Введение в методы моделирования кинетического уравнения

Метод разделения операторов (Operator splitting)

- C. Cheng and G. Knorr, The integration of the Vlasov equation in configuration space, Comput. Phys. Comm. 22, 330–335 (1976)

Простой пример

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} = 0$$

$$\frac{dX}{dt} = V_x \qquad \frac{dY}{dt} = V_y$$

$$\frac{dV_x}{dt} = 0 \qquad \frac{dV_y}{dt} = 0$$

$$V_x(t; s, x, v_x, y, v_y) = v_x \qquad V_y(t; s, x, v_x, y, v_y) = v_y$$

$$X(t; s, x, v_x, y, v_y) = x + v_x(t - s) \qquad Y(t; s, x, v_x, y, v_y) = y + v_y(t - s)$$

$$f(x, y, v_x, v_y, t) = f_0\left(x - v_x t, y - v_y t, v_x, v_y\right)$$

Разделяем операторы/уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} = 0$$

$$f(t = 0, x; y, v_x, v_y) = f_0\left(x; y, v_x, v_y\right)$$

$$\tilde{f}\left(t, x; y, v_x, v_y\right) = f_0\left(x - v_x t; y, v_x, v_y\right)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} = 0$$

$$f(t=0, y; x, v_x, v_y) = \tilde{f}\ \left(y; x, v_x, v_y\right)$$

$$f(t, y; x, v_x, v_y) = \tilde{f}\ \left(y - v_y t; x, v_x, v_y\right) = f_0\left(x - v_x t, y - v_y t, v_x, v_y\right)$$

В общем виде

$$\frac{du}{dt} = \left(\hat{A} + \hat{B}\right) u$$

$$u(t+h) = e^{h(\hat{A}+\hat{B})} u(t)$$

$$\frac{du}{dt} = \hat{A} u \qquad \frac{du}{dt} = \hat{B} u$$

$$u(t+h) = e^{h\hat{A}} u(t) \qquad u(t+h) = e^{h\hat{B}} u(t)$$

$$\tilde{u}(t+h) = e^{h\hat{B}} \left(e^{h\hat{A}} u(t)\right)$$

Оценим точность аппроксимации

- Если $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, то $\tilde{u}(t+h)$ — точное решение
- В обратном случае это аппроксимация 1-го порядка точности по h

Доказательство

$$e^{h(\hat{A}+\hat{B})} \approx \hat{I}\ + h\left(\hat{A} + \hat{B}\right) + \frac{h^2}{2}\left(\hat{A} + \hat{B}\right)^2 + O\left(h^3\right) =$$

$$= \hat{I}\ + h\left(\hat{A} + \hat{B}\right) + \frac{h^2}{2}\left(\hat{A}^2 + \hat{B}^2 + \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}\right) + O\left(h^3\right)$$

$$e^{h\hat{B}} e^{h\hat{A}} \approx \left(\hat{I}\ + h\hat{B} + \frac{h^2}{2}\hat{B}^2 + O\left(h^3\right)\right)\left(\hat{I}\ + h\hat{A} + \frac{h^2}{2}\hat{A}^2 + O\left(h^3\right)\right) =$$

$$= \hat{I} + h\left(\hat{A} + \hat{B}\right) + \frac{h^2}{2}\left(\hat{A}^2 + \hat{B}^2 + 2\hat{B}\hat{A}\right) + O\left(h^3\right)$$

$$e^{h(\hat{A}+\hat{B})} - e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}} \approx \frac{h^2}{2}\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right) + O\left(h^3\right)$$

Метод разделения операторов Стрэнга (Strang splitting)

- G. Strang, On the construction and the comparison of difference schemes, SIAM J. Numer. Anal. 5, 506–517 (1968)

