partial_t(g^2 + u^2) - \frac{1}{2}\partial_t(w^2 + v^2) + \frac{\beta}{2}|\psi|^2\partial_t|\psi|^2 \\ &= \partial_x(gq_t + up_t) + \partial_y(wq_t + vp_t) + \partial_t\left[\frac{\beta}{4}|\psi|^4 - \frac{1}{2}(g^2 + u^2 + w^2 + v^2)\right]. \end{aligned}$$

则 (1.5) 得证. □

下面的结果有相似的证明.

引理 2 2D-NLS 系统 (1.4) 满足局部动量守恒律 (LMCL)

$$\partial_t I + \partial_x G_1 + \partial_y G_2 = 0, \quad (1.6)$$

其中, 动量密度 $I = \frac{1}{2}(pg - qu)$, 动量通量

$$G_1 = \frac{\beta}{4}(p^2 + q^2)^2 + \frac{1}{2}(u^2 + g^2) + \frac{1}{2}(qp_t - pq_t) - \frac{1}{2}(p_y^2 + q_y^2), \quad G_2 = gw + uv.$$

在周期边界条件下, 以上的局部守恒律 (1.5) 和 (1.6) 在 x 和 y 方向积分, 可以分别得到全局能量守恒律 (GECL)

$$\mathcal{E}(t) = \int_{\Omega} E(x, y, t) dx dy = C_1 \quad (1.7)$$

和全局动量守恒律 (GMCL)

$$\mathcal{M}(t) = \int_{\Omega} I(x, y, t) dx dy = C_2, \quad (1.8)$$

同时, 方程 (1.1) 具有电荷守恒律

$$\mathcal{Q}(t) = \int_{\Omega} |\psi(x, y, t)|^2 dx dy = C_3, \quad (1.9)$$

其中, Ω 为空间区域, C_1 、 C_2 和 C_3 为独立于 t 的常数.

本文接下来的内容安排如下: 第 2 节给出需要的记号; 第 3 节给出局部能量守恒算法, 证明其理论性质; 第 4 节给出局部动量守恒算法及其守恒量; 第 5 节构造一种相类似的多辛 Preissman 算法, 并提供几个数值算例来验证我们的结果; 最后第 6 节总结本文所做的工作.

2 记号及其性质

对时空区域 $\Omega \times [0, T]$ 进行如下划分:

$$x_k = x_L + k\Delta x, \quad y_l = y_L + l\Delta y, \quad t^n = n\tau,$$

其中, $N_x, N_y, N \in \mathbb{N}$ 分别为 x 、 y 和 t 方向的网格数, 空间区域 Ω 为 $[x_L, x_R] \times [y_L, y_R]$, $\Delta x = (x_R - x_L)/N_x$ 、 $\Delta y = (y_R - y_L)/N_y$ 和 $\tau = T/N$ 分别为 x 、 y 和 t 方向的步长. 在 (x_k, y_l, t^n) 处 $\psi(x, y, t)$ 的近似值记为 $\psi_{k,l}^n$. 范数

$$\|u^n\|_p^p = \Delta x \Delta y \sum_{k,l} |u_{k,l}^n|^p, \quad \|u^n\|_\infty = \sup_{k,l} |u_{k,l}^n|.$$

习惯上, 也记 $\|u^n\|_2 = \|u^n\|$. 对于有限差分算子

$$D_t u_{k,l}^n = \frac{u_{k,l}^{n+1} - u_{k,l}^n}{\tau}, \quad D_x u_{k,l}^n = \frac{u_{k+1,l}^n - u_{k,l}^n}{\Delta x}, \quad D_y u_{k,l}^n = \frac{u_{k,l+1}^n - u_{k,l}^n}{\Delta y}$$

和平均算子

$$A_t u_{k,l}^n = \frac{u_{k,l}^{n+1} + u_{k,l}^n}{2}, \quad A_x u_{k,l}^n = \frac{u_{k+1,l}^n + u_{k,l}^n}{2}, \quad A_y u_{k,l}^n = \frac{u_{k,l+1}^n + u_{k,l}^n}{2},$$

有以下性质:

(1) 交换律

$$D_x D_t = D_t D_x, \quad A_x A_t = A_t A_x, \quad D_x A_t = A_t D_x, \quad A_x D_t = D_t A_x;$$

(2) 离散 Leibniz 法则

$$D_x(u \cdot v)_k = (au_{k+1} + (1-a)u_k) \cdot D_x v_k + D_x u_k \cdot ((1-a)v_{k+1} + av_k), \quad \forall 0 \leq a \leq 1.$$

性质 (1) 对任意下标 x 、 y 和 t 的组合同样有效, 性质 (2) 在 y 和 t 方向也有效.

3 局部能量守恒算法

本节主要构造局部能量守恒 (LEC) 算法, 同时分析其守恒性质和收敛性质.

3.1 LEC 算法的构造

在空间方向利用中点格式、在时间方向利用 Crank-Nicolson 格式对方程 (1.4) 进行离散, 可得到如下格式:

$$\begin{aligned} -D_t A_x A_y p_{k,l}^n &= A_t A_x A_y b_{k,l}^n + A_t A_x A_y d_{k,l}^n + \beta A_t (|A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2) \cdot A_t A_x A_y q_{k,l}^n, \\ D_t A_x A_y q_{k,l}^n &= A_t A_x A_y a_{k,l}^n + A_t A_x A_y c_{k,l}^n + \beta A_t (|A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2) \cdot A_t A_x A_y p_{k,l}^n, \\ A_y D_x u_{k,l}^n &= A_x A_y a_{k,l}^n, \quad A_y D_x p_{k,l}^n = A_x A_y u_{k,l}^n, \quad A_y D_x g_{k,l}^n = A_x A_y b_{k,l}^n, \quad A_y D_x q_{k,l}^n = A_x A_y g_{k,l}^n, \\ A_x D_y v_{k,l}^n &= A_x A_y c_{k,l}^n, \quad A_x D_y p_{k,l}^n = A_x A_y v_{k,l}^n, \quad A_x D_y w_{k,l}^n = A_x A_y d_{k,l}^n, \quad A_x D_y q_{k,l}^n = A_x A_y w_{k,l}^n, \end{aligned} \quad (3.1)$$

