

非线性波方程的多辛五点格式

王雨顺^{①,②} 王 斌^① 杨宏伟^① 王云峰^①

(^①) 中国科学院大气物理所大气科学与地球流体力学数值模拟国家重点实验室, 北京 100029; (^②) 南京师范大学数学与计算机科学
学院, 南京 210097. E-mail: wys@lasg.iap.ac.cn

摘要 介绍非线性波方程的多辛结构, 用复合构造的方法证明了经典五点格式是多辛格式. 通过数值模拟非线性 Klein-Gordon 方程的高振荡波和 Sine-Gordon 方程的正负孤立波的碰撞, 比较分析多辛格式和能量守恒格式、单辛格式数值表现, 说明多辛格式在处理偏微分方程时的优越性: 不需要像辛格式那样首先空间截断, 直接保持偏微分方程的结构; 不仅能保持原问题的内在性质, 还能近似地保持如能量、动量等首次积分; 具有更优异的数值稳定性和长时间数值跟踪能力.

关键词 辛格式 能量守恒格式 非线性波方程 多辛格式

随着计算机的飞速发展, 数值方法越来越显示出其优越性和生命力. 但在一些具体应用中, 如分子化学、天气预报, 计算量非常庞大, 积分时间很长, 仅靠提高机器的性能是不能解决问题的, 数值方法的稳定性和省时性仍是至关重要. 为此人们设计了各种各样的数值算法. 就差分格式而言, 早在 1928 年, Courant, Friedrichs 和 Lewy 就有意构造差分格式能保持一个守恒量, 使得格式不仅与原方程相容, 而且能保持一个称之为“能量”的守恒量. 当时保持的这个守恒量并不一定是物理意义下的能量, 而是一个正定的量, 保证差分格式在某种范数意义下的稳定性. 由于能量守恒是许多进程方程最重要的首次积分, 能量守恒的格式自然引起极大的关注并很快得到了发展^[1,2]. 在数值算法应尽可能保持原问题的基本特征的指导原则下, Feng 等人^[3]首先提出 Hamilton 系统辛格式算法以及一般保守系统的保结构算法. 他和他的研究小组在构造算法和理论分析方面都取得了一系列成果^[3,4], 并且引起国内外学者的极大兴趣, 产生了许多重要的后继成果^[5]. 计算实验显示, 辛格式算法优异的稳定性和长时间跟踪能力有着重要的应用前景^[6,7].

Hamilton 系统是保守系统有包含能量在内的许多守恒量, 而且, 由于一切真实的没有耗散的物理过程都可以在某种方式下表示成 Hamilton 形式, 也就是说, 许多能量守恒的系统往往也是 Hamilton 系统. 那么就产生一个非常重要的问题: 辛格式、能量守恒格式究竟谁更适合这样的系统? 冯康以及许多后来从事辛格式研究的科学家认为: 辛结构是 Hamilton 系统最本质的特征, 能保持辛结构的辛算法无疑是

Hamilton 系统最好的算法. 然而 Salvador 等人^[8]却给出了反例. 他们通过数值模拟非线性 Klein-Gordon 方程的高振荡波, 详细比较了如下 4 个格式的数值表现:

$$\delta_t^2 u_n^m - \delta_x^2 u_n^m + \frac{F(u_n^{m+1}) - F(u_n^{m-1})}{u_n^{m+1} - u_n^{m-1}} = 0, \quad (1)$$

$$\delta_t^2 u_n^m - \delta_x^2 u_n^m + f(u_n^m) = 0, \quad (2)$$

$$\delta_t^2 u_n^m - \delta_x^2 u_n^m + \frac{f(u_{n+1}^m) + f(u_{n-1}^m)}{2} = 0, \quad (3)$$

$$\delta_t^2 u_n^m - \delta_x^2 u_n^m + \frac{F(u_{n+1}^m) - F(u_{n-1}^m)}{u_{n+1}^m - u_{n-1}^m} = 0, \quad (4)$$

