

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE



Bc. Andrea Živčáková

Numerické řešení rovnic popisujících dynamiku hejn

Katedra numerické matematiky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Václav Kučera, Ph.D.

Studijní program: Matematika

Studijní obor: Numerická a výpočtová matematika

Praha 2013

Rada by som na tomto mieste poďakovala vedúcemu diplomovej práce, RNDr. Václavovi Kučerovi, Ph.D., za vypísanie témy, poskytnuté konzultácie, cenné rady a podnety, ktoré prispeli k vypracovaniu práce.

Zároveň chcem vyjadriť poďakovanie aj autorovi článku, Mag. Janovi Haškovi, Ph.D., za jeho ochotu a vysvetlenie mojich dotazov.

Napokon ďakujem tiež svojim rodičom a súrodencom za podporu po celú dobu štúdia.

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V Praze dne

Andrea Živčáková

Název práce: Numerické řešení rovnic popisujících dynamiku hejn

Autor: Bc. Andrea Živčáková

Katedra: Katedra numerické matematiky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Václav Kučera, Ph.D.

Abstrakt: V tejto práci sa venujeme numerickému riešeniu rovníc popisujúcich dynamiku krdľov (hejn) vtákov, takzvaný flocking. Konkrétne venujeme pozornosť systému Eulerových rovníc pre stlačiteľné prúdenie s korekciou pravej strany. Tento model vychádza z práce Fornasier et al. (2010). Pre komplikovanosť modelu sa zameriavame len na jednodimenzionálny prípad. K numerickému riešeniu používame semi-implicitnú nespojitú Galerkinovú metódu. Diskretizáciu pravej strany volíme tak, aby sme zachovali štruktúru semi-implicitnej schémy pre Eulerove rovnice predstavenej v práci Feistauer, Kučera (2007). Navrhnutá numerická schéma bola implementovaná a boli vykonané numerické experimenty, ktoré preukázali robustnosť schémy.

Klíčová slova: flocking, Eulerové rovnice, semi-implicitná metóda, nespojitá Galerkinová metóda, krdle (česky hejná)

Title: Numerical solution of equations describing the dynamics of flocking

Author: Bc. Andrea Živčáková

Department: Department of Numerical Mathematics

Supervisor: RNDr. Václav Kučera, Ph.D.

Abstract: This work is devoted to the numerical solution of equations describing the dynamics of flocks of birds. Specifically, we pay attention to the Euler equations for compressible flow with a right-hand side correction. This model is based on the work Fornasier et al. (2010). Due to the complexity of the model, we focus only on the one-dimensional case. For the numerical solution we use a semi-implicit discontinuous Galerkin method. Discretization of the right-hand side is chosen so that we preserve the structure of the semi-implicit scheme for the Euler equations presented in the work Feistauer, Kučera (2007). The proposed numerical scheme was implemented and numerical experiments showing the robustness of the scheme were carried out.

Keywords: flocking, Euler equations, semi-implicit method, discontinuous Galerkin method, flocks

Obsah

Úvod	2
1 Popis problému	4
1.1 Časticové modely	4
1.1.1 Self-Propelling, Friction and Attraction-Repulsion Model	5
1.1.2 Cucker - Smaleho model	5
1.2 Kinetické modely	6
1.2.1 Rovnica Boltzmannovho typu	6
1.3 Hydrodynamické modely	8
1.4 Flocking pomocou Povzner-Boltzmannovej rovnice	9
1.4.1 Povznerova rovnica	9
1.4.2 Disipatívna korekcia	11
1.4.3 Model Boltzmannovho typu pre disipatívne interakcie	13
1.4.4 Vlastnosti nelineárneho operátora trenia	14
1.5 Eulerové rovnice	15
1.5.1 Jednorozmerný model	16
2 Nespojité Galerkinová metóda	17
2.1 Systém Eulerových rovníc	17
2.2 Niektoré dôležité vlastnosti Eulerových rovníc	18
2.2.1 Flocking v tvare Eulerových rovníc v 1D	20
2.3 Diskretizácia problému	20
2.3.1 Numerické toky	22
2.3.2 Vijayasundaramov numerický tok H_{VS}	23
2.4 Časová diskretizácia	23
2.4.1 Diskretizácia formy $l_h(w, \varphi_h)$	25
2.5 Zachytenie šoku	27
2.6 Zhrnutie - výsledná schéma	28
2.7 Implementácia	28
2.7.1 Numerická integrácia	28
2.7.2 Bázové funkcie	29
2.7.3 Vákuum a postprocessing	30
3 Numerické výsledky	32
3.1 Testovací príklad	32
3.2 Prípád č. 1	33
3.3 Prípád č. 2	34
3.4 Prípád č. 3	35
3.5 Prípád č. 4	37
Záver	63

Úvod

Každý deň sa stretávame s javom nazývaným *flocking*. Ide o vytváranie veľkých skupín jedincov rovnakého druhu, ktoré svojím správaním na seba navzájom vplyvajú - interagujú. Príkladom môže byť krdeľ vtákov, stádo štvornožcov, krdeľ rýb, včelí roj, kolónie baktérií a pod.