其中,

$$|A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2 = (A_x A_y p_{k,l}^n)^2 + (A_x A_y q_{k,l}^n)^2.$$

然后, 消去辅助变量 u 、 g 、 v 、 w 、 a 、 b 、 c 和 d , 我们得到

$$\begin{aligned} -D_t A_x^2 A_y^2 p_{k,l}^n &= A_t A_y^2 D_x^2 q_{k,l}^n + A_t A_x^2 D_y^2 q_{k,l}^n + A_x A_y (\beta A_t |A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2 \cdot A_t A_x A_y q_{k,l}^n), \\ D_t A_x^2 A_y^2 q_{k,l}^n &= A_t A_y^2 D_x^2 p_{k,l}^n + A_t A_x^2 D_y^2 p_{k,l}^n + A_x A_y (\beta A_t |A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2 \cdot A_t A_x A_y p_{k,l}^n), \end{aligned} \quad (3.2)$$

或者

$$i D_t A_x^2 A_y^2 \psi_{k,l}^n + A_t A_y^2 D_x^2 \psi_{k,l}^n + A_t A_x^2 D_y^2 \psi_{k,l}^n + A_x A_y (\beta A_t |A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2 \cdot A_t A_x A_y \psi_{k,l}^n) = 0. \quad (3.3)$$

3.2 LEC 算法的守恒性质

本小节探讨 LEC 算法的离散守恒性质.

定理 1 格式 (3.2) 或 (3.3) 满足离散局部能量守恒律

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{k,l}^n &= D_t \left[\frac{\beta}{4} |A_x A_y \psi_{k,l}^n|^4 - \frac{1}{2} (|D_x A_y \psi_{k,l}^n|^2 + |D_y A_x \psi_{k,l}^n|^2) \right] \\ &\quad + D_x (A_t A_y u_{k,l}^n \cdot D_t A_y p_{k,l}^n + A_t A_y g_{k,l}^n \cdot D_t A_y q_{k,l}^n) \\ &\quad + D_y (A_t A_x v_{k,l}^n \cdot D_t A_x p_{k,l}^n + A_t A_x w_{k,l}^n \cdot D_t A_x q_{k,l}^n) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.4)$$

证明 在格式 (3.1) 中, 用 $D_t A_x A_y q_{k,l}^n$ 乘以

$$-D_t A_x A_y p_{k,l}^n = A_t A_x A_y b_{k,l}^n + A_t A_x A_y d_{k,l}^n + \beta A_t (|A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2) \cdot A_t A_x A_y q_{k,l}^n,$$

同时用 $D_t A_x A_y p_{k,l}^n$ 乘以

$$D_t A_x A_y q_{k,l}^n = A_t A_x A_y a_{k,l}^n + A_t A_x A_y c_{k,l}^n + \beta A_t (|A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2) \cdot A_t A_x A_y p_{k,l}^n,$$

然后求和可得到

$$\begin{aligned} &A_t A_x A_y b_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y q_{k,l}^n + A_t A_x A_y d_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y q_{k,l}^n \\ &\quad + A_t A_x A_y a_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y p_{k,l}^n + A_t A_x A_y c_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y p_{k,l}^n \\ &\quad + \beta A_t (|A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2) \cdot (A_t A_x A_y q_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y q_{k,l}^n + A_t A_x A_y p_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y p_{k,l}^n) = 0. \end{aligned} \quad (3.5)$$

利用离散 Leibniz 法则, 可得

$$\begin{aligned} &A_t A_x A_y b_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y q_{k,l}^n + A_t A_x A_y a_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y p_{k,l}^n \\ &= A_t A_y D_x g_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y q_{k,l}^n + A_t A_y D_x u_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y p_{k,l}^n \\ &= D_x (A_t A_y g_{k,l}^n \cdot D_t A_y q_{k,l}^n + A_t A_y u_{k,l}^n \cdot D_t A_y p_{k,l}^n) \\ &\quad - A_t A_y D_x q_{k,l}^n \cdot D_x D_t A_y q_{k,l}^n - A_t A_y D_x p_{k,l}^n \cdot D_x D_t A_y p_{k,l}^n \\ &= D_x (A_t A_y g_{k,l}^n \cdot D_t A_y q_{k,l}^n + A_t A_y u_{k,l}^n \cdot D_t A_y p_{k,l}^n) - \frac{1}{2} D_t |D_x A_y \psi_{k,l}^n|^2. \end{aligned} \quad (3.6)$$

相似地,

$$\begin{aligned} & A_t A_x A_y d_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y q_{k,l}^n + A_t A_x A_y c_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y p_{k,l}^n \\ &= D_y (A_t A_x w_{k,l}^n \cdot D_t A_x q_{k,l}^n + A_t A_x v_{k,l}^n \cdot D_t A_x p_{k,l}^n) - \frac{1}{2} D_t |D_y A_x \psi_{k,l}^n|^2, \end{aligned} \quad (3.7)$$

以及

$$\begin{aligned} & \beta A_t (|A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2) \cdot (A_t A_x A_y q_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y q_{k,l}^n + A_t A_x A_y p_{k,l}^n \cdot D_t A_x A_y p_{k,l}^n) \\ &= \beta A_t (|A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2) \cdot \frac{1}{2} D_t [(A_x A_y q_{k,l}^n)^2 + (A_x A_y p_{k,l}^n)^2] \\ &= \frac{\beta}{2} A_t (|A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2) \cdot D_t |A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2 \\ &= \frac{\beta}{4} D_t |A_x A_y \psi_{k,l}^n|^4. \end{aligned} \quad (3.8)$$

结合 (3.6)–(3.8), 可以得到离散 LECL (3.4). $\square$

在整个空间, 对离散 LECL (3.4) 进行求和, 可以得到如下的离散全局能量守恒律.

