

```
Using matplotlib backend: Qt5Agg
Populating the interactive namespace from numpy and matplotlib
```

Метод конечных объёмов

- Универсальный метод для решения уравнений в дивергентной форме (в форме закона сохранения)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\vec{r}, \vec{p}} (\mathbf{A} f) = 0$$

$$\mathbf{A} = \left\{ \vec{v}, q\vec{E} + \frac{q}{c} [\vec{v} \times \vec{B}] \right\}$$

- Поток:

$$\Phi(t, \vec{r}, \vec{p}, f) \equiv \mathbf{A} f$$

Дискретизация

- Пусть задана сетка:

$$\{x_i\}_{i=0\dots N}$$

- Каждая точка сетки окружается **контрольными (конечными) объёмами**

$$(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$$

$$x_{i+\frac{1}{2}} \equiv \frac{x_{i+1} + x_i}{2}$$

$$x_{i-\frac{1}{2}} \equiv \frac{x_i + x_{i-1}}{2}$$

- Функция аппроксимируется средними по этим объёмам

$$f_i^n \equiv \frac{1}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(x, t^n) dx$$

Базовая идея метода

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

- Интегрируем по каждому контрольному объёму:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(x, t) dx + \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial \Phi(f, x, t)}{\partial x} dx = 0$$

- И пользуемся теоремой Остроградского — Гаусса:

$$\left(x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}} \right) \frac{d}{dt} f_i + \Phi_{i+\frac{1}{2}}(t) - \Phi_{i-\frac{1}{2}}(t) = 0$$

Схема Годунова

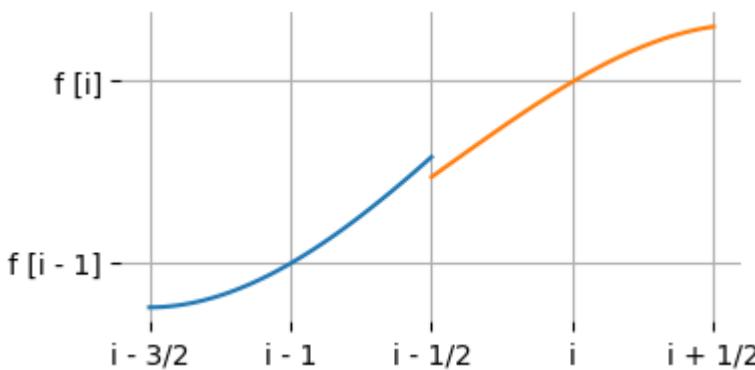
- Интегрируем по времени

$$f_i^{n+1} - f_i^n = -\frac{1}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[\Phi_{i+\frac{1}{2}}(t) - \Phi_{i-\frac{1}{2}}(t) \right] dt$$

- Используем решение (точное или численное) так называемой **задачи Римана**

Задача Римана

- Задача Римана — задача об эволюции разрыва



$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \Phi_{i-\frac{1}{2}}(t) dt = \Delta t \Phi_{\text{Riemann}}(f_{i-1}^n, f_i^n, x_{i-1}, x_i, t^n)$$