- Цель: повысить точность аппроксимации при разделении операторов

$$e^{h(\hat{A}+\hat{B})} \approx e^{h\hat{A}/2}e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}/2}$$

$$e^{h\hat{A}/2}e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}/2} \approx$$

$$\approx \left(\hat{I} + \frac{h}{2}\hat{A} + \frac{h^2}{8}\hat{A}^2 + O\left(h^3\right)\right)\left(\hat{I} + h\hat{B} + \frac{h^2}{2}\hat{B}^2 + O\left(h^3\right)\right) \times$$

$$\times \left(\hat{I} + \frac{h}{2}\hat{A} + \frac{h^2}{8}\hat{A}^2 + O\left(h^3\right)\right) =$$

$$= \hat{I} + h\left(\hat{A} + \hat{B}\right) + \frac{h^2}{2}\left(\hat{A}^2 + \hat{B}^2 + \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}\right) + O\left(h^3\right)$$

$$e^{h(\hat{A}+\hat{B})} - e^{h\hat{A}/2}e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}/2} \approx O\left(h^3\right)$$

Примечания

- Метод Стрэнга — это частный случай метода перднктор-корректора, универсального метода увеличения точности аппроксимации

- Метод Стрэнга отличается от метода первого порядка только первым и последним шагом

$$e^{h\hat{A}/2}e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}/2}\left(e^{h\hat{A}/2}e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}/2}\left(\ldots e^{h\hat{A}/2}e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}/2}\right)\right) =$$

$$= e^{h\hat{A}/2}e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}}e^{h\hat{B}}\ldots e^{h\hat{A}}e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}/2}$$

- Можно построить разделение операторов с более высокой степенью аппроксимации

- H. Yoshida, Construction of higher order symplectic integrators, Phys. Lett. A 150, 262, (1990)

- Можно разделять произвольное количество операторов. Если $\hat{A} = \hat{A}_1 + \cdots + \hat{A}_n$, то

$$e^{h\hat{A}} \approx e^{h\hat{A}_1/2} \dots e^{h\hat{A}_{n-1}/2} e^{h\hat{A}_n} e^{h\hat{A}_{n-1}/2} \dots e^{h\hat{A}_1/2} + O\left(h^3\right)$$

- Разделённые уравнения необязательно обладают теми же свойствами, что и исходное. Например, могут сохранять не все моменты функции распределения

Численные методы интегрирования одномерного уравнения переноса

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v\frac{\partial f}{\partial x} = 0$$

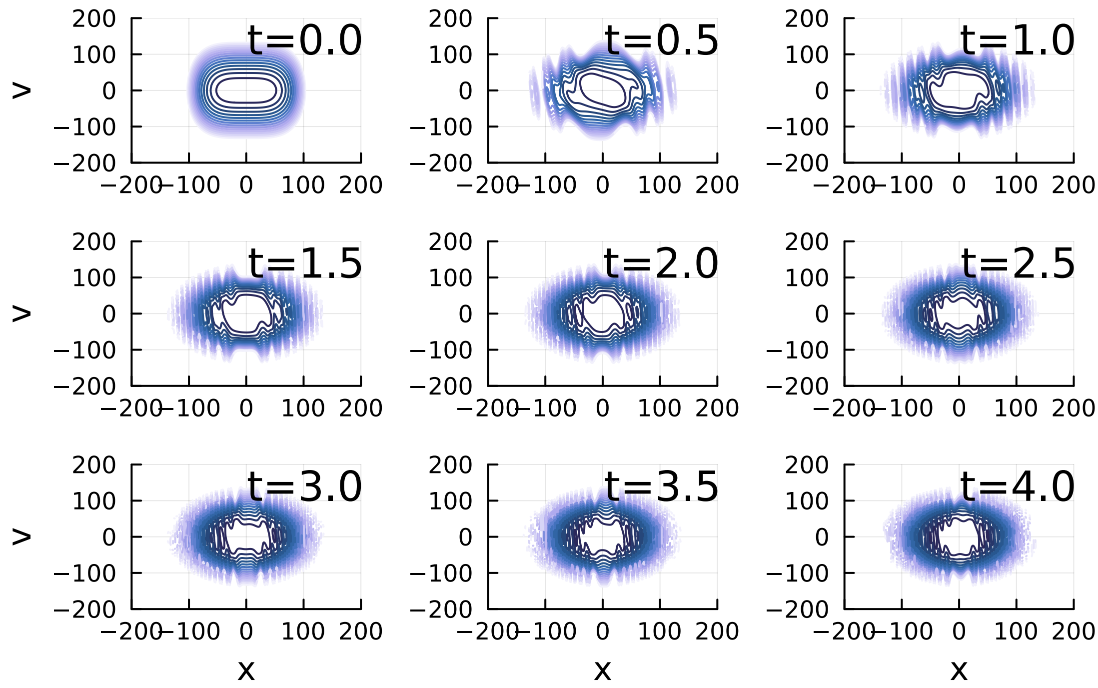
- Это гиперболическое уравнение

- Решается или задача Коши (заданы только начальные условия), или начально-краевая задача (заданы ещё и краевые условия)

- Главная сложность: высокочастотные осцилляции («изрезанность»). Их, однако, можно сглаживать.