定理 2 在周期边界条件下, 格式 (3.1) 满足离散全局能量守恒律

$$\begin{aligned} & \Delta x \Delta y \sum_{k,l} \left[\frac{\beta}{4} |A_x A_y \psi_{k,l}^{n+1}|^4 - \frac{1}{2} (|D_x A_y \psi_{k,l}^{n+1}|^2 + |D_y A_x \psi_{k,l}^{n+1}|^2) \right] \\ &= \Delta x \Delta y \sum_{k,l} \left[\frac{\beta}{4} |A_x A_y \psi_{k,l}^n|^4 - \frac{1}{2} (|D_x A_y \psi_{k,l}^n|^2 + |D_y A_x \psi_{k,l}^n|^2) \right]. \end{aligned} \quad (3.9)$$

换言之,

$$\mathcal{E}^{n+1} = \mathcal{E}^n = \dots = \mathcal{E}^0. \quad (3.10)$$

定理 3 在周期边界条件下, 格式 (3.3) 保持电荷守恒

$$\mathcal{Q}^{n+1} = \|A_x A_y \Psi^{n+1}\|^2 = \Delta x \Delta y \sum_{k,l} |A_x A_y \psi_{k,l}^{n+1}|^2 = \dots = \mathcal{Q}^0. \quad (3.11)$$

证明 格式 (3.3) 等价于

$$\begin{aligned} & i D_t A_x^2 A_y^2 \psi_{k-1,l-1}^n + A_t A_y^2 D_x^2 \psi_{k-1,l-1}^n + A_t A_x^2 D_y^2 \psi_{k-1,l-1}^n \\ &+ A_x A_y (\beta A_t |A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n|^2 \cdot A_t A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n) = 0. \end{aligned} \quad (3.12)$$

用 $\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} + \overline{\psi_{k,l}^n}$ 乘以格式 (3.12) 对空间指标 k 和 l 进行求和, 可得到

$$\begin{aligned} & i \sum_{k,l} D_t A_x^2 A_y^2 \psi_{k-1,l-1}^n \cdot (\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} + \overline{\psi_{k,l}^n}) + \sum_{k,l} A_t A_y^2 D_x^2 \psi_{k-1,l-1}^n \cdot (\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} + \overline{\psi_{k,l}^n}) \\ &+ \sum_{k,l} A_t A_x^2 D_y^2 \psi_{k-1,l-1}^n \cdot (\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} + \overline{\psi_{k,l}^n}) + \sum_{k,l} A_x A_y (\beta A_t |A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n|^2 \\ &\times A_t A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n) \cdot (\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} + \overline{\psi_{k,l}^n}) = 0. \end{aligned} \quad (3.13)$$

展开后, (3.13) 的第一项为

$$\frac{i}{16\tau} \sum_{k,l} [\psi_{k+1,l+1}^{n+1} + 2\psi_{k,l+1}^{n+1} + \psi_{k-1,l+1}^{n+1} + 2\psi_{k+1,l}^{n+1} + 4\psi_{k,l}^{n+1} + 2\psi_{k-1,l}^{n+1} + \psi_{k+1,l-1}^{n+1} + 2\psi_{k,l-1}^{n+1} + \psi_{k-1,l-1}^{n+1} + 2\psi_{k,l-1}^{n+1} + \psi_{k-1,l-1}^{n+1}]$$

$$\begin{aligned}
& + 2\psi_{k,l-1}^{n+1} + \psi_{k-1,l-1}^{n+1})\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} - (\psi_{k+1,l+1}^n + 2\psi_{k,l+1}^n + \psi_{k-1,l+1}^n + 2\psi_{k+1,l}^n + 4\psi_{k,l}^n \\
& + 2\psi_{k-1,l}^n + \psi_{k+1,l-1}^n + 2\psi_{k,l-1}^n + \psi_{k-1,l-1}^n)\overline{\psi_{k,l}^n} + (\psi_{k+1,l+1}^{n+1} + 2\psi_{k,l+1}^{n+1} + \psi_{k-1,l+1}^{n+1} \\
& + 2\psi_{k+1,l}^{n+1} + 4\psi_{k,l}^{n+1} + 2\psi_{k-1,l}^{n+1} + \psi_{k+1,l-1}^{n+1} + 2\psi_{k,l-1}^{n+1} + \psi_{k-1,l-1}^{n+1})\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} - (\psi_{k+1,l+1}^n \\
& + 2\psi_{k,l+1}^n + \psi_{k-1,l+1}^n + 2\psi_{k+1,l}^n + 4\psi_{k,l}^n + 2\psi_{k-1,l}^n + \psi_{k+1,l-1}^n + 2\psi_{k,l-1}^n + \psi_{k-1,l-1}^n)\overline{\psi_{k,l}^{n+1}}].
\end{aligned}$$

根据周期边界条件可知,

$$\begin{aligned}
& \sum_{k,l} (\psi_{k+1,l+1}^{n+1} + 2\psi_{k,l+1}^{n+1} + \psi_{k-1,l+1}^{n+1} + 2\psi_{k+1,l}^{n+1} + 4\psi_{k,l}^{n+1} + 2\psi_{k-1,l}^{n+1} + \psi_{k+1,l-1}^{n+1} + 2\psi_{k,l-1}^{n+1} + \psi_{k-1,l-1}^{n+1})\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} \\
& = 2 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k-1,l-1}^{n+1} \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) + 4 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k,l-1}^{n+1} \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) + 2 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k,l-1}^{n+1} \overline{\psi_{k-1,l}^{n+1}}) \\
& + 4 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k-1,l}^{n+1} \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) + 4 \sum_{k,l} |\psi_{k,l}^{n+1}|^2.
\end{aligned}$$