其中, 时空区域的网格划分是一致的, h 和 τ 分别是空间和时间步长, $u_n^m \approx u(x_n, t_m)$, δ_t^2 , δ_x^2 分别是时间和空间方向上的二阶中心差商算子:

$$\delta_t^2 u_n^m = \frac{u_n^{m+1} - 2u_n^m + u_n^{m-1}}{\tau^2},$$

$$\delta_x^2 u_n^m = \frac{u_{n+1}^m - 2u_n^m + u_{n-1}^m}{h^2}.$$

格式(1)是能量守恒格式, 格式(2)是经典的五点格式, 是显式的辛格式, 格式(3)是典型的中点格式, 可以通过一个线性变换与辛格式等价, 格式(4)是动量守恒格式. 他们计算的问题为:

$$\begin{aligned} u_{tt} - u_{xx} + f(u) &= 0, \\ f(u) &= F'(u) = u + u^3, \\ u(x, 0) &= A(1 + \cos(2\pi x/L)), \\ u_t(x, 0) &= 0, \quad u(x, t) = u(x + L, t), \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $L = 1.28$, A 是振幅.

结论如下: 若振幅 A 小于 0.1, 4 个格式的数值结

果在很长时间内几乎相同, 都能很好模拟真实解; 若振幅 $A = 10$, 除了能量格式(1)外, 其他3个格式的数值解在一小段时间后就失去了对称性; 若振幅 A 大于15, 这3个格式的数值解很快就 blow-up, 只有能量格式(1)能很好地保持解析解的有界性和空间对称性. 所以对于大振幅高振荡的非线性波动方程来说, 能量格式(1)长期计算能力最好, 而其他3个算法都不适合计算此问题.

众所周知, 上述非线性 Klein-Gordon 方程可以写成 Hamilton 系统的形式. 所以, 此结果以及在此结果上所得到的结论是否定辛格式是 Hamilton 系统最好算法的一个非常重要的论据.

近来, Marsden 等人^[9]和 Bridges 等人^[10]分别基于 Lagrangian 系统和 Hamilton 系统提出了多辛 PDEs 和多辛算法的概念. Marsden 从变分原理出发, 由变分的边界项得到 Cartan 形式和多辛形式, 限制作用泛函在解空间上得到多辛守恒律. 该多辛守恒律可以看成是 Lagrange 流保辛结构的自然推广. Bridges 通过协变的 Legendre 变换, 直接推广典则 Hamilton 方程到多辛 PDEs, Hamilton 方程的辛守恒律自然推广成多辛方程的多辛守恒律. Bridges 称能保持离散的多辛守恒律的数值格式为多辛格式, 也指出传统的 Preissman 格式和 Leap-frog 格式是多辛格式. 由于多辛 PDEs 以及多辛算法的用途广泛且多辛算法具有许多优越性, 所以现在多辛算法的研究在国内外都非常热门. 结合前面的问题, 我们自然想知道, 多辛、辛以及能量守恒格式, 谁更适合这种保守的偏微分系统?

本文分析了非线性 Klein-Gordon 方程的多辛性以及经典五点格式的局部的守恒律, 说明该格式是多辛格式. 也就是说: 如果上述数值实验结果真确的话, 就又否定了多辛格式的有效性和优越性. 为此, 我们重复了以上实验, 结果却发现多辛格式(2)和辛格式(3)的数值结果并没有出现 Blow-up 的现象, 相反当振幅很大时, 它们能和能量守恒格式一样, 给出有界且满足空间对称的数值解. 我们还构造了一个高阶的单辛格式 (不是多辛的), 通过数值比较指出, 如果应用该格式进行比较, 可以得到他们的结论. 但是我们指出: 模拟的失真并不是辛格式本身什么缺点造成的, 而是空间截断偏微分方程成 Hamilton ODEs 时丢失了波形的真实信息. 另一方面, 这也很好地说明了多辛格式对单辛格式的优越性, 因为多

辛格式不需要首先空间近似, 而是直接处理偏微分方程, 它保持的是偏微分方程本身的性质. 而辛格式保持只是近似以后方程的 Hamilton 性质. 我们还运用多辛格式长时间模拟 Sine-Gordon 方程正负孤立波的碰撞, 通过比较说明了多辛格式具有更优异的数值稳定性和长时间跟踪能力, 更适合处理这类保守的偏微分系统.