Prvú počítačovú simuláciu flockingu spravil Craig Reynolds. V roku 1986 vytvoril simulačný program Boids. Tento program simuluje správanie jedincov (boids) podľa daných jednoduchých pravidiel. Vzniká tým jav podobný správaniu sa krdeľov vtákov. (Viac informácií: <http://www.red3d.com/cwr/boids/>).

Vedci z Univerzity Leeds ukázali, že chovanie ľudí je v tomto ohľade podobné správaniu zvierat. V článku [9] popisujú svoj výskum a testy, ktorými zistili, že ľudia napodobňujú správanie okolia, tj. davu ľudí fungujú na princípe flockingu. Existujú teda akési paralely správania zvierat a s vytváraním davov ľudskej populácie. Lepším pochopením tohoto javu by mohlo pomôcť napríklad pri vytváraní stratégie havarijného plánovania alebo v pešej organizácii.

Flocking je tiež považovaný za dôležitý faktor pri kontrole správania sa bezpilotných prostriedkov (Unmanned Air Vehicles (UAVs)). Svoje uplatnenie si nachádza v šetričoch obrazoviek alebo vo filmovom priemysle, napr. vo filme Batman sa vracia (1992) - flocking netopierov, Leví kráľ (1994) - stádo pakoňov.

K tejto problematike je dôležité spomenúť významné mená ako Stephan J. Smale, F. Cucker, Giuseppe Toscani, M. Fornasier, J.A. Carrillo, J. Rosado (a mnoho ďalších).

Stephan J. Smale je profesorom matematiky na Univerzite Berkeley v Kalifornii. Zaoberá sa širokou škálou matematických oborov. V roku 1966 dostal Fieldsovu medailu. Smale objavil napríklad oblasti ako teória učenia - matematický popis nervových spojení v mozgu, ktoré vedú k inteligencii a učeniu, flocking a data mining. Vzhľadom k váženosti profesora Smala bol požiadaný o vytvorenie zoznamu dôležitých otvorených problémov, Smaleho problémy, analogických Hilbertovým problémom.

Meno profesora z Univerzity v Hong Kongu, F. Cucker, je hlavne spájané s výskumom základných aspektov numerických algoritmov. Deterministický algoritmus na riešenie 17. Smaleho problému ešte nie je, ale čiastočné odpovede na tento problém sú známe zásluhou aj tohto profesora.

Profesori F. Cucker a S. Smale sú autormi práce [7]. V nej popisujú matematický model emergencie, tj. spontánnemu vzniku makroskopických vlastností a štruktúr zložitých systémov, ktorých nie je jednoduché odvodiť z vlastností ich zložiek. Model, ktorý je predstavený v tomto článku, tvorí základný prvok potrebný k štúdiu flockingu.

Modelovanie úlohy flockingu ale nie je vôbec jednoduchý problém. Pokiaľ rozdelíme oblasť vplyvu okolo jedinca na tri časti - odpor, orientácia a príťažlivosť, môžeme odvodiť nejaké sústavy obyčajných diferenciálnych rovníc. Rôzne modely dostaneme uvažovaním rôznych dodatočných podmienok, napr. kužeľ viditeľnosti, aerodynamika, hluk atď. Problémom ale takýchto modelov je, že pre veľký počet jedincov vznikajú veľmi veľké systémy ODR, avšak tieto modely produkujú pozoruhodné javy ako napríklad vzor formácii stád.

Modely pre veľký počet jedincov vychádzajú z kinetickej teórie plynov.