同样地,

$$\begin{aligned}
& - \sum_{k,l} (\psi_{k+1,l+1}^n + 2\psi_{k,l+1}^n + \psi_{k-1,l+1}^n + 2\psi_{k+1,l}^n + 4\psi_{k,l}^n + 2\psi_{k-1,l}^n + \psi_{k+1,l-1}^n + 2\psi_{k,l-1}^n + \psi_{k-1,l-1}^n)\overline{\psi_{k,l}^n} \\
& = -2 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k-1,l-1}^n \overline{\psi_{k,l}^n}) - 4 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k,l-1}^n \overline{\psi_{k,l}^n}) - 2 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k,l-1}^n \overline{\psi_{k-1,l}^n}) \\
& - 4 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k-1,l}^n \overline{\psi_{k,l}^n}) - 4 \sum_{k,l} |\psi_{k,l}^n|^2,
\end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned}
& \sum_{k,l} (\psi_{k+1,l+1}^{n+1} + 2\psi_{k,l+1}^{n+1} + \psi_{k-1,l+1}^{n+1} + 2\psi_{k+1,l}^{n+1} + 4\psi_{k,l}^{n+1} + 2\psi_{k-1,l}^{n+1} + \psi_{k+1,l-1}^{n+1} \\
& + 2\psi_{k,l-1}^{n+1} + \psi_{k-1,l-1}^{n+1})\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} - (\psi_{k+1,l+1}^n + 2\psi_{k,l+1}^n + \psi_{k-1,l+1}^n + 2\psi_{k+1,l}^n + 4\psi_{k,l}^n \\
& + 2\psi_{k-1,l}^n + \psi_{k+1,l-1}^n + 2\psi_{k,l-1}^n + \psi_{k-1,l-1}^n)\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} \\
& = \sum_{k,l} [-2i\Im(\psi_{k-1,l-1}^{n+1} \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) - 4i\Im(\psi_{k,l-1}^{n+1} \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) - 2i\Im(\psi_{k+1,l-1}^n \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) - 4i\Im(\psi_{k-1,l}^n \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) \\
& - 8i\Im(\psi_{k,l}^n \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) - 4i\Im(\psi_{k+1,l}^n \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) - 2i\Im(\psi_{k-1,l+1}^n \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) - 4i\Im(\psi_{k,l+1}^n \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) \\
& - 2i\Im(\psi_{k+1,l+1}^n \overline{\psi_{k,l}^{n+1}})].
\end{aligned}$$

(3.13) 的第二项

$$\begin{aligned}
& \sum_{k,l} A_t A_y^2 D_x^2 \psi_{k-1,l-1}^n \cdot (\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} + \overline{\psi_{k,l}^n}) \\
& = \frac{1}{2\Delta x^2} \sum_{k,l} [2\Re(A_t \psi_{k-1,l-1}^n \cdot A_t \overline{\psi_{k,l}^n}) + 4\Re(A_t \psi_{k-1,l}^n \cdot A_t \overline{\psi_{k,l}^n}) + 2\Re(A_t \psi_{k-1,l}^n \cdot A_t \overline{\psi_{k,l-1}^n}) \\
& - 4\Re(A_t \psi_{k,l-1}^n \cdot A_t \overline{\psi_{k,l}^n}) - 4|A_t \psi_{k,l}^n|^2]
\end{aligned}$$

是一个实数. 同样地, (3.13) 的第三项

$$\sum_{k,l} A_t A_x^2 D_y^2 \psi_{k-1,l-1}^n \cdot (\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} + \overline{\psi_{k,l}^n})$$

也是一个实数.

引入新的变量 $\eta_{k,l}^n = \beta A_t |A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2$, (3.13) 的最后一项

$$\begin{aligned} & \sum_{k,l} A_x A_y (\eta_{k-1,l-1}^n \cdot A_t A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n) \cdot (\overline{\psi_{k,l}^{n+1}} + \overline{\psi_{k,l}^n}) \\ &= \frac{1}{8} \sum_{k,l} [2\Re(\eta_{k-1,l-1}^n A_t \psi_{k-1,l-1}^n \cdot A_t \overline{\psi_{k,l}^n}) + 2\Re(\eta_{k-1,l-1}^n A_t \psi_{k,l-1}^n \cdot A_t \overline{\psi_{k,l}^n}) \\ & \quad + 2\Re(\eta_{k-1,l-1}^n A_t \psi_{k-1,l}^n \cdot A_t \overline{\psi_{k,l}^n}) + 2\Re(\eta_{k,l-1}^n A_t \psi_{k,l-1}^n \cdot A_t \overline{\psi_{k,l}^n}) \\ & \quad + 2\Re(\eta_{k,l-1}^n A_t \psi_{k+1,l-1}^n \cdot A_t \overline{\psi_{k,l}^n}) + 2\Re(\eta_{k-1,l}^n A_t \psi_{k-1,l}^n \cdot A_t \overline{\psi_{k,l}^n}) \\ & \quad + \eta_{k-1,l-1}^n |A_t \psi_{k,l}^n|^2 + \eta_{k-1,l}^n |A_t \psi_{k,l}^n|^2 + \eta_{k,l-1}^n |A_t \psi_{k,l}^n|^2 + \eta_{k,l}^n |A_t \psi_{k,l}^n|^2] \end{aligned}$$

也是一个实数. 然后, 我们取方程 (3.13) 的虚部, 可得

$$\begin{aligned} & 2 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k-1,l-1}^{n+1} \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) + 4 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k,l-1}^{n+1} \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) + 2 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k,l-1}^{n+1} \overline{\psi_{k-1,l}^{n+1}}) \\ & \quad + 4 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k-1,l}^{n+1} \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) + 4 \sum_{k,l} |\psi_{k,l}^{n+1}|^2 \\ &= 2 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k-1,l-1}^n \overline{\psi_{k,l}^n}) + 4 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k,l-1}^n \overline{\psi_{k,l}^n}) + 2 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k,l-1}^n \overline{\psi_{k-1,l}^n}) \\ & \quad + 4 \sum_{k,l} \Re(\psi_{k-1,l}^n \overline{\psi_{k,l}^n}) + 4 \sum_{k,l} |\psi_{k,l}^n|^2, \end{aligned}$$

它等价于

$$\begin{aligned} & \Delta x \Delta y \sum_{k,l} [2\Re(\psi_{k-1,l-1}^{n+1} \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) + 4\Re(\psi_{k,l-1}^{n+1} \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) + 2\Re(\psi_{k,l-1}^{n+1} \overline{\psi_{k-1,l}^{n+1}}) \\ & \quad + 4\Re(\psi_{k-1,l}^{n+1} \overline{\psi_{k,l}^{n+1}}) + |\psi_{k-1,l-1}^{n+1}|^2 + |\psi_{k-1,l}^{n+1}|^2 + |\psi_{k,l-1}^{n+1}|^2 + |\psi_{k,l}^{n+1}|^2] \\ &= \Delta x \Delta y \sum_{k,l} [2\Re(\psi_{k-1,l-1}^n \overline{\psi_{k,l}^n}) + 4\Re(\psi_{k,l-1}^n \overline{\psi_{k,l}^n}) + 2\Re(\psi_{k,l-1}^n \overline{\psi_{k-1,l}^n}) \\ & \quad + 4\Re(\psi_{k-1,l}^n \overline{\psi_{k,l}^n}) + |\psi_{k-1,l-1}^n|^2 + |\psi_{k-1,l}^n|^2 + |\psi_{k,l-1}^n|^2 + |\psi_{k,l}^n|^2], \end{aligned}$$

也即

$$\|A_x A_y \Psi^{n+1}\|^2 = \|A_x A_y \Psi^n\|^2. \quad (3.14)$$

证毕. □

3.3 LEC 算法的误差分析

首先给出数值解的先验估计和算法的截断误差, 然后在此基础上进一步证明算法的收敛性. 利用类似的证明即可得到算法关于初值的稳定性. 其中, C 为广义正常数, 即在不同的位置可以代表不同的值.