1 多辛结构和多辛格式

下面我们简要说明多辛 PDEs 和多辛格式的概念以及证明经典五点格式的多辛性. 引进共轭动量变量 $v = \partial_t u$ 和 $w = \partial_x u$, 方程(5)可以改写成如下多辛形式:

$$M \dot{z}_t + K \dot{z}_x = \nabla_z S(z),$$

$$M = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, K = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, z = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix},$$

$$S(z) = \frac{1}{2}(v^2 - w^2) + F(u). \quad (6)$$

其中, 反对称矩阵 M 和 K 对应两个形式:

$$\omega^1(\xi, \eta) = \langle M\xi, \eta \rangle, \omega^2(\xi, \eta) = \langle K\xi, \eta \rangle,$$

$\xi, \eta \in TQ$: $Q \subset R^3$ 是由 u, v, w 组成的相空间; $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 是 Q 的内积运算. 显然, ω^1 和 ω^2 是闭形式, 所以是预辛的. 在 Q 的子空间上可以是非退化的, 也就是辛形式. 这样在不同的方向上有不同的辛结构, ω^1 对应于 t 方向, ω^2 对应于 x 方向. 同样, 若底空间是 n 维的, 就有 n 个辛结构. 在这种意义下, 称方程(6)为多辛 Hamilton 方程, 或者多辛 PDEs. 多辛 Hamilton 方程(6)具有的一个重要性质为多辛守恒律:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \omega^1(U, V) + \frac{\partial}{\partial \eta} \omega^2(U, V) = 0. \quad (7)$$

其中, U, V 是(6)式对应的变分方程的任意两个解. 方程(6)的变分方程为:

$$M d\dot{z}_t + K d\dot{z}_x = D_{zz} \dot{z}, \quad (8)$$

因为, U, V 是(8)式的解, 所以有

$$\langle U, M V_t \rangle + \langle U, K V_x \rangle = \langle U, D_{zz} V \rangle,$$

$$\langle V, M U_t \rangle + \langle V, K U_x \rangle = \langle V, D_{zz} U \rangle.$$

由 D_{zz} 的对称性, 得到

$$\langle U, M V_t \rangle + \langle U, K V_x \rangle + \langle V, M U_t \rangle + \langle V, K U_x \rangle = 0,$$

即守恒律(7)式.

与无穷维 Hamilton 方程的形式相比, 多辛形式的 Hamilton (7)式除了能清楚刻画这些局部的守恒律

之外, 更重要的优点是它的相空间是有限维的. 这样它就可以作为一个基本形式、应用有限维的理论. 分析偏微分方程诸如稳定性之类的重要性质. 对应于非线性波方程(6), 多辛守恒律为:

$$\partial_t (du \wedge dv) - \partial_x (du \wedge dw) = 0, \quad (9)$$

这是个局部守恒律, 它们在任意的局部时空区域内成立, 与方程的边界条件无关. 对上式在 x 方向积分, 在适当的边界条件下, 就可以得到相应的整体的辛守恒律、能量和动量守恒律. 也就是说, 局部守恒律本身蕴涵着整体守恒律, 是方程更本质的性质. Bridges^[10]称满足离散的多辛守恒律的数值格式为多辛格式, 下面我们证明格式(2)是多辛格式.