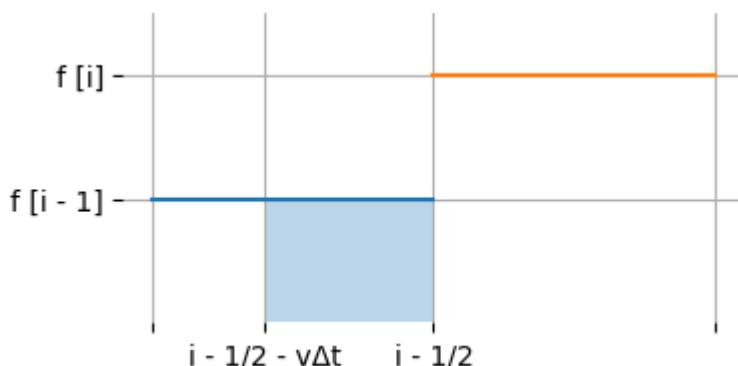
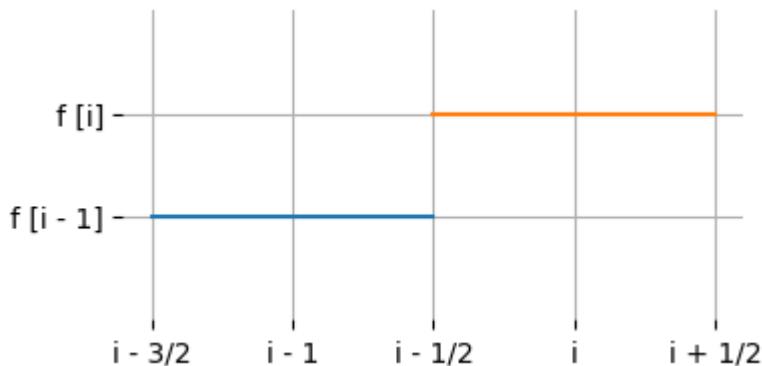
- Свойства решения задачи Римана:

$$\Phi_{\text{Riemann}}(f_{i-1}^n, f_i^n) = \Phi(f_{i-1}^n) \iff f_{i-1}^n = f_i^n$$

$$\frac{\partial \Phi_{\text{Riemann}}}{\partial f_{i-1}^n} \geq 0$$

$$\frac{\partial \Phi_{\text{Riemann}}}{\partial f_i^n} \leq 0$$

- В простейшем случае (кусочно-константная аппроксимация):



$$\Phi_{\text{Riemann}}(f_{i-1}^n, f_i^n, x_{i-1}, x_i, t^n) =$$

$$\begin{cases} \Phi(f_{i-1}^n, x_{i-1}, t^n) = v f_{i-1} & \iff \frac{\partial \Phi}{\partial f} = v > 0 \\ \Phi(f_i^n, x_i, t^n) = v f_i & \iff \frac{\partial \Phi}{\partial f} = v < 0 \end{cases}$$

Примечания

Достоинства

- Точно выполняется закон сохранения числа частиц

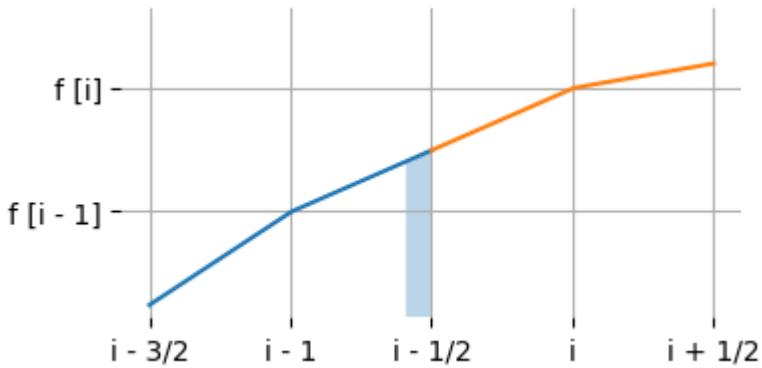
- Выполняется принцип максимума
- Вся «физика» — в задаче Римана

Недостатки

- Схема первого порядка точности
- Схема чрезмерно диффузна (резкие границы размываются со временем)
- Требует наложения условия Куранта: $\Delta t \leq \Delta x / v$

Увеличение точности схемы

- Вместо кусочно-константной можно использовать аппроксимацию более высокого порядка, например, кусочно-линейную центрально-взвешенную схему



$$\Phi_{\text{Riemann}}(f_{i-1}, f_i) \approx \Phi \left(\frac{f_i + f_{i-1}}{2} \right) = v \frac{f_i + f_{i-1}}{2}$$

- Проблема: Все схемы Годунова более высокого порядка, чем первый, не обеспечивают сохранение **монотонности**