Každá látka sa skladá z atómov, malých častíc, ktoré sú neustále v pohybe a vzájomne sa priťahujú v prípade, že sú od seba trochu vzdialené alebo odpudzujú, keď sú v tesnej blízkosti. Spájajú sa do väčších celkov a vytvárajú molekuly. Molekuly sú teda nejaký základný nástroj, z ktorého je skonštruovaná každá hmota. Rôzne usporiadania molekúl alebo častíc a vzájomných interakcií medzi nimi určujú nielen o aký druh hmoty ide, ale dávajú informácie aj o vlastnostiach tejto hmoty. Pokiaľ sú častice relatívne ďaleko od seba, pohybujú sa v celom objeme a nepôsobia na seba príťažlivou silou hovoríme o plynoch. Kinetická teória plynov sa snaží vysvetliť chovanie plynov na základe chovania jednotlivých molekúl, napr. ich rýchlosťami, zrážkami s ostatnými molekulami. Špecifická je najmä tým, že berie v úvahu len kinetickú energiu molekúl, ktorá odpovedá teplote látky. Uvažuje a odvodzuje vzťahy pre ideálny plyn, ktorý si možno predstaviť tak, že častice budú pre nás guľôčky zanedbateľných rozmerov medzi ktorými nie je vzájomné silové pôsobenie (príťažlivé a odpudivé sily). Na popis častíc ideálneho plynu používame zákony klasickej mechaniky. (Viac napr.[21]).

Veľká nevýhoda kinetických modelov je, že sú pre viac ako 4 dimenzie (dve pre pozíciu a dve pre rýchlosť) výpočetne náročné. Preto uvažujeme hydrodynamické modely, kde hrajú hlavnú úlohu makroskopické veličiny.

Modelovaním problému flockingu dospela rada autorov k rôznym rovniciam. Článok [12], z ktorého vychádza táto práca, odvodzuje riešenie v tvare parciálnych diferenciálnych rovníc popisujúcich rovnice zákonov zachovania pre ideálny plyn - Eulerové rovnice, avšak s nenulovou pravou stranou. Cieľom tejto práce je numericky riešiť práve tento tvar Eulerových rovníc.

Práca je členená do troch kapitol. Upozorňujeme čitateľa, že v práci sa nachádzajú modely s anglickým názvom. Chceli sme sa tak vyhnúť vymýšľaniu slovenskej (resp. českej) terminológii alebo doslovným prekladom. Ich preklad zväčša neexistuje a táto práca si nekladie za cieľ tvorbu novej terminológie.

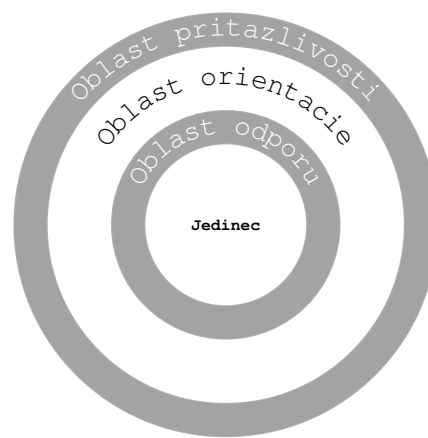
V prvej kapitole popíšeme problém, ktorý riešime. Vzhľadom k rozsahu problematiky a množstva rôznych techník z rôznych oborov, ktoré je nutné aplikovať pre odvodenie takýchto rovníc, nie je možné zachádzať do všetkých detailov. Preto v tejto kapitole zhrnieme hlavné koncepty, z ktorých odvodenie vychádza. Celá kapitola vychádza najmä z [5], [12].

Druhá kapitola sa nazýva Nespojité Galerkinová metóda (DGM). Už názov poukazuje na to, že našu Eulerovú rovnicu budeme diskretizovať touto metódou. Pre zložitosť problému sa zameriame na numerické riešenie jednodimenzionálneho prípadu. Popíšeme základné vlastnosti Eulerových rovníc a ich diskretizáciu.

V poslednej kapitole predstavíme numerické experimenty. Výsledky boli získané programovou implementáciou v jazyku C. Kapitola obsahuje jeden testovací prípad a ďalšie štyri prípady, na ktorých pozorujeme chovanie hustoty, rýchlosti, teploty a tlaku pre model Eulerových rovníc popisujúcich flocking.

1. Popis problému

Naším cieľom je popísať kolektívny pohyb skupiny zvierat - *flocking*. Pozorovaním takejto skupiny môžeme dôjsť k predpokladu, že na každého jedinca pôsobia tri *základné oblasti vplyvu*. Prvou oblasťou máme na mysli oblasť, ktorá zaručuje to, že sa jedinec vyhne prekážkam a ostatným jedincom. Nazýva sa *oblasť odporu*. Ďalšia oblasť, *oblasť orientácie*, má za cieľ identifikovať možný smer skupiny a prispôbiť sa mu. Dôležitou vlastnosťou jedinca, ktorý vykonáva kolektívny pohyb je i to, aby sa podstatne nevzdialil od skupiny. Ak bude od nej príliš ďaleko, bude sa musieť vrátiť. Túto oblasť vplyvu nazveme *oblasť príťažlivosti*.