多辛方程(6)的 Euler box 格式为:

$$\begin{aligned} D_t v_i^j - D_x w_i^j + F'(u_i^j) &= 0, \\ D_t u_i^j &= v_i^{j+1}, \\ D_x u_i^j &= w_{i+1}^j, \end{aligned} \quad (10)$$

其中, D_t 和 D_x 分别是两个方向的一阶向前差商算子:

$$D_t u_i^j = \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau}, \quad D_x u_i^j = \frac{u_{i+1}^j - u_i^j}{h}.$$

显然, 上述格式与经典五点格式(2)是等价的. 由(10)式:

$$\begin{aligned} D_t dv_i^j - D_x dw_i^j + F''(u_i^j) du_i^j &= 0, \\ D_t du_i^j &= dv_i^{j+1}, \\ D_x du_i^j &= dw_{i+1}^j, \end{aligned} \quad (11)$$

用 du_i^j 外积(11)式的第 1 行, 有

$$D_t dv_i^j \wedge du_i^j - D_x dw_i^j \wedge du_i^j = 0.$$

由离散的 Leibniz 法则可以得到:

$$\begin{aligned} D_t (dv_i^j \wedge du_i^j) &= D_t dv_i^j \wedge du_i^j + dv_i^{j+1} \wedge D_t du_i^j \\ &= D_t dv_i^j \wedge du_i^j + dv_i^{j+1} \wedge dv_i^{j+1} = D_t dv_i^j \wedge du_i^j. \end{aligned}$$

同理可得:

$$D_x (dw_i^j \wedge du_i^j) = D_x dw_i^j \wedge du_i^j.$$

所以我们得到离散的多辛守恒律:

$$Dt(dv_i^j \wedge du_i^j) - D_x(dw_i^j \wedge du_i^j) = 0. \quad (12)$$

这样我们就证明了非线性 Klein-Gordon 方程的经典五点格式是多辛格式.

2 数值实验

2.1 大振幅高振荡的非线性 Klein-Gordon 方程的重新实验

我们重复他们的实验步骤, 时间和空间步长仍取 $\tau = 0.01, h = 0.02$. 结果如下:

当振幅 A 小于 1 时, 4 个格式给出的数值结果的确在很长时间内相同, 能量和动量也保持得较好. 当 A 逐渐增大时, 动量守恒格式(4)给出的数值解首先在波形上失去空间对称性, 振幅也逐渐超出了正常的振荡范围, 随着积分时间的增加, 出现了 Blow-up 现象. 这说明动量守恒格式的确没有能量守恒格式和辛格式好, 从动量守恒的表达式来分析, 动量守恒格式只能保证其数值解的一阶导数 u_x, u_t 有界, 而不能保证数值解 $u(x, t)$ 本身有界. 但是辛格式(2), (3)给出的数值解并没有 Blow-up 现象, 正好相反, 它们的空间对称性和振幅都保持得很好(图 1 下). 即使当振幅 $A = 30$, 而且长时间计算以后仍是这样(图 1 上).

由于不能解析求解, 不知道真实的波形, 只能定性地分析出真实解是满足空间对称性, 在一定范围

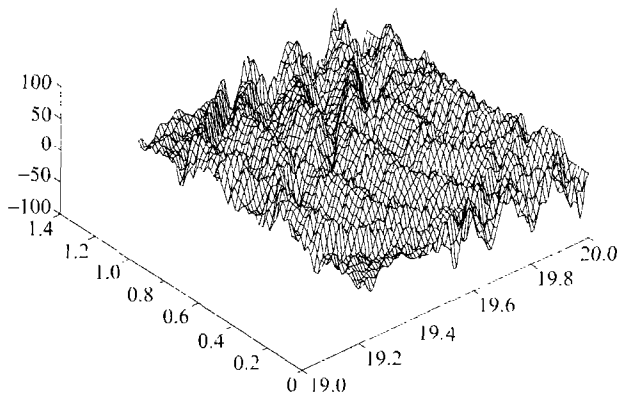
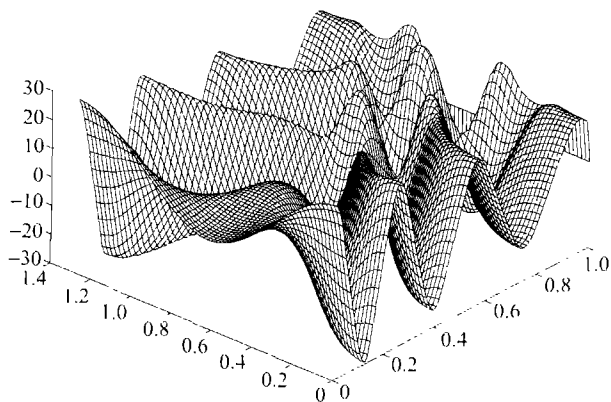


