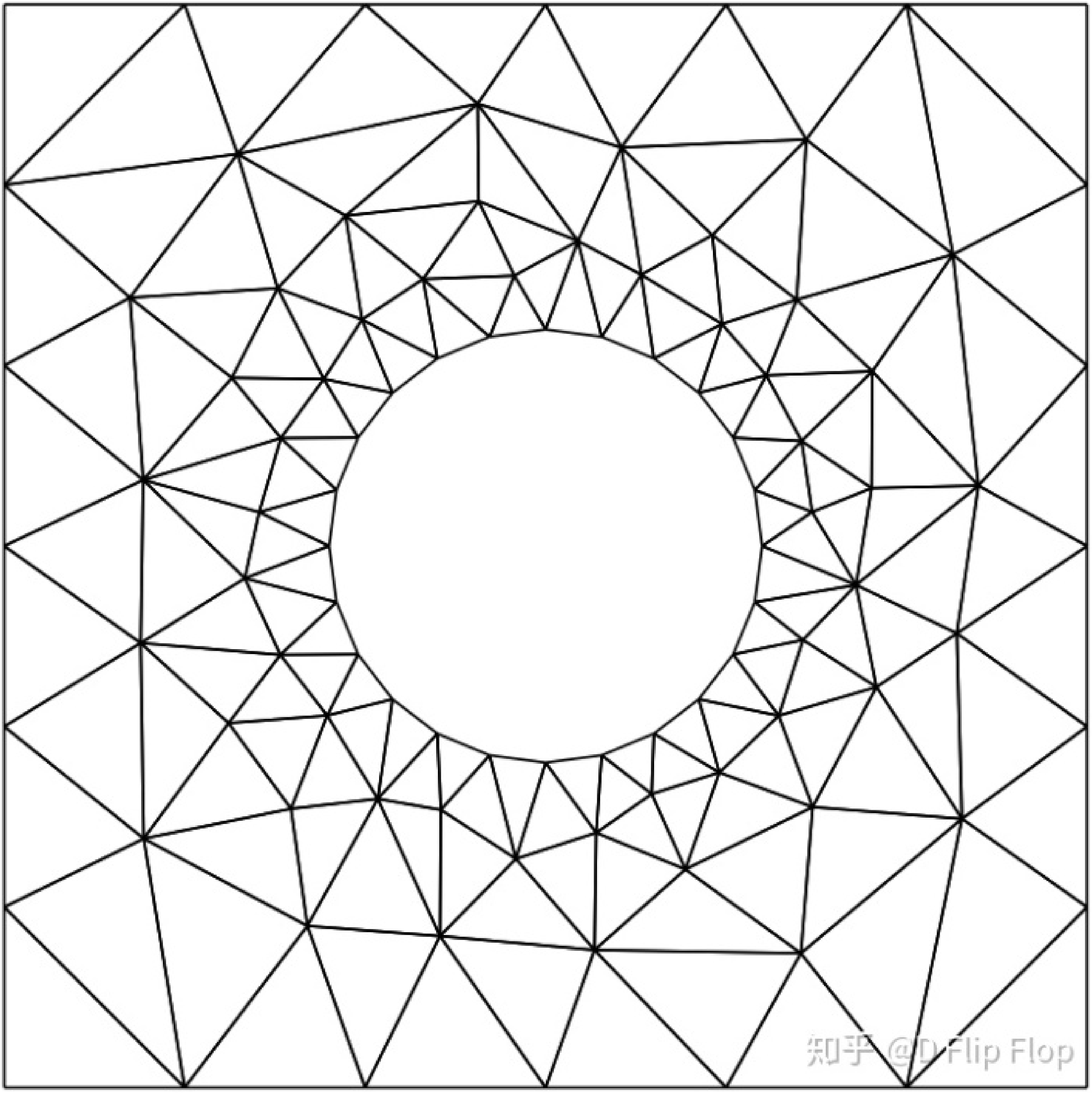

10 月份科研报告

作者：Wenchong Huang

时间：Oct. 10, 2023

目录

第 1 章 分离方法

1.1 分离方法介绍

假设我们有初值问题：

$$\frac{d\phi}{dt} = A(\phi) + B(\phi), \quad \phi(0) = \phi_0. \tag{1.1}$$

我们有求解器 $\mathcal{N}_A(\phi_0, T)$，它输出初值问题

$$\frac{d\phi}{dt} = A(\phi), \quad \phi(0) = \phi_0. \tag{1.2}$$

在 T 时刻的解。同时也有求解器 $\mathcal{N}_B(\phi_0, T)$，它输出初值问题

$$\frac{d\phi}{dt} = B(\phi), \quad \phi(0) = \phi_0. \tag{1.3}$$

在 T 时刻的解。我们可以借助这两个求解器构造一个分离格式，例如：

$$\begin{aligned} \phi^\star &= \mathcal{N}_A(\phi_n, k), \\ \phi_{n+1} &= \mathcal{N}_B(\phi^\star, k). \end{aligned}$$