引理 3 对任意 $n = 0, 1, 2, \dots, N$, 如果 τ 足够小, 则有如下不等式成立:

$$\|A_x A_y \Psi^n\| < C, \quad \|D_x A_y \Psi^n\| < C, \quad \|D_y A_x \Psi^n\| < C, \quad \|A_x A_y \Psi^n\|_\infty < C.$$

证明 由 (3.11) 可知 $\|A_x A_y \Psi^n\| < C$. 又由 (3.9) 可得

$$\frac{1}{2}(\|D_x A_y \Psi^n\|^2 + \|D_y A_x \Psi^n\|^2) = \frac{\beta}{4} \|A_x A_y \Psi^n\|_4^4 - \mathcal{E}^0. \quad (3.15)$$

根据差分算子的 Sobolev 不等式^[22] 可得

$$\begin{aligned} \|A_x A_y \Psi^n\|_4^4 &= \Delta x \Delta y \sum_{k,l} |A_x A_y \psi_{k,l}^n|^4 \\ &\leq \|A_x A_y \Psi^n\|_\infty^2 \cdot \Delta x \Delta y \sum_{k,l} |A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2 \\ &= \|A_x A_y \Psi^n\|_\infty^2 \|A_x A_y \Psi^n\|^2 \\ &\leq (\varepsilon(\|D_x A_y \Psi^n\| + \|D_y A_x \Psi^n\|) + C\|A_x A_y \Psi^n\|)^2 \|A_x A_y \Psi^n\|^2 \\ &\leq 2\varepsilon^2 \|A_x A_y \Psi^n\|^2 (\|D_x A_y \Psi^n\|^2 + \|D_y A_x \Psi^n\|^2) + C\|A_x A_y \Psi^n\|^4. \end{aligned} \quad (3.16)$$

由 (3.15) 和 (3.16) 可得

$$\frac{1}{2}(\|D_x A_y \Psi^n\|^2 + \|D_y A_x \Psi^n\|^2) \leq \frac{\beta}{2} \varepsilon^2 (\|A_x A_y \Psi^n\|^2 (\|D_x A_y \Psi^n\|^2 + \|D_y A_x \Psi^n\|^2)) + C. \quad (3.17)$$

只要选取 ε , 满足 $\beta \varepsilon^2 \|A_x A_y \Psi^n\|^2 < 1$, 则由 (3.17) 可得

$$\|D_x A_y \Psi^n\| < C, \quad \|D_y A_x \Psi^n\| < C.$$

进一步运用差分算子的 Sobolev 不等式^[22], 即可得到 $\|A_x A_y \Psi^n\|_\infty < C$. 证毕. $\square$

若 $\psi(x, y, t) \in C_{x,y,t}^{4,4,3}$, 由 Taylor 展开, 格式 (3.3) 的截断误差为 $\mathcal{O}(\tau^2 + \Delta x^2 + \Delta y^2)$. 另外, $\varphi_{k,l}^n$ 表示在 (x_k, y_l) ($t = n\tau$) 时的精确解, 格式 (3.3) 的逐点误差记为 $e_{k,l}^n = \varphi_{k,l}^n - \psi_{k,l}^n$. 截断误差可写为

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{k,l}^n &= iD_t A_x^2 A_y^2 \varphi_{k-1,l-1}^n + A_t A_y^2 D_x^2 \varphi_{k-1,l-1}^n + A_t A_x^2 D_y^2 \varphi_{k-1,l-1}^n \\ &\quad + A_x A_y (\beta A_t |A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^n|^2 \cdot A_t A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^n). \end{aligned} \quad (3.18)$$

(3.18) 减去 (3.3) 可得

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{k,l}^n &= iD_t A_x^2 A_y^2 e_{k-1,l-1}^n + A_t A_y^2 D_x^2 e_{k-1,l-1}^n + A_t A_x^2 D_y^2 e_{k-1,l-1}^n \\ &\quad + A_x A_y (\beta A_t |A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^n|^2 \cdot A_t A_x A_y e_{k-1,l-1}^n) \\ &\quad + A_x A_y [\beta A_t (|A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^n|^2 - |A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n|^2) \cdot A_t A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n]. \end{aligned} \quad (3.19)$$

定理 4 若 $\psi(x, y, t) \in C_{x,y,t}^{4,4,3}$, 则格式 (3.1) 的解收敛到方程 (1.1) 关于初值 $\psi(x, y, 0)$ 的解, 收敛阶为 $\mathcal{O}(\tau^2 + \Delta x^2 + \Delta y^2)$.