图 1 经典五点格式给出的大振幅 Klein-Gordon 方程的数值解

上图是振幅 $A = 15$ 从 $t = 0 \sim 1$ 的波形图; 下图是振幅 $A = 30$ 从 $t = 19.2 \sim 20$ 的波形图

的振幅内振荡,而这一点能量守恒格式和辛格式都能保持.事实上,它们给出的波形在很长时间内都相同,即使在振幅 $A = 30$ 时也是如此.后来波形不一样是因为计算产生的数值相位差造成的.从这个算例中只能得出五点格式(2)和能量守恒格式(1)都能很好地模拟该问题的结论.得不出能量守恒格式比辛格式好的结论.当然,毫无疑问,能量守恒格式保离散能量的能力比辛格式好.在此算例中,能量守恒格式始终绝对保持离散能量,而辛格式保离散能量的表现并不好,相对误差只有 10^{-2} .但是,如果我们缩小时间步长,取时间步长为 10^{-4} 时,相对误差阶就达到 10^{-6} .而时间步长 $\tau = 0.01$ 显然太大了,因为当振幅较大时,0.01 时间内可能有几次振荡,波形变化非常大.虽然辛格式和能量守恒格式都不能绝对保持动量守恒,但辛格式能近似地保持得很好,就保动量的能力而言,辛格式绝对比能量守恒格式要好.而且值得一提的是,经典五点格式是显式格式,它能表现出像能量守恒格式这样的隐式格式相提并论的数值稳定性和长时间模拟能力是非常难能可贵的,这完全应归因于该格式的保几何结构的特性,即多辛性.

2.2 Sine-Gordon 方程正负孤立波的碰撞实验

为了进一步考察经典五点格式的长时间数值跟踪能力,我们模拟 Sine-Gordon 方程正负孤立波的长

时间碰撞,此时,方程为 $u_{tt} - u_{xx} + \sin(u) = 0$, 取周期边界,初值取为:

$$u(x, 0) = 4 \arctan(a \exp(-x + x_0)) + 4 \arctan(a \exp(x + x_0)),$$

$$u_t(x, 0) = \frac{\partial}{\partial t} [4 \arctan(a \exp(x + x_0 - 0.5t)) + 4 \arctan(a \exp(-x + x_0 - 0.5t))]_{t=0}.$$

实际计算时取 $L = 50$; $x_0 = 20/3$; $a = \sqrt{0.75}$; 空间步长 $h = 0.5$; 时间步长 $\tau = 0.3$. 图 2 给出了从 $t = 0 \sim 240$ 的数值波形 $u(x, t)$, 图中可以清楚地看到波形的进程变化和孤立子的碰撞和反射.

定义离散的总能量和动量为:

$$H(m\tau) = \sum_i \frac{h}{2} \left[\left(\frac{u_i^{m+1} - u_i^m}{\tau} \right)^2 + \frac{u_{i+1}^{m+1} - u_i^{m+1}}{h} \frac{u_{i+1}^m - u_i^m}{h} + 2 - \cos(u_i^m) - \cos(u_i^{m+1}) \right],$$

$$M(m\tau) = \sum_i \frac{u_i^{m+1} - u_i^m}{\tau} \frac{u_{i+1}^m - u_i^m}{2}.$$

图 3 给出了图 2 对应的离散总能量和动量随时间的变化.