这个格式有两个性质：

1. 只要求解器 $\mathcal{N}_A$ 与 $\mathcal{N}_B$ 收敛，那么分离格式也收敛；
2. 不论求解器 $\mathcal{N}_A$ 与 $\mathcal{N}_B$ 的精度有多高，在一些特定问题中，该分离格式也只有一阶精度。例如当 A, B 是不交换的线性算子时，可以证明：即使求解器都是精确的，其单步误差也将达到 $O(k^2)$。

1.2 二阶时间离散：Strang Splitting

我们沿用 (1.1)(1.2)(1.3) 式的符号。Strang Splitting 格式 [3] 如下：

$$\begin{aligned} \phi^\star &= \mathcal{N}_A(\phi_n, k/2), \\ \phi^{\star\star} &= \mathcal{N}_B(\phi^\star, k), \\ \phi_{n+1} &= \mathcal{N}_A(\phi^{\star\star}, k/2). \end{aligned}$$

为方便后文的表述，我们记由 Strang Splitting 格式算一步得到的解为：

$$\phi_{n+1} = S(\phi_n, k). \tag{1.4}$$

1.3 四阶时间离散：Forest-Ruth splitting

我们沿用 (1.4) 式的符号。Forest-Ruth Splitting 格式 [2] 如下：

$$\begin{aligned} \phi^\star &= S(\phi_n, \omega_1 k), \\ \phi^{\star\star} &= S(\phi^\star, \omega_2 k), \\ \phi_{n+1} &= S(\phi^{\star\star}, \omega_1 k). \end{aligned}$$

其中

$$\omega_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}, \quad \omega_2 = -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}$$

众所周知，扩散方程的逆过程是不稳定的，而这个格式中居然出现了负时间步，它将会是万恶之源。

1.4 四阶紧致时间离散：Chin splitting

我们沿用 (1.1)(1.2)(1.3) 式的符号。同时我们设求解器 $\mathcal{N}_C(\phi_0, \tau, T)$ 输出初值问题

$$\frac{d\phi}{dt} = A(\phi) + \frac{\tau^2}{48}(2ABA - AAB - BAA)(\phi), \quad \phi(0) = \phi_0. \tag{1.5}$$

在 T 时刻的解。Chin Splitting 格式 [1] 如下：

$$\begin{aligned}
\phi^{(1)} &= \mathcal{N}_A(\phi_n, k/6), \\
\phi^{(2)} &= \mathcal{N}_B(\phi^{(1)}, k/2), \\
\phi^{(2)} &= \mathcal{N}_C(\phi^{(2)}, k, 2k/3), \\
\phi^{(4)} &= \mathcal{N}_B(\phi^{(3)}, k/2), \\
\phi_{n+1} &= \mathcal{N}_A(\phi^{(4)}, k/6).
\end{aligned}$$

当 $2ABA - AAB - BAA = 0$ 时，这是一个相当好的格式。

第 2 章 谱方法

2.1 热方程的谱方法

2.2 对流扩散方程的有限体-谱分离方法

第 3 章 SAV 方法

3.1 Cahn-Hilliard 方程的 SAV 方法

3.2 GePUP-SAV-SDIRK

参考文献

[1] Siu Chin. “Symplectic integrators from composite operator factorizations”. In: *Physics Letters A* 226 (Jan. 1997), pp. 344–348. DOI: 10.1016/S0375-9601(97)00003-0.

[2] Etienne Forest and Ronald Ruth. “Fourth-order symplectic integration”. In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 43 (May 1990), pp. 105–117. DOI: 10.1016/0167-2789(90)90019-L.

[3] Gilbert Strang. “On the Construction and Comparison of Difference Schemes”. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 5.3 (1968), pp. 506–517. DOI: 10.1137/0705041. eprint: https://doi.org/10.1137/0705041. URL: https://doi.org/10.1137/0705041.

