

# Универсальные методы интегрирования одномерного уравнения переноса

Это методы, которые применимы к уравнениям в частных производных произвольного типа:

- Конечные разности
- Спектральные (Фурье и Эрмита)
- Конечные элементы

Метод конечных разностей рассмотрели на предыдущей лекции.

## Спектральные методы

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

- $v$  не зависит явно от  $f$  — можно рассматривать уравнение как линейное
- Идея: разложить по ортогональному набору функций (в спектр), тогда дифференциальное уравнение в частных производных заменится обыкновенным дифференциальным уравнением для образов
- Можно обобщить и на нелинейный случай

## Некоторые определения

- Базисные (пробные) функции:

$$(\phi_0, \dots, \phi_N)$$

$$f(x, t) \approx f^N(x, t) = \sum_{k=0}^N g_k \phi_k$$

- Ортонормированность

$$\int \phi_m(x) \phi_n(x) w(x) dx = \delta_{mn}$$

- $w(x)$  — вес (часто равен единице)

- Невязка

$$R_N = \frac{\partial f^N}{\partial t} + v(x, t) \frac{\partial f^N}{\partial x}$$

- Тестовые функции

$$(\psi_0, \dots, \psi_N)$$

$$\int \psi_n(x) R_N(x) dx = 0, \quad n \in 0 \dots N$$

## Метод Галёркина

- Тестовые совпадают с базисными:  $\psi_n(x) \equiv \phi_n(x)$
- Другими словами: **невязка ортогональна базисным функциям**

$$\int R_N(x) \phi_n(x) dx = 0, \quad n \in 0 \dots N$$

## Псевдоспектральный метод (метод коллокаций)

- $\psi_n(x) = \delta(x - x_n)$ , где  $x_n$  — N специальным образом подобранных точек (точки коллокации)
- Другими словами: **невязка равна нулю в N точках**:

$$\int R_N(x) \psi_n(x) dx = \int R_N(x) \delta(x - x_n) dx = R_N(x_n)$$

$$R_N(x_n) = 0, \quad n \in 0 \dots N$$

## Преобразование Фурье

### Метод Галёркина

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \exp\left(in \frac{2\pi x}{L}\right), \quad -N \leq n \leq N, \quad 0 \leq x \leq L$$

$$f^N(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sum_{k=-N}^N g_k(t) \exp\left(ik \frac{2\pi x}{L}\right)$$

$$\int R_N(x)\phi_n(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \int \left( \frac{\partial f^N}{\partial t} + v(x, t) \frac{\partial f^N}{\partial x} \right) \exp\left(-in\frac{2\pi x}{L}\right) dx = 0$$

$$n \in -N \dots N$$

$$\frac{\partial f^N}{\partial t} \Rightarrow \dot{g}_k(t)$$

$$\frac{\partial f^N}{\partial x} \Rightarrow ik\frac{2\pi}{L}g_k(t)$$

$$v(x, t) \Rightarrow u_k(t)$$

$$v(x)\frac{\partial f^N}{\partial x} \Rightarrow u * g \equiv \sum_{k=-N}^N u_{n-k} ik\frac{2\pi}{L}g_k(t)$$

$$\dot{g}_n(t) + i \sum_{k=-N}^N u_{n-k} k\frac{2\pi}{L}g_k(t) = 0, \quad n \in -N \dots N$$

- Получаем ОДУ — решаем численно (например, методом Рунге — Кутты)
- Предполагаются периодические граничные условия (но возможно усложнение на другие случаи)
- Фурье-образы  $v(x, t)$  и/или  $f(x, t = 0)$  можно определять численно
- Метод Галёркина сложно обобщить на случай нелинейных уравнений
- Сложность вычисления свёртки —  $N^2$