Сохранение монотонности

- Схема сохраняет монотонность, если для любой возрастающей (убывающей) $\{f_i^n\} \implies \{f_i^{n+1}\}$ так же возрастает (убывает).
- Можно показать [Harten, J. Comput. Phys., 49, 357 (1983)], что схема сохраняет монотонность тогда и только тогда, когда она обеспечивает **убывание полной**

вариации (Total variation diminishing, TVD)

- Полной вариацией называется величина

$$\text{TV} = \int \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| dx$$

- Или в дискретном случае

$$\text{TV} = \sum |f_i - f_{i-1}|$$

- Схема обеспечивает убывание полной вариации, если

$$\text{TV}(f^{n+1}) \leq \text{TV}(f^n)$$

- Для обеспечения TVD вводят **ограничители потока** (или наклона)

Ограничители потока

- Идея: использовать схему высокого порядка там, где функция гладкая, и схему первого порядка там, где функция терпит скачки

$$\Phi_{\text{Riemann}}(f_{i-1}, f_i) = \Phi \left(\tilde{f}_{i-\frac{1}{2}} \right)$$

$$\tilde{f}_{i-\frac{1}{2}} = \begin{cases} f_{i-1} + \phi(r_{i-1}) \frac{f_i - f_{i-1}}{2} & \iff \frac{\partial \Phi}{\partial f} > 0 \\ f_i - \phi(r_i) \frac{f_i - f_{i-1}}{2} & \iff \frac{\partial \Phi}{\partial f} < 0 \end{cases}$$

$$r_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{f_{i+1} - f_i}$$

$$\phi(r_i = 0) = 0$$

$$\phi(r_i = 1) = 1$$

Ограничители потока, обеспечивающие TVD

- Чтобы ограничитель потока обеспечивал убывание полной вариации, он должен удовлетворять следующим условиям:
- $r \leq \phi(r) \leq 2r \iff 0 \leq r \leq 1$
- $1 \leq \phi(r) \leq r \iff 1 \leq r \leq 2$
- $1 \leq \phi(r) \leq 2 \iff r \geq 2$

- Симметричный ограничитель:

$$\frac{\phi(r)}{r} = \phi\left(\frac{1}{r}\right)$$

Примеры

- ван Leer [Van Leer, J. Comput. Phys., 14 (4), 361 (1974)]

$$\phi(r) = \frac{r + |r|}{1 + |r|}$$

- монотонизированная центрально-взвешенная схема [Van Leer, J. Comput. Phys., 23 (3), 263 (1977)]

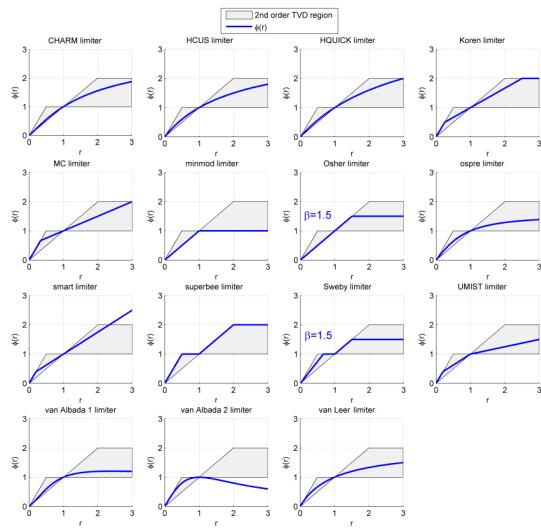
$$\phi(r) = \max\left(0, \min\left(2r, \frac{1+r}{2}, 2\right)\right)$$

- minmod [Roe, Annu. Rev. Fluid Mech., 18, 337 (1986)]

$$\phi(r) = \max(0, \min(1, r))$$

Другие ограничители потока

- См. https://en.wikipedia.org/wiki/Flux_limiter



Примечания

- Ограничители потока дополнительно могут обеспечивать выполнение принципа максимума

- Можно обобщить на аппроксимации более высокого порядка
- Универсального ограничителя не существует