Obr. 1.1: Trojzónový model.

Sila týchto vplyvov nie je ale v praxi stála. Neustále sa mení. Smer a pohyb jednotlivca sa bude meniť v závislosti na umiestneniach ostatných jedincov. Aby sme mohli odvodiť matematický model, pokúsime sa vytvoriť najprv modely, ktoré budú zahrňovať príťažlivosť, odpor i orientáciu. Z nich ďalej zistíme či správne riešia náš problém alebo či budeme musieť zväziť i iné javy vznikajúce v kolektívnom pohybe skupiny zvierat.

1.1 Časticové modely

Modely, ktoré zahrňujú príťažlivosť, odpor a mechanizmy orientácie nazývame *individual-based models* (tiež známe ako *agent based models*). Sú to však veľmi zjednodušené modely, ktoré neberú do úvahy ďalšie faktory ako sú kužeľ viditeľnosti, blízka susedská interakcia, hluk, aerodynamika a pod. Zlepšením, pridaním nejakých efektov k týmto trom oblastiam vplyvu a analyzovaním pre rôzne typy zvierat a kontrétnych druhov sa zaoberali napr. v prácach [15, 17, 20].

Vylepšené modely zahrňajú ďalšie dôležité aspekty, ktoré sú pozorované v prírode. Príkladom môže byť fakt, že zvieratá nie sú ovplyvňované všetkými jedincami a to buď preto, že majú špeciálne kužele viditeľnosti alebo preto, že vo veľmi

krátkom čase, môžu sledovať pohyb relatívne malého počtu ďalších jedincov alebo viac sledujú jedince, ktoré sú vyššie v sociálnej hierarchii. To je sledované napríklad u škorcov. Tie rozhodujú o svojom smere letu podľa vzájomnej topológie (skôr než podľa metrickej vzdialenosti) správania blízkych 6-7 vtákov ([1]). Toto číslo sa síce zdá malé, ale je dostatočne malé na to, aby umožnilo rýchle rozhodovanie a dostatočne veľké, aby zabránilo rozdeleniu skupiny.

Ďalej budeme vždy písmenom N značiť počet jedincov a d dimenziu priestoru.

1.1.1 Self-Propelling, Friction and Attraction-Repulsion Model

Uvažujme samostatne sa pohybujúce jedince v prostredí s trením korigujúcich svoj pohyb vzhľadom k ostatným na základe nejakého potenciálu. Označme $x_i(t) = x_i$ polohu i -tého jedinca v čase t a v_i je jeho rýchlosť. Model takejto situácie ([8]) je nasledujúci:

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= v_i, \\ \frac{dv_i}{dt} &= (\alpha - \beta|v_i|^2)v_i - \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} \nabla_{x_i} U(|x_i - x_j|), \end{aligned} \quad (1.1)$$

kde $i = 1, \dots, N$, $\alpha, \beta \geq 0$ sú parametre a $U : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ je daný potenciál modelujúci krátkodobý odpor a dlhodobú príťažlivosť.

Termíny spájané s parametrom α sú *self-propulsion of individuals* (tj. schopnosť jedinca uvádzať sa do pohybu), termín spájaný s β reprezentuje *trenie*.

Typický výber potenciálu U je *Morseov potenciál*, ktorý je daný pomocou

$$U(x) = k(|x|), \quad k(s) = -C_a e^{-s/l_a} + C_r e^{-s/l_r},$$

kde C_a, C_r sú v poradí sily príťažlivosti a odporu a l_a, l_r sú dĺžky príťažlivosti a odporu.

Pravidlo o kombinácii oboch vplyvov vedie do rôznych režimov. Viac informácií možno nájsť v [4].

Najšpecifikajšie situácie v biologickej aplikácii sú určené pre $C = C_r/C_a > 1$ a $l = l_r/l_a < 1$ odpovedajúce ďalekosiahlej príťažlivosti a odporu malého rozsahu.

Treba ale upozorniť najmä na dve základné pozorované situácie. Prvou je stabilita, prípad $Cl^d > 1$. Jednotlivci vtedy tvoria kryštalicky podobné vzory. Pre N dostatočne veľké, častice (jedince) hľadajú optimálnu vzdialenosť a určujú od seba pevne danú relatívnu vzdialenosť. V druhom prípade, tj. $Cl^d < 1$, máme takzvanú katastrofickú situáciu. V tomto prípade vznikajú rotačné pohyby konštantnej rýchlosti, ak sú spočiatku dobre oddelené. Oblasť týchto rotujúcich vzorov sa stabilizuje, ak $N \rightarrow \infty$ (viac [4]).