### Псевдоспектральный метод Фурье

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \exp\left(in\frac{2\pi x}{L}\right), \quad -N \leq n \leq N, \quad 0 \leq x \leq L$$

$$f^N(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sum_{k=-N}^N g_k(t) \exp\left(ik\frac{2\pi x}{L}\right)$$

$$R_N(x_n) = 0, \quad x_n = n \frac{L}{N}, \quad n = 0 \dots N$$

$$f_n = f^N \left( x_n \equiv n \frac{L}{N} \right)$$

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sum_{k=-N}^N g_k \exp\left(ik \frac{2\pi n}{N}\right)$$

$$\frac{\partial f_n}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sum_{k=-N}^N \left( ik \frac{2\pi}{L} \right) g_k \exp\left(ik \frac{2\pi n}{N}\right)$$

$$v_n = v \left( x_n \equiv n \frac{L}{N} \right)$$

$$R_N(x_n) = \frac{\partial f_n}{\partial t} + v_n \frac{\partial f_n}{\partial x} = 0, \quad n = 0 \dots N$$

$$f_n^{m+1} = f_n^m - \frac{h v_n}{\sqrt{2\pi L}} \sum_{k=-N}^N \left( ik \frac{2\pi}{L} \right) g_k \exp\left(ik \frac{2\pi n}{N}\right), \quad n = 0 \dots N$$

- Вместо вычисления свёртки со сложностью  $N^2$  — численное взятие Фурье-образа со сложностью  $N \ln N$  (методом быстрого преобразования Фурье)
- Псевдоспектральный метод легко обобщить на нелинейный случай
- Для уравнений с постоянными коэффициентами при определённом (оптимальном) выборе точек коллокации псевдоспектральный метод идентичен методу Галёркина, в остальных случаях он даёт ту же точность

## Преобразование Эрмита

- Распределение по скоростям непериодично: применение Фурье-преобразования «нефизично» (не сохраняет импульс)
- Фурье-преобразование требует ограниченности: теряются «хвосты», не сохраняется количество частиц

- Но есть хорошая альтернатива: преобразование Эрмита:

$$\hat{H}\{f(x)\}(n) \equiv \int f(x)H_n(x)e^{-x^2}dx$$

- $H_n(x)$  — многочлены Эрмита (собственные функции квантового гармонического осциллятора)
- Нормированная и масштабированная базисная функция для преобразования Эрмита:

$$\phi_n(x) \equiv \tilde{H}_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2}, \alpha > 0$$

### Свойства базисной функции преобразования Эрмита

$$\alpha x \tilde{H}_n(x) = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \tilde{H}_{n+1}(x) + \sqrt{\frac{n}{2}} \tilde{H}_{n-1}(x)$$

$$\frac{d}{dx} \tilde{H}_n(x) = -\alpha \sqrt{2(n+1)} \tilde{H}_{n+1}(x)$$

$$x \frac{d}{dx} \tilde{H}_n(x) = -\sqrt{(n+1)(n+2)} \tilde{H}_{n+2}(x) - (n+1) \tilde{H}_n(x)$$

$$\int \tilde{H}_m(x) \tilde{H}_n(x) w(x) dx = \delta_{mn}$$

$$\int \frac{d}{dx} \tilde{H}_m(x) \frac{d}{dx} \tilde{H}_n(x) w(x) dx = 2\alpha(n+1) \delta_{mn}$$

$$w(x) \equiv \exp(\alpha^2 x^2)$$

### Свойства преобразования Эрмита

$$f(x, t) = \sum_{n=0}^N g_n(t) \tilde{H}_n(x)$$

$$g_n(t) = \int f(x, t) \tilde{H}_n(x) w(x) dx$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) = \sum_{n=0}^N \dot{g}_n(t) \tilde{H}_n(x)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x, t) = -\alpha \sum_{n=1}^N g_{n-1}(t) \sqrt{2n} \tilde{H}_n(x)$$

## Метод Галёркина

$$\dot{g}_0 = 0$$

⋮

$$\dot{g}_n = \alpha \sqrt{2n} v g_{n-1}$$

⋮

$$\dot{g}_N = \alpha \sqrt{2N} v g_{N-1}$$

- Но работает только если  $v$  можно считать постоянной в пространстве. При наличии магнитного поля это, как правило, не так