证明 与定理 3 相似的计算过程, 用 $A_t \overline{e_{k,l}^n}$ 乘以 (3.19), 关于空间指标 k 和 l 求和, 然后取虚部

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta y \sum_{k,l} \mathcal{I}(\mathcal{T}_{k,l}^n \cdot A_t \overline{e_{k,l}^n}) &= \frac{1}{16\tau} (\|e^{n+1}\|^2 - \|e^n\|^2) + \Delta x \Delta y \sum_{k,l} \mathcal{I}(A_x A_y [\beta A_t (|A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^n|^2 \\ &\quad - |A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n|^2) \cdot A_t A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n] \cdot A_t \overline{e_{k,l}^n}). \end{aligned} \quad (3.20)$$

由引理 3, 可得

$$\sum_{k,l} |A_x A_y [\beta A_t (|A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^n|^2 - |A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n|^2) \cdot A_t A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n]|$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{k,l} |A_x A_y [\beta A_t (A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^n \cdot \overline{A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^n} - A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n \cdot \overline{A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n}) A_t A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n]| \\
 &= \sum_{k,l} \left| \frac{\beta}{2} A_x A_y (A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^{n+1} \cdot \overline{A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^{n+1}} - A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^{n+1} \cdot \overline{A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^{n+1}} \right. \\
 &\quad \left. + A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^n \cdot \overline{A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^n} - A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n \cdot \overline{A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n}) \cdot A_t A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n \right| \\
 &\leq \frac{\beta}{2} \sum_{k,l} |A_x A_y (A_x A_y e_{k-1,l-1}^{n+1} \cdot \overline{A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^{n+1}} + A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^{n+1} \cdot \overline{A_x A_y e_{k-1,l-1}^{n+1}} \\
 &\quad + A_x A_y e_{k-1,l-1}^n \cdot \overline{A_x A_y \varphi_{k-1,l-1}^n} + A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n \cdot \overline{A_x A_y e_{k-1,l-1}^n})| |A_t A_x A_y \psi_{k-1,l-1}^n| \\
 &\leq 2\beta \sum_{k,l} \max_{k,l,n} \{|\varphi_{k,l}^n|, |A_x A_y \psi_{k,l}^n|\} \max_{k,l,n} |A_x A_y \psi_{k,l}^n| |A_x^2 A_y^2 A_t e_{k-1,l-1}^n| \\
 &\leq C \sum_{k,l} |A_t e_{k,l}^n|. \tag{3.21}
 \end{aligned}$$

由 (3.20) 和 (3.21), 可得

$$\begin{aligned}
 \|e^{n+1}\|^2 - \|e^n\|^2 &\leq 16\tau \left[\frac{1}{2} (\|\mathcal{T}^n\|^2 + \|A_t e^n\|^2) + C \|A_t e^n\|^2 \right] \\
 &\leq 16\tau [\mathcal{O}(\tau^2 + \Delta x^2 + \Delta y^2)^2 + C(\|e^{n+1}\|^2 + \|e^n\|^2)] \\
 &\leq \tau \mathcal{O}(\tau^2 + \Delta x^2 + \Delta y^2)^2 + C\tau (\|e^{n+1}\|^2 + \|e^n\|^2). \tag{3.22}
 \end{aligned}$$

由 Gronwall 不等式^[22] 可以得到如下不等式:

$$\|e^{n+1}\|^2 \leq (\|e^0\|^2 + \tau \mathcal{O}(\tau^2 + \Delta x^2 + \Delta y^2)^2) e^{4CT}. \tag{3.23}$$

其中, $T = n\tau$. 同时由 $\|e^0\|^2 = \mathcal{O}(\tau^2 + \Delta x^2 + \Delta y^2)^2$ 可得到

$$\|e^{n+1}\|^2 \leq \mathcal{O}(\tau^2 + \Delta x^2 + \Delta y^2)^2. \tag{3.24}$$

证毕. $\square$

4 局部动量守恒算法

本节主要构造一种局部动量守恒 (LMC) 算法, 同时给出其守恒性质, 由于误差分析与 LEC 算法类似, 故省去这部分内容.

4.1 LMC 算法的构造

利用修正的中点格式在时空方向分别对方程 (1.4) 进行离散, 可得到如下格式:

$$\begin{aligned}
 -D_t A_x A_y p_{k,l}^n &= A_t A_x A_y b_{k,l}^n + A_t A_x A_y d_{k,l}^n + \beta A_x (|A_t A_y \psi_{k,l}^n|^2) \cdot A_t A_x A_y q_{k,l}^n, \\
 D_t A_x A_y q_{k,l}^n &= A_t A_x A_y a_{k,l}^n + A_t A_x A_y c_{k,l}^n + \beta A_x (|A_t A_y \psi_{k,l}^n|^2) \cdot A_t A_x A_y p_{k,l}^n, \\
 A_y D_x u_{k,l}^n &= A_x A_y a_{k,l}^n, \quad A_y D_x p_{k,l}^n = A_x A_y u_{k,l}^n, \quad A_y D_x g_{k,l}^n = A_x A_y b_{k,l}^n, \quad A_y D_x q_{k,l}^n = A_x A_y g_{k,l}^n, \\
 A_x D_y v_{k,l}^n &= A_x A_y c_{k,l}^n, \quad A_x D_y p_{k,l}^n = A_x A_y v_{k,l}^n, \quad A_x D_y w_{k,l}^n = A_x A_y d_{k,l}^n, \quad A_x D_y q_{k,l}^n = A_x A_y w_{k,l}^n,
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

其中,

$$|A_t A_y \psi_{k,l}^n|^2 = (A_t A_y p_{k,l}^n)^2 + (A_t A_y q_{k,l}^n)^2.$$

我们可以注意到, LMC 算法仅在非线性项的离散与 LEC 算法略有差别.

消去辅助变量 u 、 g 、 v 、 w 、 a 、 b 、 c 和 d , 可得

$$\begin{aligned} -D_t A_x^2 A_y^2 p_{k,l}^n &= A_t A_y^2 D_x^2 q_{k,l}^n + A_t A_x^2 D_y^2 q_{k,l}^n + A_x A_y (\beta A_x |A_t A_y \psi_{k,l}^n|^2 \cdot A_t A_x A_y q_{k,l}^n), \\ D_t A_x^2 A_y^2 q_{k,l}^n &= A_t A_y^2 D_x^2 p_{k,l}^n + A_t A_x^2 D_y^2 p_{k,l}^n + A_x A_y (\beta A_x |A_t A_y \psi_{k,l}^n|^2 \cdot A_t A_x A_y p_{k,l}^n), \end{aligned} \quad (4.2)$$

或者

$$i D_t A_x^2 A_y^2 \psi_{k,l}^n + A_t A_y^2 D_x^2 \psi_{k,l}^n + A_t A_x^2 D_y^2 \psi_{k,l}^n + A_x A_y (\beta A_x |A_t A_y \psi_{k,l}^n|^2 \cdot A_t A_x A_y \psi_{k,l}^n) = 0. \quad (4.3)$$