Пример появления высокочастотных осцилляций

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v\frac{\partial f}{\partial x} - (x + \varepsilon x^3)\frac{\partial f}{\partial v} = 0$$



Классификация методов

- Конечные разности
- Спектральные (Фурье и Эрмита)
- Конечные объёмы
- Конечные элементы
- Метод характеристик (полулагранжевый)
- Лагранжевый
- Интегрирование движения частиц (метод частиц в ячейках)

Метод конечных разностей

- Функция аппроксимируется значениями в вершинах сетки

$$\{x_i\}_{i=1\ldots N}$$

$$f_i^n \equiv f(x_i, t^n)$$

- Производные аппроксимируются конечными разностями

Надо следить за:

- Точностью вычислений
- Стабильностью
- Степенью численной диффузии

Простейшие конечно-разностные аппроксимации

- Центрально взвешенная аппроксимация (предполагаем равномерную сетку с шагом a)

$$\frac{df(x_i)}{dx} \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2a} + O(a^3)$$

- Аппроксимация «вверх по течению» (*upwind*)

$$\frac{df(x_i)}{dx} \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{a} + O(a^2) \iff v > 0$$
$$\frac{df(x_i)}{dx} \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{a} + O(a^2) \iff v < 0$$

- Аппроксимация *upwind* 2-го порядка

$$\frac{df(x_i)}{dx} \approx \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2a} + O(a^3) \iff v > 0$$
$$\frac{df(x_i)}{dx} \approx \frac{-f_{i+2} + 4f_{i+1} - 3f_i}{2a} + O(a^3) \iff v < 0$$

Forward in time, centered in space (FTCS)

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{h} + v\frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2a} = 0$$

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{vh}{2a}\left(f_{i+1}^n - f_{i-1}^n\right)$$

- FTCS для гиперболических уравнений всегда неустойчив:

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{vh}{2a}\left(f_{i+1}^n - f_{i-1}^n\right)$$

$$f_i^n = \xi^n \exp(jkia)$$

$$\xi^{n+1} \exp(jkia) = \xi^n \exp(jkia) - \frac{vh}{2a}(\xi^n \exp(jk(i+1)a) - \xi^n \exp(jk(i-1)a))$$

$$\xi(k) = 1 - j\frac{vh}{a} sin(ka)$$

$$|\xi(k)| > 1$$

Метод Лакса — Фридрихса (Lax – Friedrichs)

$$\frac{f_i^{n+1} - \frac{1}{2}(f_{i+1}^n + f_{i-1}^n)}{h} + v\frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2a} = 0$$

$$f_i^{n+1} = \frac{1}{2}(f_{i+1}^n + f_{i-1}^n) - \frac{vh}{2a}(f_{i+1}^n - f_{i-1}^n)$$

- Метод устойчив, если выполняется условие Куранта $vh \leq a$

$$f_i^{n+1} = \frac{1}{2}(f_{i+1}^n + f_{i-1}^n) - \frac{vh}{2a}(f_{i+1}^n - f_{i-1}^n)$$

$$f_i^n = \xi^n \exp(jkia)$$

$$\begin{aligned}\xi^{n+1} \exp(jkia) = \frac{1}{2}(\xi^n \exp(jk(i+1)a) + \xi^n \exp(jk(i-1)a)) - \\ - \frac{vh}{2a}(\xi^n \exp(jk(i+1)a) - \xi^n \exp(jk(i-1)a))\end{aligned}$$

$$\xi = \frac{1}{2}(\exp(jka) + \exp(-jka)) - \frac{vh}{2a}(\exp(jka) - \exp(-jka))$$