## Псевдоспектральный метод

Точки выбираем в соответствии с квадратурной формулой Гаусса — Эрмита:

$$\{\xi_k\}, k = 0 \dots N, H_{N+1}(\xi_k) = 0$$

Это удобно, поскольку следующее равенство выполняется **точно** для всех многочленов степенью  $2N - 1$  и меньше (и является хорошим приближением в остальных случаях):

$$\int f(x) e^{-\alpha^2 x^2} dx = \sum_{k=0}^N w_k f\left(\frac{\xi_k}{\alpha}\right)$$

где  $w_k$  — весовые коэффициенты, определяемые по следующей формуле:

$$w_k \equiv \frac{1}{\alpha} \int L_k(x) e^{-x^2} dx$$

Здесь  $L_k(x)$  — так называемый многочлен Лагранжа — многочлен  $N + 1$  степени такой, что  $L_k(\xi_m) = \delta_{km}$ .

$w_k$  можно вычислить по формуле:

$$w_k = \frac{1}{\sum_{m=0}^N \left[ \sqrt{\frac{\alpha}{2^m m! \sqrt{\pi}}} H_m(\xi_k) \right]^2}$$

$$\bar{H}_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2}, \alpha > 0$$

$$f(x,t) = \sum_{k=0}^N g_k(t) \bar{H}_n(x)$$

$$g_k(t) = \sum_{j=0}^N f\left(\frac{\xi_j}{\alpha}, t\right) \bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \frac{1}{C_j}$$

$$C_j = \sum_{k=0}^N \left[ \bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \right]^2$$

$$\frac{\partial}{\partial x} f\left(\frac{\xi_j}{\alpha}, t\right) = \sum_{k=0}^N g_k(t) \bar{H}'_n(x)$$

$$f_j \equiv f\left(\frac{\xi_j}{\alpha}, t\right)$$

$$F = \{f_j\}$$

$$\dot{F} = -vDF$$

$$D = \{d_{ij}\}$$

$$\begin{aligned} d_{ij} = & \frac{\alpha}{C_j} \sum_{k=1}^{N-1} \bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \left[ \sqrt{\frac{k}{2}} \bar{H}_{k-1}\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right) - \sqrt{\frac{k+1}{2}} \bar{H}_{k+1}\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right) \right] - \\ & - \sqrt{\frac{1}{2}} \bar{H}_0\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \bar{H}_1\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) + \sqrt{\frac{N}{2}} \bar{H}_N\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \bar{H}_{N-1}\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \end{aligned}$$

## Примечания

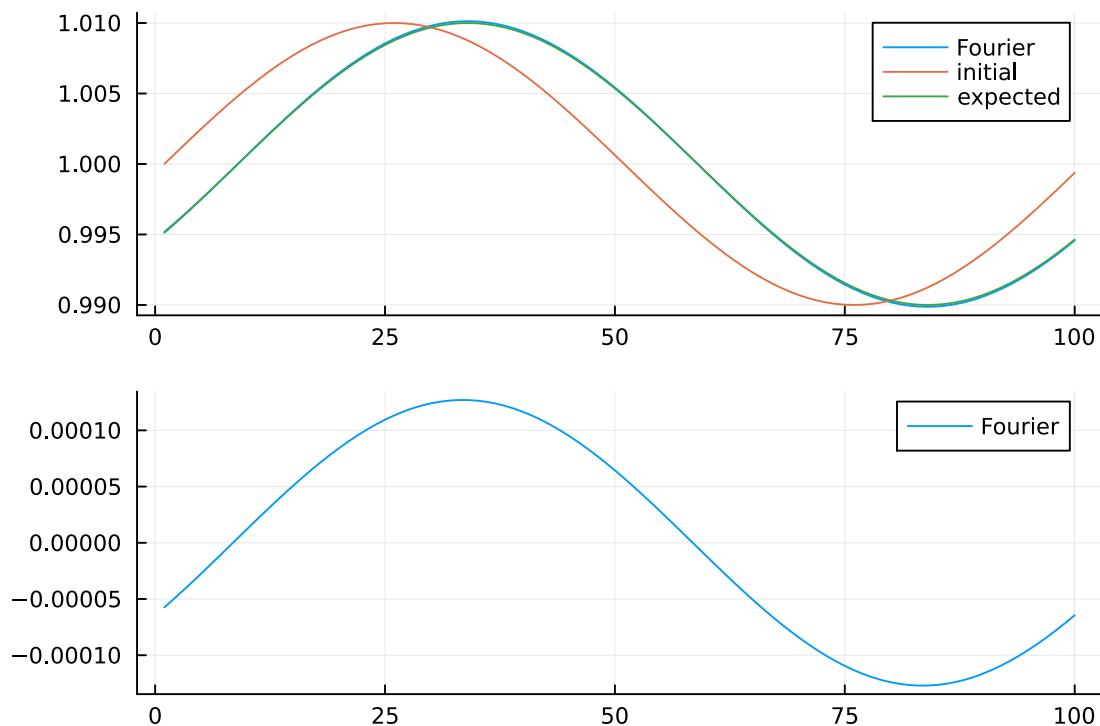
- Эрмитово разложение хорошо работает для кинетики, близкой к равновесной
- Возможно проведение перемасштабирования
- Псевдоспектральный метод допускает обобщения на нелинейный случай