我们进行了长时间的数值跟踪,图 4 给出了 $t =$

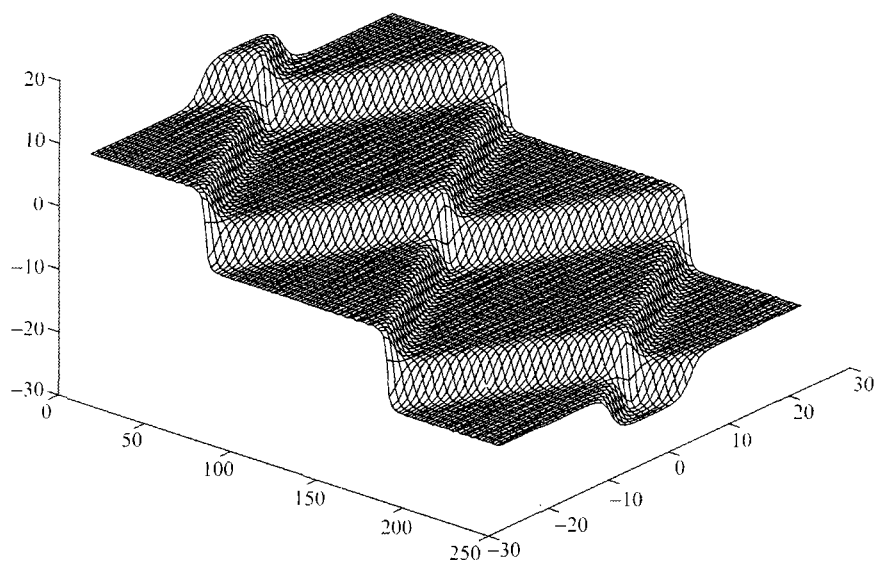


图 2 经典五点格式给出的 Sine-Gordon 方程的正负孤立子(kink-antikink)碰撞的数值解(时间从 $t = 0 \sim 240$)

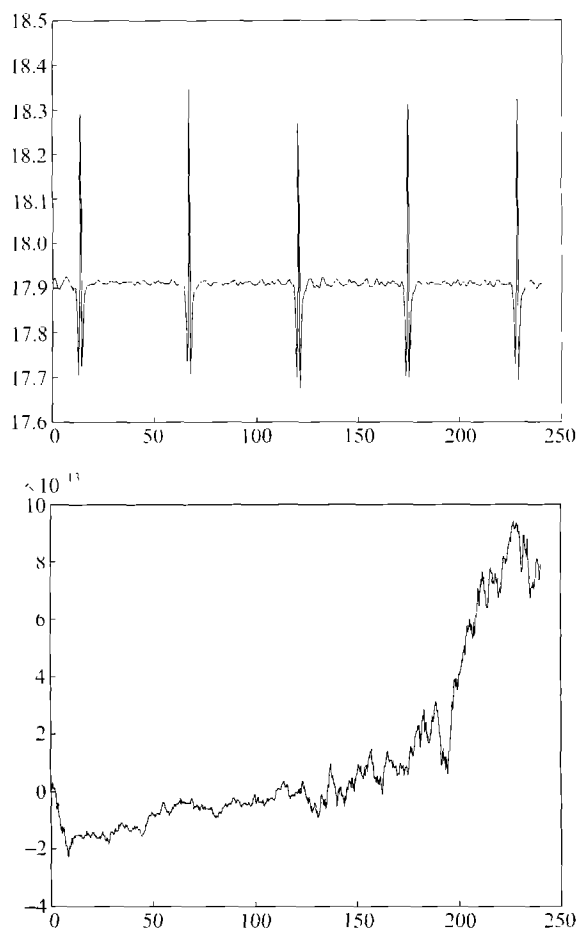


图 3 图 2 所对应的离散总能量和动量
上图是离散总能量, 下图是离散总动量

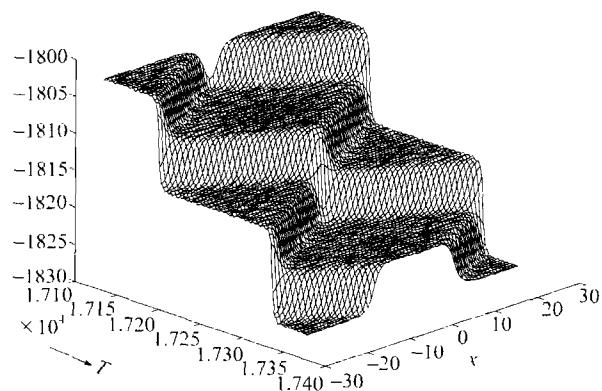


图 4 经典五点格式给出的 Sine-Gordon 方程的正负孤子(kink-antikink)碰撞的波形图 $u(x, t)$ (时间 $t = 17100 \sim 17350$)

17100~17350 的波形 $u(x, t)$.

