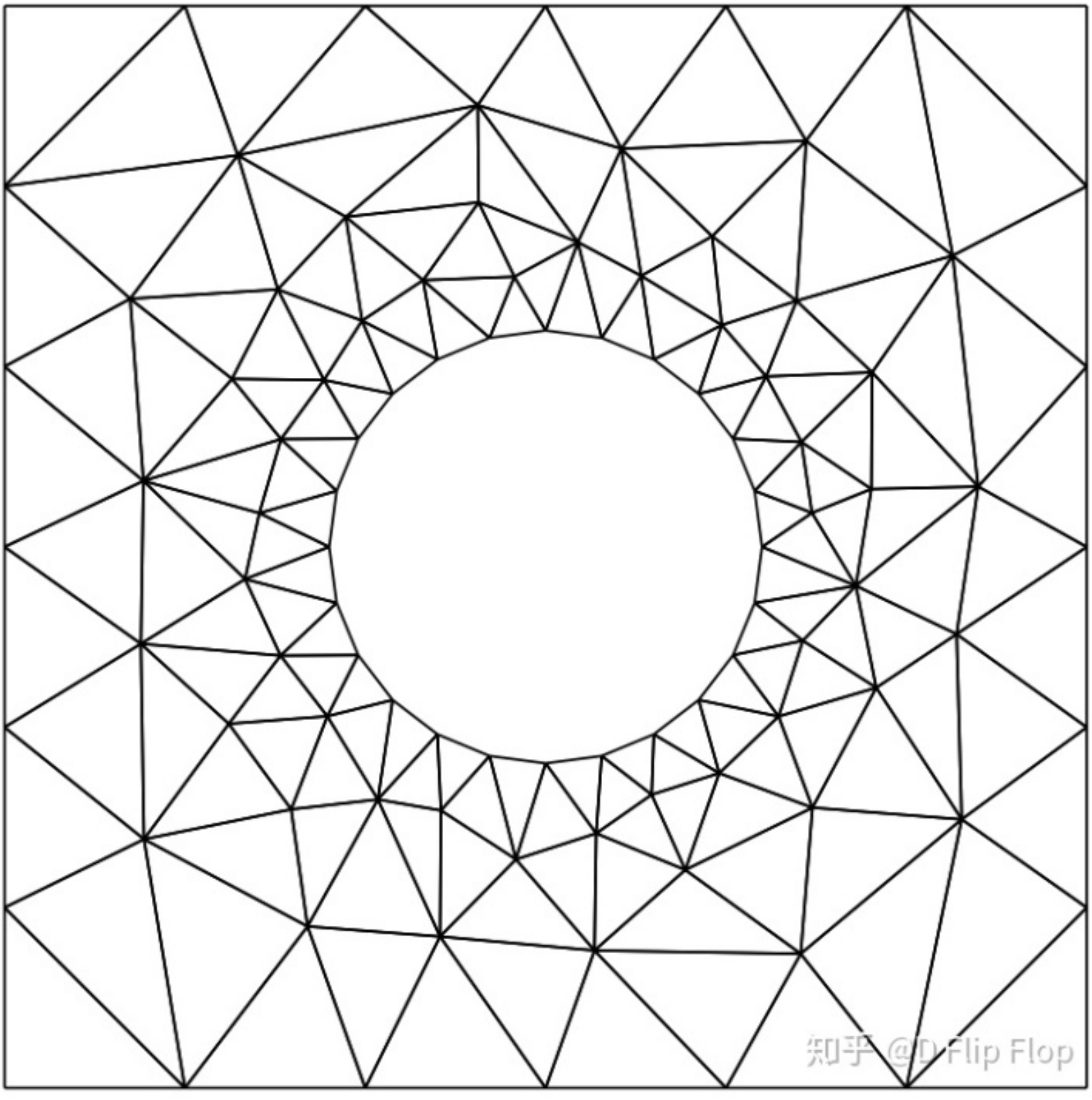


10 月份科研报告

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

$$2ABA-AAB-BAA=0 \tag{1.6}$$

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

2.1.1 方法描述

考虑 $[0,1]^2$ 上的周期边界热方程

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}=\Delta\phi.$$

对 ϕ 做离散傅里叶变换，得到

$$\phi(x,y,t)\approx\frac{1}{(2N+1)^2}\sum_{n,m=-N}^{N}\hat{\phi}_{n,m}(t)e^{-2\pi\mathbf{i}(nx+my)}.$$