- Спектральные методы требуют специального подхода при параллельном выполнении
- Спектральные методы могут сохранять число частиц и импульс, но обычно не сохраняют энергию и не обеспечивают выполнение принципа максимума

## Примеры

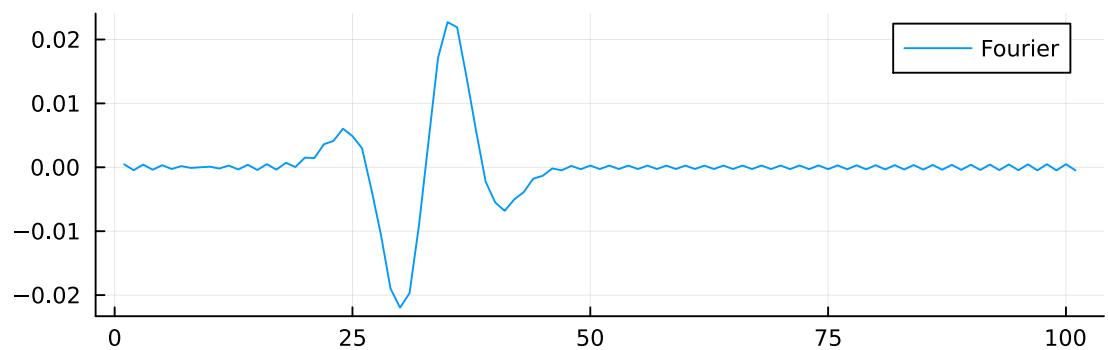
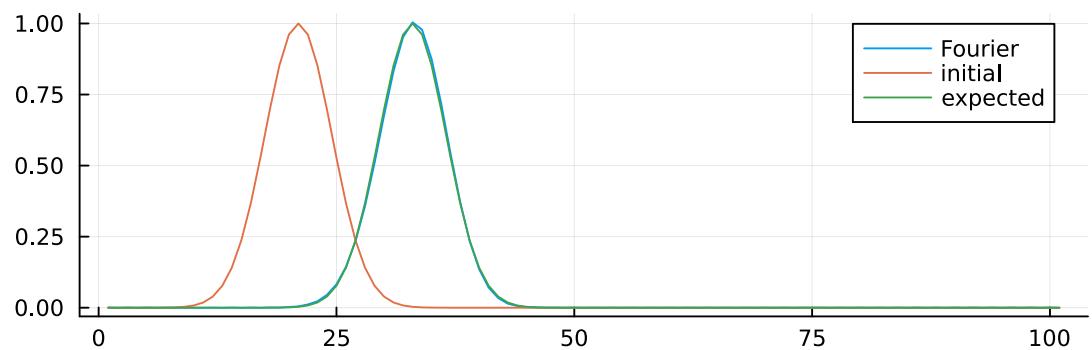
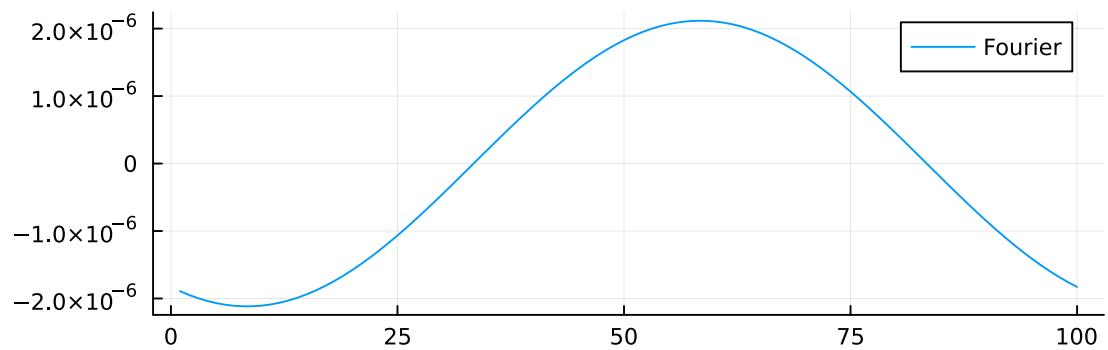
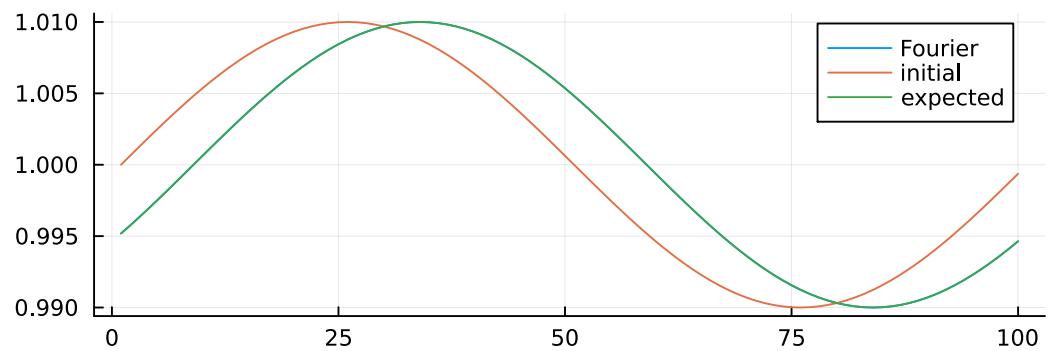
$$F\{f\} = \mathfrak{F}^{-1}[ikv\mathfrak{F}(f)]$$