由图 4 可以看出多辛格式(2)给出的数值解在长时间积分以后仍然具有与真实解相符的性态, 说明多辛格式的确有很好的长时间数值跟踪能力. 图 3 中我们可以看出, 该格式也能很好地保持离散能量和动量, 它所给出离散能量周期性的变化, 始终在初始值附近轻微振荡, 仅在碰撞点有较高的增加, 碰撞过后又回到初始值附近, 动量则更是保持到了 12 位有效数字(图 3 下图). 虽然能量守恒格式一直精确保持离散能量, 从开始到很长一段时间内也能给出正确的波形, 但到时间 $t = 15000$ 以后, 波形的空间对称性明显失去了^[11]. 这说明格式的离散能量守恒性并不能保证该格式具有良好的长时间数值跟踪能力.

2.3 多辛和单辛格式的比较

我们应用时空分离的方法来构造非线性 Klein-Gordon 方程的一个单辛格式. 用四阶对称差分算子离散方程的空间微分算子, 从而保证得到的有限维近似方程是 Hamilton 方程, 再用一阶显辛格式离散时间方向, 得到如下格式:

$$\delta_t^2 u_n^m - \frac{-u_{n+2}^m + 16u_{n+1}^m - 30u_n^m + 16u_{n-1}^m - u_{n-2}^m}{h^2} + f(u_n^m) = 0. \quad (13)$$

该格式的截断误差为: $O(\tau^2) + O(h^4)$. 按照多辛格式的构造方法^[12], 由于其空间方向的离散不是辛离散, 所以上格式仅是单辛 7 点格式.

我们也用格式 (13) 在相同条件下模拟了 Klein-Gordon 大振幅的振荡波, 结果如下: 当振幅小于 1 时, 该格式能很好地给出正确的波形和能量、动量图. 当振幅逐渐增大时, 该格式就不能像能量守恒格式和多辛格式那样给出正确的数值解. 当振幅 $A = 30$ 时, 算到时间为 1.7 时, 波形就开始变差, 振幅开始增大, 到 $t = 2.3$ 时, 就完全溢出(blow-up), 而此时多辛格式仍保持得很好(图 5).

通过和 2.1 小节的数值实验比较可以发现, 该单辛格式不仅没有多辛格式表现好, 也没有能量守恒格式好. 如果 Salvador 他们用该单辛格式作数值比较的话, 就可以得到他们所给的结论.