$$\xi(k) = cos(ka) - j\frac{vh}{a} sin(ka)$$

$$|\xi(k)|^2 = cos^2(ka) + \left(\frac{vh}{a}\right)^2 sin^2(ka)$$

$$|\xi(k)| \leq 1 \quad \iff \quad vh \leq a$$

- Метод имеет первый порядок точности по h

- Метод «диффузионен»:

$$\frac{f_i^{n+1}-f_i^n}{h}+v\frac{f_{i+1}^n-f_{i-1}^n}{2a}=\frac{1}{2}\frac{f_{i+1}^n-2f_i^n+f_{i-1}^n}{h}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t}+v\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{a^2}{2h}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

Метод Лакса — Вендрофа (Lax — Wendroff)

- Можно рассматривать как трёхточечную схему по времени с промежуточной точкой в момент времени $t^{n+1/2}$
- Можно рассматривать как разновидность метода предиктор-корректора

- Предиктор

$$\frac{\tilde{f}_i^{n+1}-f_i^n}{h}+v\frac{f_{i+1}^n-f_i^n}{a}=0$$

$$\tilde{f}_i^{n+1}=f_i^n-\frac{vh}{a}\left(f_{i+1}^n-f_i^n\right)$$

- Корректор

$$\frac{f_i^{n+1}-f_i^{n+\frac{1}{2}}}{h/2}+v\frac{\tilde{f}_i^{n+1}-\tilde{f}_{i-1}^{n+1}}{a}=0$$

$$f_i^{n+\frac{1}{2}}=\frac{f_i^n+\tilde{f}_i^{n+1}}{2}$$

$$f_i^{n+1}=\frac{f_i^n+\tilde{f}_i^{n+1}}{2}-\frac{vh}{2a}\left(\tilde{f}_i^{n+1}-\tilde{f}_{i-1}^{n+1}\right)$$

- Итого

$$f_i^{n+1}=f_i^n-\frac{vh}{2a}\left(f_{i+1}^n-f_{i-1}^n\right)+\frac{v^2h^2}{2a^2}\left(f_{i+1}^n-2f_i^n+f_{i-1}^n\right)$$

- Метод устойчив, если выполняется условие Куранта $vh \leq a$

- Метод 2-го порядка точности и по h, и по a

- Метод обладает уменьшенной численной диффузией:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{v^2 h}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

- Метод, однако, нарушает принцип максимума:

$$f_i^{n+1} - f_i^n = -\frac{vh}{2a}\left(f_{i+1}^n - f_{i-1}^n\right) + \frac{v^2 h^2}{2a^2}\left(f_{i+1}^n - 2f_i^n + f_{i-1}^n\right)$$

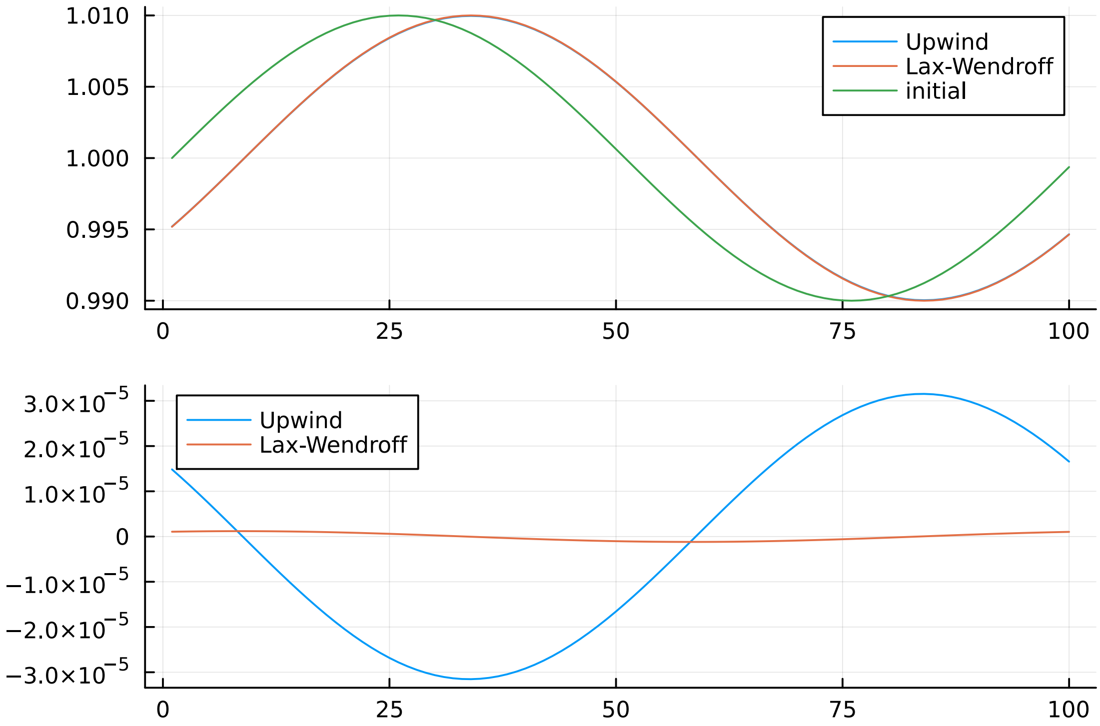
- если $f_{i-1}^n = f_i^n = f_{\max}^n$, то $f_i^{n+1} - f_i^n = C(1-C)(f_{\max}^n - f_{i+1}^n)$ и при выполнении условия Куранта $C < 1$: $f_i^{n+1} > f_{\max}^n$