4.2 LMC 算法的守恒性质

定理 5 格式 (4.2) 或 (4.3) 满足离散的局部动量守恒律

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{k,l}^n &= D_t \left[\frac{1}{2} (A_x A_y p_{k,l}^n \cdot D_x A_y q_{k,l}^n - A_x A_y q_{k,l}^n \cdot D_x A_y p_{k,l}^n) \right] \\ &\quad + D_x \left(\frac{\beta}{4} |A_t A_y \psi_{k,l}^n|^4 + \frac{1}{2} [(A_t A_y g_{k,l}^n)^2 + (A_t A_y u_{k,l}^n)^2] \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} (A_t A_y q_{k,l}^n \cdot D_t A_y p_{k,l}^n - A_t A_y p_{k,l}^n \cdot D_t A_y q_{k,l}^n) \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} [(A_t D_y q_{k,l}^n)^2 + (A_t D_y p_{k,l}^n)^2] \right) \\ &\quad + D_y (A_t A_x w_{k,l}^n \cdot D_x A_t q_{k,l}^n + A_t A_x v_{k,l}^n \cdot D_x A_t p_{k,l}^n) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (4.4)$$

定理 6 在周期边界条件下, 格式 (4.1) 满足离散全局动量守恒律

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta y \sum_{k,l} \left[\frac{1}{2} (A_x A_y p_{k,l}^{n+1} \cdot D_x A_y q_{k,l}^{n+1} - A_x A_y q_{k,l}^{n+1} \cdot D_x A_y p_{k,l}^{n+1}) \right] \\ = \Delta x \Delta y \sum_{k,l} \left[\frac{1}{2} (A_x A_y p_{k,l}^n \cdot D_x A_y q_{k,l}^n - A_x A_y q_{k,l}^n \cdot D_x A_y p_{k,l}^n) \right]. \end{aligned} \quad (4.5)$$

换言之,

$$\mathcal{M}^{n+1} = \mathcal{M}^n = \cdots = \mathcal{M}^0. \quad (4.6)$$

定理 7 在周期边界条件下, 格式 (4.3) 保持电荷守恒

$$\mathcal{Q}^{n+1} = \|A_x A_y \Psi^{n+1}\|^2 = \Delta x \Delta y \sum_{k,l} |A_x A_y \psi_{k,l}^{n+1}|^2 = \cdots = \mathcal{Q}^0. \quad (4.7)$$

5 数值算例

本节的局部守恒算法主要与多辛 Preissman (MSP) 算法进行比较. 2D-NLS 方程 (1.1) 能写出多辛形式^[7]. 利用 MSP 算法对 2D-NLS 方程 (1.1) 进行离散, 可以得到

$$i D_t A_x^2 A_y^2 \psi_{k,l}^n + A_t A_y^2 D_x^2 \psi_{k,l}^n + A_t A_x^2 D_y^2 \psi_{k,l}^n + A_x A_y (\beta |A_t A_x A_y \psi_{k,l}^n|^2 \cdot A_t A_x A_y \psi_{k,l}^n) = 0. \quad (5.1)$$

我们可以证明 MSP 算法 (5.1) 能够保持离散的多辛守恒律, 却不能保持离散能量守恒律和离散动量守恒律.

为了验证算法的局部守恒性质, 我们定义 $t = n\tau$ 时, 局部能量残差和局部动量残差的最大值 $\mathcal{E}_{\max}^n = \max_{k,l} |\mathcal{E}_{k,l}^n|$ 和 $\mathcal{M}_{\max}^n = \max_{k,l} |\mathcal{M}_{k,l}^n|$, 其中, $\mathcal{E}_{k,l}^n$ 和 $\mathcal{M}_{k,l}^n$ 能够分别通过 (3.4) 和 (4.4) 得到. 为了使比较结果更具说服力, 我们选用理想的齐次边界条件和周期边界条件. 同时, 隐式部分采用不动点迭代进行求解, 收敛控制误差设定为 $\varepsilon = 10^{-15}$.

例 1 考虑凝聚态物理中的一个例子. 空间区域为 $[-2\pi, 2\pi] \times [-2\pi, 2\pi]$, 计算时间 $t = 100$, 参数 $\beta = 1$, 以及初值条件

$$\psi(x, y, 0) = \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right), \quad (5.2)$$

边界条件为 $\psi(\pm 2\pi, y, t) = \psi(x, \pm 2\pi, t) = 0$, 空间步长 $\tau = 0.01$ 和时间步长 $\Delta x = \Delta y = 4\pi/64$.

图 1 为 $t = 100$ 时 LEC 算法的计算结果. 图 2 为 LEC 算法和 MSP 算法的全局能量误差. 图 3 为 LMC 算法和 MSP 算法的全局能量误差. 图 4 分别为 LEC 算法和 LMC 算法在 $t = 100$ 时的局部能量残差 $\mathcal{E}$ 和局部动量残差 $\mathcal{M}$. 数值结果验证了 LEC 算法和 LMC 算法能够较好地保持局部和全局守恒律.

例 2 考虑 2D-NLS 方程 (1.1) 出现奇异解的情形, 常数 $\beta = 1$, 初值条件

$$\psi(x, y, 0) = (1 + \sin x)(2 + \sin y), \quad (5.3)$$

以及考虑在 $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ 上的周期边界条件, 计算时间为 $t = 0.108$, $\tau = 0.00001$, $\Delta x = \Delta y = \frac{2\pi}{128}$.

图 5 为 LEC 算法的计算结果, 其他两种算法的结果类似, 故略去. 其结果表明三种算法能较好地模拟孤立子, 同时, 该结果与间断 Galerkin 方法取得的结果类似^[5]. 图 6 为 LEC 算法和 LMC 算法总电荷误差的比较. 两种算法均控制在 10^{-12} 这个量级内. 图 7 分别为 LEC 算法和 LMC 算法在 $t = 0.108$ 时的局部能量残差 $\mathcal{E}$ 和局部动量残差 $\mathcal{M}$. 由于奇异解的出现, $|\psi|$ 快速增大, 在奇异解的周围, 残差显著增大. 局部守恒律的残差能反映空间离散的误差, 其大幅度变化表明了空间离散的误差变大^[15]. 图 7 也说明奇异解出现后, 较大的空间步长已不能满足要求. 图 8 的结果表明 LMC 算法在全局动量保持方面优于 MSP 算法.