$$f_n^{m+1} = f_n^m - hF_n\{f^m\}$$

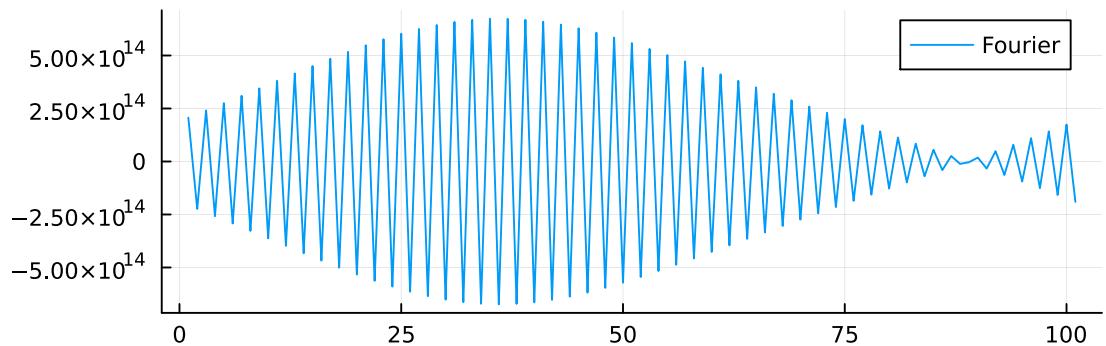
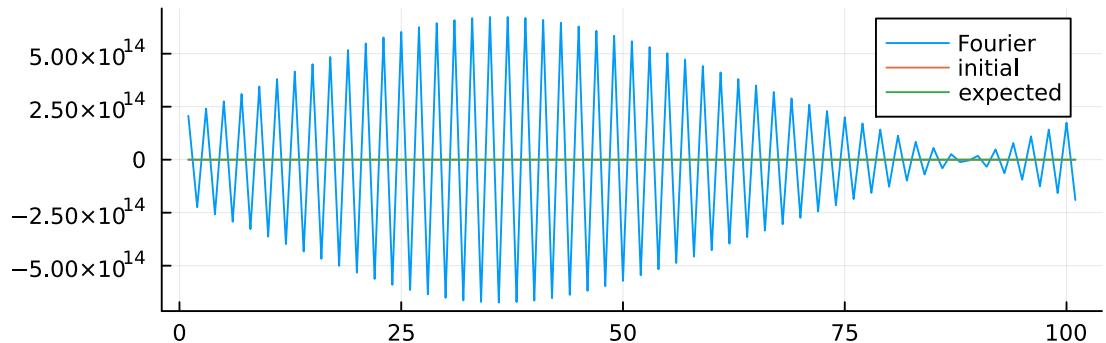