Метод Upwind

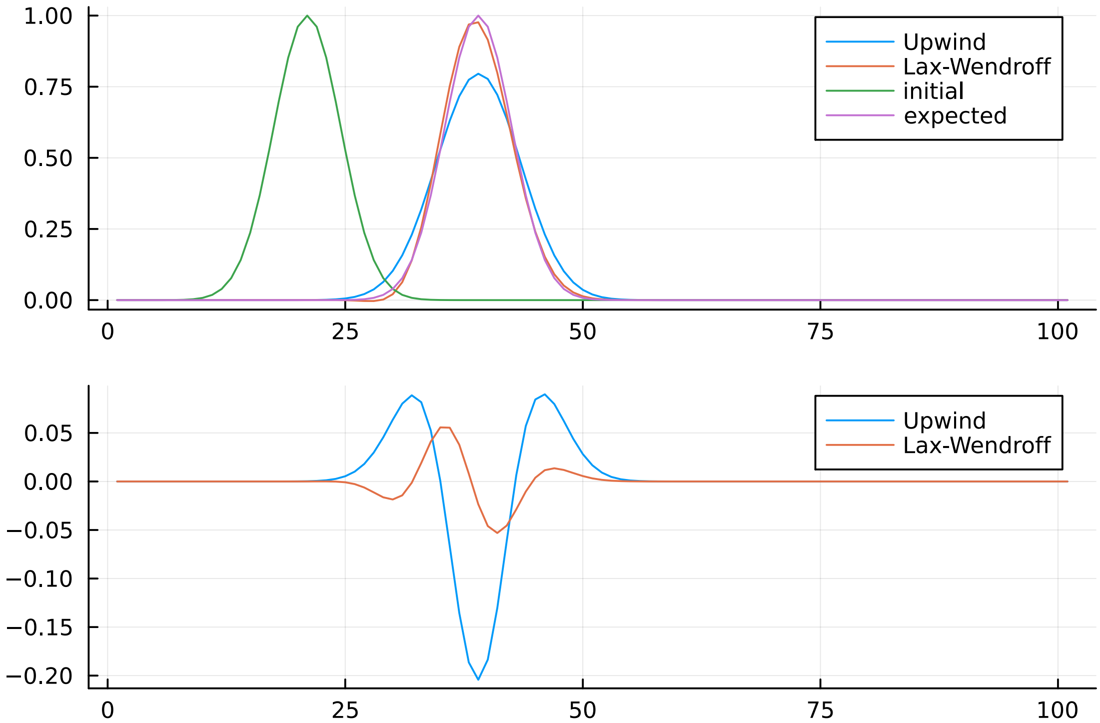
$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{h} = \begin{cases} -v\dfrac{f_i^n - f_{i-1}^n}{a} & \iff v > 0 \\ -v\dfrac{f_{i+1}^n - f_i^n}{a} & \iff v < 0 \end{cases}$$