代入热方程，即得

$$\frac{d\hat{\phi}_{n,m}}{dt}=-4\pi^2(n^2+m^2)\hat{\phi}_{n,m},\qquad n,m=-N,...,N.$$

这些 ODE 可以独立求解，得到

$$\hat{\phi}_{n,m}(t)=\exp(-4\pi^2(n^2+m^2))\hat{\phi}_{n,m}(0),\qquad n,m=-N,...,N. \tag{2.1}$$

于是我们得到谱方法：

1. 对 $\phi(x_j,y_k,0)(j,k=0,...,2N)$ 做离散傅里叶变换得到 $\hat{\phi}_{n,m}(0)(n,m=-N,...,N)$.
2. 由 (2.1) 式计算 $\hat{\phi}_{n,m}(t)(n,m=-N,...,N)$.
3. 对 $\hat{\phi}_{n,m}(t)(n,m=-N,...,N)$ 做离散傅里叶逆变换得到 $\phi(x_j,y_k,t)(j,k=0,...,2N)$。

其中 $x_j=\frac{j}{2N+1},y_k=\frac{k}{2N+1}$。朴素的谱方法要求边界必须满足周期条件，并且必须使用规则等分网格。

2.1.2 数值算例

我们取初始条件

$$\phi_0(x,y)=\exp((-(x-0.5)^2-(y-0.5)^2)\times 60). \tag{2.2}$$

求方程在 $T = 0.05$ 时刻的解，测试结果如下表，误差由 Richardson 外插法估计（注意时间单位为**毫秒**，且运行时间不包含初始化时间）。

M	64	128	256	512
1 范数误差	1.04517e-13	7.09259e-13	9.18621e-13	2.63755e-14
2 范数误差	1.14391e-13	7.10592e-13	9.19695e-13	3.28119e-14
∞ 范数误差	2.25001e-13	8.25000e-13	1.05000e-12	1.00017e-13
运行时间 (**ms**)	0.0502	0.302	0.788	4.18

表 2.1: 谱方法解热方程的测试结果

这些误差几乎都是舍入误差的累积，因此无法算收敛阶。

2.2 对流扩散方程的有限体-谱分离方法

2.2.1 方法描述

考虑 $[0,1]^2$ 上的周期边界对流扩散方程

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) + \nu \Delta \phi.$$

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

$$\frac{d\phi}{dt} = \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi), \quad \phi(0) = \phi_0. \tag{2.3}$$

在 T 时刻的解。具体地，我们对 ϕ 做有限体积离散，然后对流算子做四阶有限体积离散，时间上再采用经典 RK 方法。设求解器 $\mathcal{N}_B(\phi_0, T)$ 它输出初值问题

$$\frac{d\phi}{dt} = \nu \Delta \phi, \quad \phi(0) = \phi_0. \tag{2.4}$$

在 T 时刻的解，内部采用谱方法。

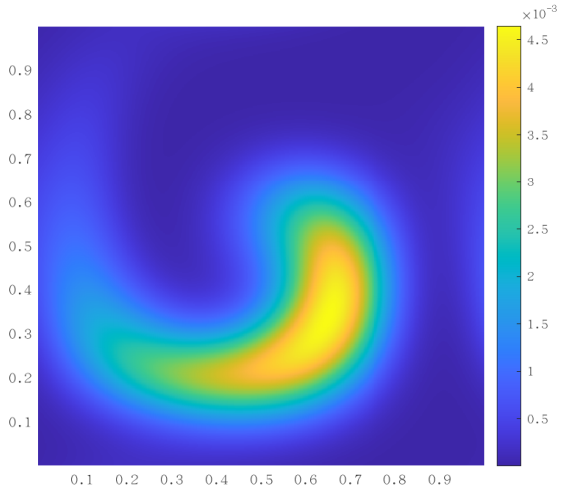
最后采用 Forest-Ruth Splitting 或者 Chin Splitting 将二者耦合。其中 (1.5) 式的求解器 $\mathcal{N}_C$ 由 $\mathcal{N}_A$ 替代，但注意到对流扩散方程不满足 (1.6) 式，因此这个替代是不精确的，可能导致 Chin Splitting 掉阶。

2.2.2 数值算例

我们取 $\nu = 0.001$，及初始条件

$$\phi_0(x, y) = \exp((-(x-0.5)^2 - (y-0.75)^2) \times 100 \log(10^{16})). \tag{2.5}$$