$$f_n^{m+1/2} = f_n^m - \frac{h}{2}F_n\{f^m\}$$

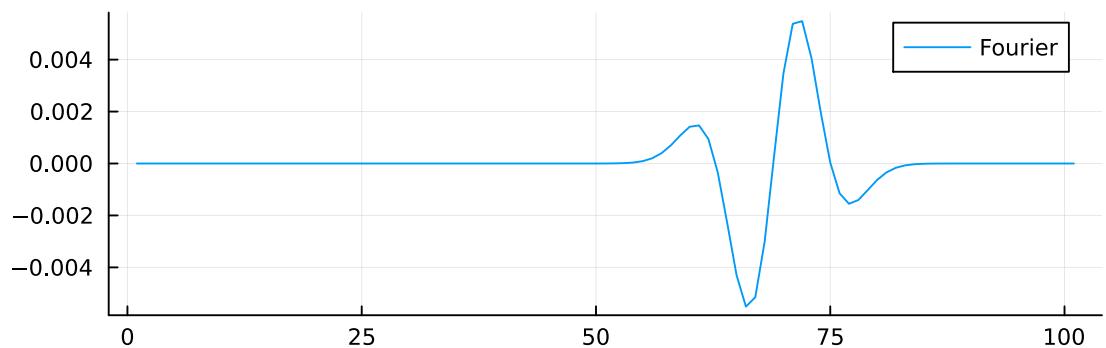
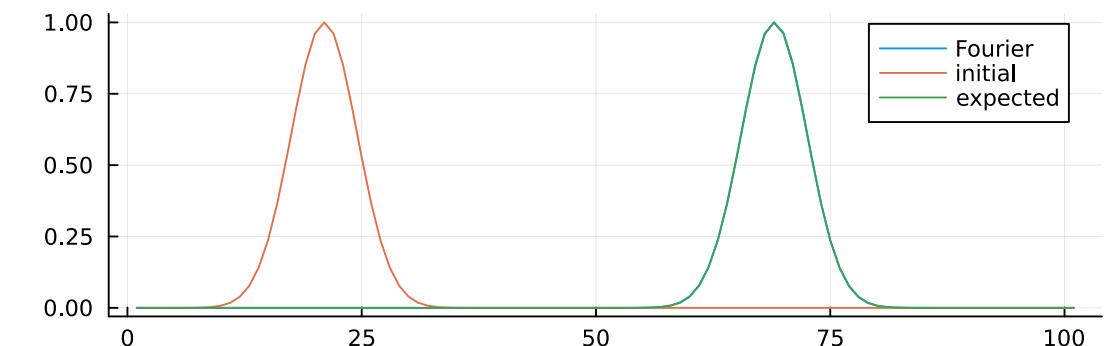
$$f_n^{m+1} = f_n^m - hF_n\{f^{m+1/2}\}$$



Увеличим время расчёта



Уменьшим временной шаг в 4 раза



Можно также вводить фильтрацию высоких частот, но чаще используют более сложные (неявные) схемы для интегрирования по времени