3 结论和讨论

对于 Hamilton ODEs 来说, 辛格式因为保持了其

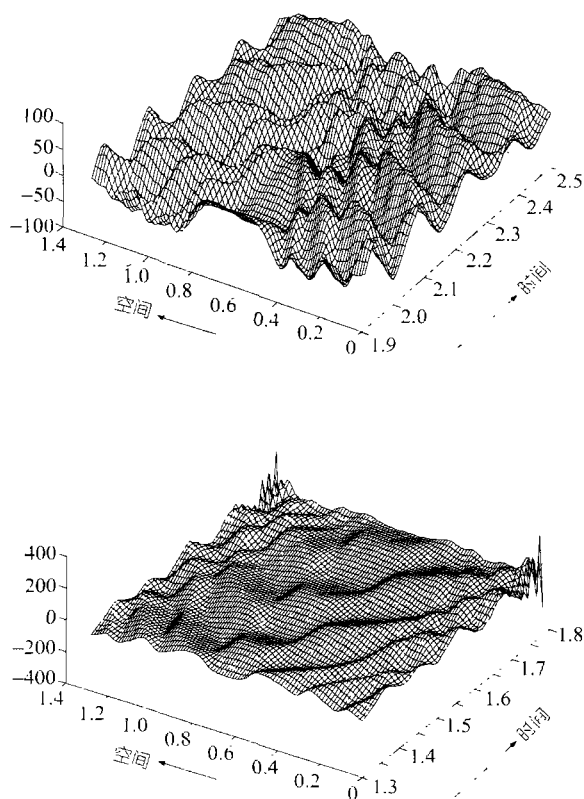


图5 Klein-Gordon 方程的大振幅数值波形
上图是多辛格式的波形图; 下图是单辛格式给出的波形图

最本质的辛性质, 从而成为最好的格式. 但从 2.3 小节的数值试验可以看出, 对于 Hamilton PDEs 来说, 辛格式的长期数值效应并不一定能保证. 其原因是辛格式在处理无限维 Hamilton 方程时, 往往要空间近似. 这就容易使得近似得到的有限维 Hamilton 方程和原来的方程发生性质上的偏差. 在本例中, 我们用四阶中心差商代替微商, 虽然保证了 Hamilton 性, 却不能保证其大振幅的波形性质得到很好的保持. 单辛格式(13)保持的只是近似以后的 Hamilton 性质, 所以如何空间离散这些偏微分方程, 使得离散以后的有限维系统尽可能多地保持原无穷维系统的性质仍需要进一步研究. 非线性波方程有多辛结构, 其经典的五点格式是多辛格式, 它是直接针对偏微分方程

提出的, 它不需要作空间截断, 其保持的性质是偏微分方程的本质性质, 因此处理偏微分方程时比单辛格式和能量守恒格式有更多的数值优势.

致谢 感谢秦孟兆、洪家林、王双虎对此论文的建议. 本工作受国家自然科学基金创新群体项目(40221503)、国家重点基础研究发展规划项目(G1999032081)、中国科学院“百人”计划和国家自然科学基金项目(批准号: 10226012, 40105012)资助.

参 考 文 献

- 1 Strauss W, Vazquez L. Numerical Solution of a Nonlinear Klein-Gordon equation. *Journal of Computational Physics*, 1978, 28: 271~278
- 2 Zhang F, Vazquez L. Two energy conserving numerical schemes for the Sine-Gordon equation. *Applied Mathematica and Computation*, 1991, 45: 17~30
- 3 Feng K, Wu H M, Qin M Z, et al. Construction of canonical difference schemes for Hamiltonian formalism via generating functions. *J Comp Math*, 1989, 7(1): 71~96
- 4 Shang Z J. KAM theorem of symplectic algorithms for Hamiltonian systems. *Numer Math*, 1999, 83: 477~496
- 5 Sanz-Serna J M, Calvo M P. *Numerical Hamiltonian System*. London: Chapman and Hall Ltd, 1994
- 6 Liu X S, Su L W, Ding P Z. Symplectic algorithm for use in computing the time-independent Schrödinger equation. *Intern J Quant Chem*, 2002, 87(1): 1~11
- 7 王斌, 曾庆存, 季仲贞. 平方守恒系统和 Hamilton 系统. *中国科学, A 辑*, 1995, 25(7): 765~770
- 8 Jimenez S, Vazquez L. Analysis of four numerical schemes for a nonlinear Klein-Gordon equation. *Applied Math and Computation*, 1990, 35: 61~94
- 9 Marsden J E, Patrick G P, Shkoller S. Multisymplectic geometry, variational integrators and nonlinear PDEs. *Comm Math Phys*, 1998, 199: 351~395
- 10 Bridges T J, Reich S. Multi-symplectic integrators: numerical schemes for Hamiltonian PDEs that conserve symplecticity. *Physics Letters A*, 2001, 284: 184~193
- 11 Wang Y S, Qin M Z. Multisymplectic geometry and multisymplectic schemes for the nonlinear Klein-Gordon equation. *Journal of the Physical Society of Japan*, 2001, 70(3): 653~661
- 12 王雨顺, 王斌, 秦孟兆. 2+1 维 sine-Gordon 方程多辛格式的复合构造. *中国科学, A 辑*, 2003, 33(3): 272~281

(2003-08-26 收稿, 2003-12-26 收修稿)