图 1 LEC 算法模拟在 $t = 100$ 时的孤立波解

图 2 LEC 算法 (a) 和 MSP 算法 (b) 离散全局能量误差的比较

图 3 LMC 算法 (a) 和 MSP 算法 (b) 离散全局动量误差的比较

图 4 $t=100$ 时 LEC 算法局部能量残差 (a) 和 LMC 算法局部动量残差 (b)

图 5 LEC 算法模拟奇异波解

图 6 LEC 算法 (a) 和 LMC 算法 (b) 离散总电荷误差的比较

图 7 $t = 0.108$ 时 LEC 算法局部能量残差 (a) 和 LMC 算法局部动量残差 (b)

图 8 LMC 算法 (a) 和 MSP 算法 (b) 离散全局动量误差的比较

6 结论

本文提出了两类局部守恒算法用于求解 2D-NLS 方程. 不需要考虑边界条件, 即可保持任意时空区域上相应的局部能量守恒律和局部动量守恒律. 在周期边界条件下, 它们能自然地保持相应的全局守恒律. 通过理论分析和数值算例, 两类算法对于 2D-NLS 方程长时间计算是有效的, 并且具有局部保结构的特性.

参考文献

- 1 Zakharov V E, Synakh V S. The nature of self-focusing singularity. *Sov Phys JETP*, 1975, 41: 465–468
- 2 Glassey R T. On the blowing up of solutions to the Cauchy problem for nonlinear Schrödinger equations. *J Math Phys*, 1977, 18: 1794–1797
- 3 Sulem P L, Sulem C, Patera A. Numerical simulation of singular solutions to the two-dimensional cubic schrödinger equation. *Comm Pure Appl Math*, 1984, 37: 755–778
- 4 Jiménez S, Llorente I M, Mancho A M, et al. A numerical scheme for the simulation of blow-up in the nonlinear Schrödinger equation. *Appl Math Comput*, 2003, 134: 271–291
- 5 Xu Y, Shu C W. Local discontinuous Galerkin methods for nonlinear Schrödinger equations. *J Comput Phys*, 2005, 205: 72–97
- 6 Chen Y M, Zhu H J, Song S H. Multi-symplectic splitting method for two-dimensional nonlinear Schrödinger equation. *Commun Theor Phys (Beijing)*, 2011, 56: 617–622
- 7 Zhu H, Chen Y, Song S, et al. Symplectic and multi-symplectic wavelet collocation methods for two-dimensional Schrödinger equations. *Appl Numer Math*, 2011, 61: 308–321
- 8 Bridges T J, Reich S. Multi-symplectic integrators: Numerical schemes for Hamiltonian PDEs that conserve symplecticity. *Phys Lett A*, 2001, 284: 184–193
- 9 Bridges T J, Reich S. Numerical methods for Hamiltonian PDEs. *J Phys A*, 2006, 39: 5287–5320
- 10 Hong J, Kong L. Novel multi-symplectic integrators for nonlinear fourth-order Schrödinger equation with trapped term. *Commun Comput Phys*, 2010, 7: 613–630
- 11 Frank J, Moore B E, Reich S. Linear PDEs and numerical methods that preserve a multisymplectic conservation law. *SIAM J Sci Comput*, 2006, 28: 260–277
- 12 Moore B, Reich S. Backward error analysis for multi-symplectic integration methods. *Numer Math*, 2003, 95: 625–652
- 13 Ascher U M, McLachlan R I. Multisymplectic box schemes and the Korteweg-de Vries equation. *Appl Numer Math*, 2004, 48: 255–269

- 14 Qian X, Chen Y, Song S. Novel conservative methods for Schrödinger equations with variable coefficients over long time. *Commun Commut Phys*, 2014, 15: 692–711
- 15 Bridges T J, Reich S. Multi-symplectic spectral discretizations for the Zakharov-Kuznetsov and shallow water equations. *Phys D*, 2001, 152–153: 491–504
- 16 Kong L, Hong J, Fu F, et al. Symplectic structure-preserving integrators for the two-dimensional Gross-Pitaevskii equation for BEC. *J Comput Appl Math*, 2011, 235: 4937–4948
- 17 Gonzalez O, Simo J C. On the stability of symplectic and energy-momentum algorithms for non-linear Hamiltonian systems with symmetry. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 1996, 134: 197–222
- 18 Celledoni E, Grimm V, McLachlan R I, et al. Preserving energy resp. dissipation in numerical PDEs using the “Average Vector Field” method. *J Comput Phys*, 2012, 231: 6770–6789
- 19 Wang Y S, Wang B, Qin M Z. Local structure-preserving algorithms for partial differential equations. *Sci China Ser A*, 2008, 51: 2115–2136
- 20 Cai J, Wang Y, Liang H. Local energy-preserving and momentum-preserving algorithms for coupled nonlinear Schrödinger system. *J Comput Phys*, 2013, 239: 30–50
- 21 Hong J, Sun Y. Generating functions of multi-symplectic RK methods via DW Hamilton-Jacobi equations. *Numer Math*, 2008, 110: 491–519
- 22 Zhou Y L. Application of Discrete Functional Analysis to the Finite Difference Method. Hong Kong: International Academic Press, 1990

Numerical analysis of two local conservative methods for two-dimensional nonlinear Schrödinger equation

Xu Qian & Songhe Song

Abstract In this paper, we propose two local conservative methods for solving two-dimensional nonlinear Schrödinger equation. Without consideration of the boundary conditions, they can preserve corresponding local energy and momentum conservation laws exactly at arbitrary spatial-temporal regions. Meanwhile, the charge, global energy and global momentum conservation laws can be conserved under suitable boundary conditions. Numerical analysis, including conservative properties and error estimation analysis, are investigated. Furthermore, a similar multi-symplectic Preissman scheme is constructed as comparison. Numerical experiments show the advantages of the proposed methods during long-time numerical simulations and validate the analysis.

Keywords Schrödinger equation, local conservative property, energy conservation laws, momentum conservation laws, structure-preserving algorithm

MSC(2010) 65M06, 65M12, 65Z05

doi: 10.1360/SCM-2016-0308