也就是《数学实践》课程大作业的第二个算例。在 $T = 10$ 时刻，其数值解如下图所示。



测试结果如下表。

M	64	收敛阶	128	收敛阶	256	收敛阶	512
1 范数误差	9.74830e-08	3.98	6.18924e-09	3.99	3.88379e-10	4.00	2.42993e-11
2 范数误差	1.75527e-07	3.98	1.11599e-08	3.99	7.00492e-10	4.00	4.38596e-11
∞ 范数误差	7.90676e-07	3.94	5.16717e-08	3.99	3.26315e-09	3.99	2.05022e-10
运行时间 (s)	5		41		390		3503

表 2.2: 当时大作业的测试结果

M	64	收敛阶	128	收敛阶	256	收敛阶	512
1 范数误差	9.81486e-08	3.98	6.22740e-09	-	无法估计误差	-	-
2 范数误差	1.74020e-07	3.98	1.10630e-08	-	无法估计误差	-	-
∞ 范数误差	8.14289e-07	3.97	5.20873e-08	-	无法估计误差	-	-
运行时间 (s)	0.103		0.854		8.96		-

表 2.3: Forest-Ruth Splitting 的测试结果

M	64	收敛阶	128	收敛阶	256	收敛阶	512
1 范数误差	9.73896e-08	4.00	6.07244e-09	3.96	3.91085e-10	3.02	4.81695e-11
2 范数误差	1.72842e-07	4.00	1.07871e-08	4.00	6.75903e-10	3.13	7.69678e-11
∞ 范数误差	8.04398e-07	3.98	5.08533e-08	3.87	3.48553e-09	3.35	3.42374e-10
运行时间 (s)	0.0515		0.517		4.56		50.6

表 2.4: Chin Splitting 的测试结果

从时间上看，比起当时的大作业，运算速度有了质的飞跃。

不过，Forest-Ruth Splitting 最多只能算到 256 的网格，因为在 512 的网格中，扩散项的负时间步导致了指数爆炸：在一个负时间步中，最高频的谱需要乘约 2×10^{37}，这对浮点精度来说是灾难。

另外，Chin Splitting 在 256 到 512 时掉阶的原因可能是用 $\mathcal{N}_A$ 代替 $\mathcal{N}_C$ 的原因，也有可能是谱方法的固有误差累积。从上一节的测试，可以发现每次求解都有`1e-13`的固有误差，如果经过多个时间步累积，可能会导致它成为主要的误差来源。

我希望原因是后者，这样 $\mathcal{N}_A$ 代替 $\mathcal{N}_C$ 至少在精度足够高的环境下可行，当然还需要一些理论验证。

第 3 章 SAV 方法

3.1 Cahn-Hilliard 方程的 SAV 方法

考虑能量泛函

$$E[\phi(\mathbf{x})] = \int_\Omega \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + F(\phi) \right) \, d\mathbf{x}. \tag{3.1}$$

以及如下形式的 Cahn-Hilliard 方程：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Delta \mu, \tag{3.2}$$

$$\mu = \frac{\delta E}{\delta \phi} = -\Delta \phi + F'(\phi). \tag{3.3}$$

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

A.1 公式推导

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`。

A.2 FFTW 库的使用

FFTW(FFT in the West) 库曾经是世界上最快的 FFT 库，不过现在 Intel 用 mkl 优化后的 FFTW 要更快。以 2 维 FFT 为例，在输入输出均为复数数组的情况下，速度大约是我手写 FFT 的 1.2 倍。

注意到一个问题：FFT 正变换时，输入数组为实数、输出数组为复数；FFT 逆变换时，输入数组为复数、输出数组为实数。FFTW 能利用这个性质，进一步优化 FFT。下面是一个使用 FFTW 的例程。

```
#include <bits/stdc++.h>
#include <fftw3.h>
using namespace std;

const int N = 1024;

int main(){
    auto out = (fftw_complex*) fftw_malloc(sizeof(fftw_complex) * N*(N/2+1));
    auto in = (double*) fftw_malloc(sizeof(double) * N*N);
    auto p = fftw_plan_dft_r2c_2d(N, N, in, out, FFTW_MEASURE);
    auto pinv = fftw_plan_dft_c2r_2d(N, N, out, in, FFTW_MEASURE);

    for(int i = 0; i < N*N; i++)
        in[i] = (double)rand()/RAND_MAX;

    // Run FFT and save to out[]
    fftw_execute(p);

    // Run IFFT and save to in[]
    fftw_execute(pinv);

    return 0;
}
```

实际测试表明，针对输入输出数组的类型优化后的 FFTW，其运行速度是我手写 FFT 的 2.4 倍。

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。