附录 A 二维 FFT

引理 A.1

二维 DFT 可归结为如下问题：已知二元多项式

$$f(x,y)=\sum_{n=0}^{N-1}\sum_{m=0}^{N-1}a_{n,m}x^n y^m,$$

求 $f(\omega_N^j,\omega_N^k),(j,k=0,...,N-1)$ 的值。

引理很容易验证，关键是如何快速求解这个问题。为此，我们对多项式做奇偶项划分，即令

$$\begin{aligned}
p_1(x,y)&=\sum_{n=0}^{N/2-1}\sum_{m=0}^{N/2-1}a_{2n,2m}x^n y^m,\\
p_2(x,y)&=\sum_{n=0}^{N/2-1}\sum_{m=0}^{N/2-1}a_{2n,2m+1}x^n y^m,\\
p_3(x,y)&=\sum_{n=0}^{N/2-1}\sum_{m=0}^{N/2-1}a_{2n+1,2m}x^n y^m,\\
p_4(x,y)&=\sum_{n=0}^{N/2-1}\sum_{m=0}^{N/2-1}a_{2n+1,2m+1}x^n y^m.
\end{aligned}$$

于是我们有

$$f(x,y)=p_1(x^2,y^2)+yp_2(x^2,y^2)+xp_3(x^2,y^2)+xyp_4(x^2,y^2).$$

现任取整数 $j,k\in[0,N/2)$，注意到

$$\begin{aligned}
f(\omega_N^j,\omega_N^k)&=p_1(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)+\omega_N^k p_2(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)+\omega_N^j p_3(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)+\omega_N^j\omega_N^k p_4(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)\\
f(\omega_N^j,\omega_N^{N/2+k})&=p_1(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)-\omega_N^k p_2(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)+\omega_N^j p_3(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)-\omega_N^j\omega_N^k p_4(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)\\
f(\omega_N^{N/2+j},\omega_N^k)&=p_1(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)+\omega_N^k p_2(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)-\omega_N^j p_3(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)-\omega_N^j\omega_N^k p_4(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)\\
f(\omega_N^{N/2+j},\omega_N^{N/2+k})&=p_1(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)-\omega_N^k p_2(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)-\omega_N^j p_3(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)+\omega_N^j\omega_N^k p_4(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k)
\end{aligned}$$

因此，只要我们先算出

$$p_i(\omega_{N/2}^j,\omega_{N/2}^k),(j,k=0,...,N/2-1),\quad i=1,2,3,4. \tag{A.1}$$

我们就可以再用 $O(N)$ 的时间完成问题求解。不难看出 (A.1) 式的形式与原问题完全一致，只是 N 换成了 $N/2$。我们设求解原问题的时间复杂度为 $T(N)$，有：

$$T(N)=4T\left(\frac{N}{2}\right)+\Theta(N)=\Theta(N^2\log N).$$

因此我们可以借助分治实现高效求解。但如果使用递归式写法，我们需要在每一层存储奇偶项划分后 p_1,p_2,p_3,p_4 的各项系数，从而空间复杂度也达到 $\Theta(N^2\log N)$。我们可以用蝴蝶变换来避免递归，即自底向上模拟分治过程，空间复杂度可以下降到 $\Theta(N^2)$。详见代码`fft2D.cpp`。

附录 B 本月的心路历程

本月搞懂了三维不规则有限体程序的脉络，并着手处理了一些程序细节。但是两位学长几乎没有给我安排代码任务，导致我在做完手头工作后有了空闲时间，于是开始读 GePUP-SAV 的文章。阅读文章的过程中，我看不懂 SAV，然后就去找了 SAV 的原始论文来看。看完之后感觉很顺畅，于是想把文章中的数值测试简单复现一下。然后就开始了“递归式”的学习。

我发现文章中是用谱方法离散的，然后去看了一下谱方法。我发现谱方法要用到 FFT，但我只学过 1 维 FFT，网上也找不到 2 维 FFT 的资料，索性自己按 1 维的思路推了一遍。然后我用谱方法写了个二维规则周期区域热方程的求解器。有了这个求解器之后我又想把它用在对流扩散方程里，但非线性对流项在做 Fourier 变换之后反而比原来更复杂了。于是我就想用有限体处理对流项、用谱方法处理扩散项。为了把他们耦合起来，我又去看了些分离方法的文章。

看了一些文章，发现分离方法似乎现在已经没什么人研究了，于是回头把 SAV 原始文章里的数值测试复现了一下，接着回头读 GePUP 文章的 SAV 部分，然后这个月就这么过去了。