## Метод конечных элементов

- Для области моделирования вводится произвольная сетка (обычно используется триангуляция)
- Можно моделировать течения в сложных границах
- Можно увеличивать разрешение сетки в нужных областях
- Можно менять разрешение сетки (адаптировать) в ходе вычислений
- Формально близок к спектральным, но используется разложение по локальным функциям, в простейшем случае кусочно-линейным:

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{k-1}}{x_k-x_{k-1}} & x \in [x_{k-1}, x_k] \\ \frac{x_{k+1}-x}{x_{k+1}-x_k} & x \in [x_k, x_{k+1}] \\ 0 & x \notin [x_{k-1}, x_{k+1}] \end{cases}$$

- Конечными элементами называют как элементы сетки, так и базисные функции

## Слабая форма уравнения

- Запишем уравнение в дивергентной форме:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(vf)}{\partial x} = 0$$

- Это сильная (исходная) форма уравнения. Домножим на произвольную функцию  $u(x)$ , равную нулю на границе и проинтегрируем:

$$\int_{\Omega} u(x) \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} dx + \int_{\Omega} u(x) \frac{\partial(v(x)f(x))}{\partial x} dx = 0$$

$$\int_{\Omega} u(x) \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} dx - \int_{\partial\Omega} u(x)v(x)f(x)dx + \int_{\Omega} \frac{du(x)}{dx}v(x)f(x)dx = 0$$

$$\int_{\Omega} \left( u(x) \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} + \frac{du(x)}{dx}v(x)f(x) \right) dx = 0$$

- Это слабая форма уравнения. Оно содержит все решения сильной формы, а также множество негладких решений.

## Свойства базисных функций

$$\int \phi_n(x) \phi_k(x) dx = \begin{cases} \frac{1}{3}(x_{k+1} - x_{k-1}) & n - k = 0 \\ \frac{1}{6}|x_n - x_k| & |n - k| = 1 \\ 0 & |n - k| > 1 \end{cases}$$

$$\int \phi'_n(x) \phi_k(x) dx = \begin{cases} 1 & n - k = 0 \\ \frac{1}{2}\text{sign}[n - k] & |n - k| = 1 \\ 0 & |n - k| > 1 \end{cases}$$

## Дискретизация

$$f(x, t) = \sum g_k(t) \phi_k(x)$$

$$v(x) f(x, t) = \sum u_k(t) \phi_k(x)$$

$$\int_{\Omega} \left( \phi_n(x) \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} + \frac{d\phi_n(x)}{dx} v(x) f(x, t) \right) dx = 0$$

$$\sum \dot{g}_k \int \phi_n \phi_k dx + \sum u_k \int \phi'_n \phi_k dx = 0$$

$$\hat{A}\dot{g} = \hat{B}u$$

## Примечания

- Фактически, используется метод Галёркина
- Можно использовать базисные функции, не равные нулю на границе элемента, (разрывный метод Галёркина) — требуется вычисление потоков на границе элементов
- Базисные функции можно представлять как непересекающиеся суперпозиции нескольких многочленов (например, Лежандра)
- Точность можно увеличивать как уменьшением размера элемента, так и увеличением степени многочлена
- Метод конечных элементов удобен для построения универсальных решателей и поэтому широко распространён в коммерческих продуктах. Пример проекта с

открытым кодом: FEniCS (<https://fenicsproject.org>). Недостаток: специализированный решатель можно сильнее оптимизировать

## Литература

### Спектральные методы

- S. Gottlieb, D. Gottlieb. Spectral methods // Scholarpedia. doi:10.4249/scholarpedia.7504
- J. P. Boyd. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. 2000
- S. Le Bourdieu, F. de Vuyst, L. Jacquet. *Numerical solution of the Vlasov–Poisson system using generalized Hermite functions* // Computer Physics Communication, 175, 528—544 (2006)

### Метод конечных элементов

- J. Tinsley Oden. *Finite element method* // Scholarpedia. doi:10.4249/scholarpedia.9836

## Дома

- Доказать основные свойства функций Эрмита
- Реализовать методы Лакса — Вендроффа и Upwind
- Сравнить их работу для одномерного уравнения переноса с постоянной скоростью