Полулагранжевый метод

- Semi-Lagrangian (SL)
- Специфичен для гиперболических уравнений первого порядка
- Задействует метод характеристик (другими словами, лагранжево представление)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = 0$$

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{A}(\mathbf{X}, t)$$

$$\mathbf{X}(t = s) = \mathbf{x}$$

$$\vec{X} = \vec{X}(t; \vec{x}, s)$$

$$\frac{d}{dt} f(\mathbf{X}(t), t) = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\mathbf{X}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} f \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{X}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{X}} f = 0$$

$$f(\mathbf{X}(t; \mathbf{x}, s), t) = f(\mathbf{X}(s; \mathbf{x}, s), s) = f(\mathbf{x}, s)$$

Классическая реализация

- Cheng, Knorr, J. Comput. Phys. 22, 330 (1976)

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

- Вводим сетку

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

- Находим, в какой точке X_i стартовала характеристика, пересекающая точку x_i в момент времени t^{n+1}

$$\frac{dX}{dt} = v(X, t)$$

$$X_i = X_i(t^n; x_i, t^{n+1})$$

- Используем любую удобную интерполяцию, чтобы определить значение функции в точке X_i в момент времени t^n , и пользуемся равенством

$$f_i^{n+1} \equiv f(x_i, t^{n+1}) = f(X_i(t^n; x_i, t^{n+1}), t^n) \equiv f(X_i, t^n)$$

Интерполяция

- Линейная интерполяция — чрезмерно диффузна
- Классический и самый распространённый вариант: **кубические В-сплайны**
- Кубический В-сплайн — это кусочно-заданная функция, составленная из полиномов третьей степени, всюду непрерывная вместе с первой и второй производными

$$f_{\text{CBS}} = \sum_{i=0}^N a_i S^3(x - x_i)$$

$$S^3(x) = \frac{1}{6} \begin{cases} 4 - 6\left(\frac{|x|}{\Delta x}\right)^2 + 3\left(\frac{|x|}{\Delta x}\right)^3 & \iff 0 \leq |x| \leq \Delta x \\ \left(2 - \frac{|x|}{\Delta x}\right)^3 & \iff \Delta x \leq |x| \leq 2\Delta x \\ 0 & \iff |x| \geq 2\Delta x \end{cases}$$

- Коэффициенты a_i находятся из условия

$$f(x_j) = f_{\text{CBS}}(x_j) = \sum_{i=0}^N a_i S^3(x_j - x_i)$$

- Это система линейных алгебраических уравнений $(N+1)$ -го порядка

Примечания

Достоинства

- Легко обобщается на многомерный случай [Sonnenendrucker et al., J. Comp. Phys. 149, 201 (1999)]
- Для второго порядка точности по времени требуется или предиктор-корректор, или сохранение значений f_i^{n-1} (там же)
- Условие Куранта заменяется на обычно более слабое $|(\partial v / \partial x) \Delta t| < 1$ (если v не зависит явно от x — шаг по времени может быть произвольным (!))
- Метод сохраняет число частиц и импульс

Недостатки

- Не гарантирует сохранение принципа максимума (зависит от интерполяции)
- Построение сплайна вычислительно затратно (нелокальная операция)

Консервативный полулагранжевый метод

- Positivity Flux Conservative (PFC) [Filbet et al., J. Comp. Phys. 172, 166 (2001)]
- Объединяет метод конечных объёмов и полулагранжев метод:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \Phi_{i-\frac{1}{2}} dt = \int_{X_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i-\frac{1}{2}}} f(x, t^n) dx$$

- Здесь $X_{i-\frac{1}{2}}$ — результат решения уравнения для характеристики
- При введении ограничителей потока схема обеспечивает выполнение принципа максимума и убывание полной вариации даже при использовании локальной интерполяции

Литература

Метод конечных объёмов

- R. J. LeVeque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press. (2004)

Полулагранжевый метод

- 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.

Кубические В-сплайны

- W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. 2007

Дома

- Для трёх рассмотренных ограничителей потока выписать в явном виде $\tilde{f}_{i-\frac{1}{2}}$