- Имеет первый порядок точности по h и a
- Можно повысить порядок точности за счёт метода предиктор-корректора и upwind-производных 2-го порядка
- Метод не нарушает принцип максимума

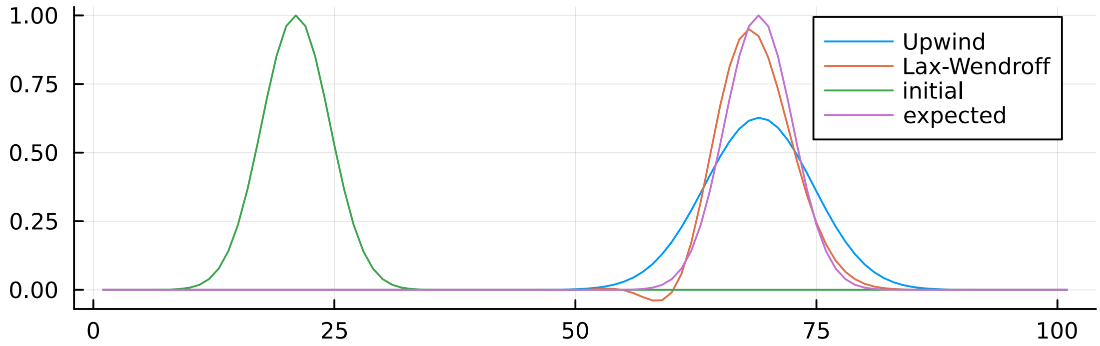
Примеры

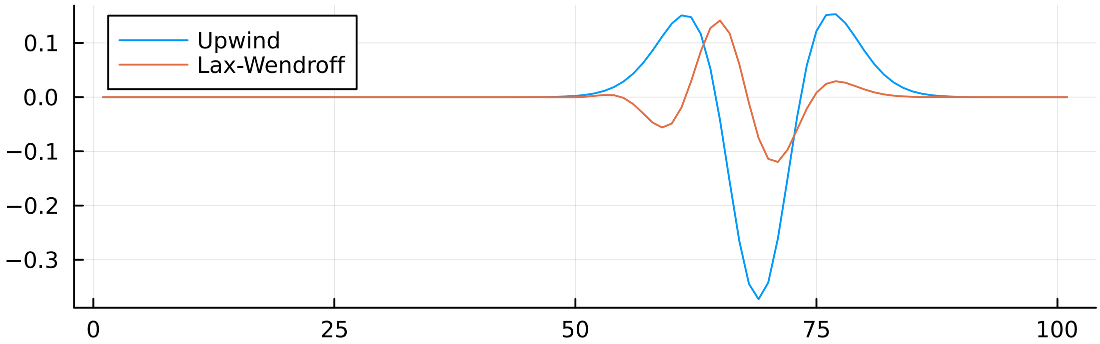


1.010
1.005
1.000
0.995
0.990
0
25
50
75
100
Upwind
Lax-Wendroff
initial
3.0×10^{-5}
2.0×10^{-5}
1.0×10^{-5}
0
-1.0×10^{-5}
-2.0×10^{-5}
-3.0×10^{-5}
0
25
50
75
100
Upwind
Lax-Wendroff



1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
0
25
50
75
100
Upwind
Lax-Wendroff
initial
expected
0.05
0.00
−0.05
−0.10
−0.15
−0.20
0
25
50
75
100
Upwind
Lax-Wendroff





Литература

Метод разделения операторов

- Eric Sonnendrücker. *Numerical methods for the Vlasov equations*. Lecture notes. 2013.
- G. Dimarco, L. Pareschi. Numerical methods for kinetic equations. Acta Numerica, Cambridge University Press (CUP), 2014, pp. 369-520.

Методы конечных разностей

- W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. 2007
- R. J. LeVeque. *Finite Difference Methods for Differential Equations*. 2005

Дома

- Доказать

$$\frac{df(x_i)}{dx} \approx \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2a} + O(a^3)$$

- Доказать, что метод Лакса — Вендрофа устойчив при выполнении условия Куранта