1.1.2 Cucker - Smaleho model

Model navrhnutý v [7] uvažuje len usporiadanie jednotlivcov s prispôbeným priemerovaním ich relatívnej rýchlosti so všetkými ostatnými. Hlavná myšlienka modelu je zrejma u sily. Sila takéhoto priemerovaného procesu je závislá od

vzájomnej vzdialenosti jedincov. Platí tu fakt, že bližší jedinci majú väčší vplyv na jedinca než tí, čo sú od neho viac vzdialení.

Model pre N jedincov je popísaný nasledujúcim dynamickým systémom

$$\begin{aligned}\frac{dx_i}{dt} &= v_i, \\ \frac{dv_i}{dt} &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N H(|x_i - x_j|)(v_j - v_i),\end{aligned}\tag{1.2}$$

kde $i = 1, \dots, N$ a H je komunikačná funkcia daná nasledovne

$$H(x) = a(|x|), \quad a(r) = \frac{K}{(\sigma^2 + |r|^2)^\beta}.$$

Neznáme $K, \sigma > 0$ a $\beta \geq 0$ sú parametre. V závislosti od týchto parametrov vznikajú tiež rôzne režimy. Poznamenajme si, že napríklad v prípade $\beta \leq 1/2$, režim nezávisí od N, d a dokonca ani počiatočnej konfigurácie. Tomuto prípadu sa hovorí *bezpodmienečný flocking*. Jedince sa správajú tak, že sa pohybujú rovnakou strednou rýchlosťou a skupinu vnímame ako skupinu s pevnými vzájomnými vzdialenosťami (nie nevyhnutne kryštalického vzoru) a priestorového profilu, ktorý závisí na počiatočnej podmienke.

1.2 Kinetické modely

Pokiaľ budeme mať veľký počet jedincov nastane ale veľký problém. Presné riešenie získame z veľmi veľkého systému ODR, a tým pádom matematicky dosť výpočtetne náročného problému. Vhodné je preto zvoliť inú stratégiu - využiť kinetickú teóriu plynov, tj. prechodu k makroskopickej verzii modelov.

Uvažujme rozloženie hustoty jedincov f (*density distribution of agents*) závislej na priestorovej pozícii, rýchlosti a času, ktorá bude interagovať so stochastickým vplyvom. Predstaviť si to môžeme tak, že vplyv bude priestorovo rozmazaný. Ak budú dvaja jedinci ďaleko od seba, budú na seba tiež pôsobiť. Miesto správania jedinca sledujeme správanie zakódované v rozložení hustoty. Takýto vývoj sa riadi jedinou PDR (teória viz [6]).

Označme $f(x, v, t)$ hustotu jedincov na pozícii $x \in \mathbb{R}^d$ s rýchlosťou $v \in \mathbb{R}^d$ a v čase $t \geq 0$, $d \geq 1$. Z kinetickej teórie vieme, že časová zmena hustoty $f(x, v, t)$ závisí ako na transporte (jedinci sa pohybujú voľne v priestore) tak aj na interakciách s ostatnými jedincami. Zmena tejto hustoty závisí na rovnováhe medzi prírastkami a strate rýchlosti jedincov v závislosti na binárnych interakciách.

1.2.1 Rovnica Boltzmannovho typu

Uvažujme dvoch jedincov s pozíciami a rýchlosťami (x, v) a (y, w) , ktorý sa navzájom ovplyvňujú. Rýchlosti po tejto interakcii označme nasledovne

$$\begin{aligned}v^* &= \mathfrak{C}(x, v; y, w), \\ w^* &= \mathfrak{C}(y, w; x, v),\end{aligned}$$

kde \mathfrak{C} je vhodné zobrazenie zachycujúce interakciu. Prechodom k mezoskopickému modelu takejto interakcie pre hustotu f dostaneme nasledujúcu rovnicu, viz [6]:

Rovnica Boltzmannovho typu

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f\right)(x, v, t) = Q(f, f)(x, v, t), \quad (1.3)$$

kde

$$Q(f, f)(x, v) = \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{1}{J(x, v; y, w)} f(x, v_*) f(y, w_*) - f(x, v) f(y, w) \right) dw dy. \quad (1.4)$$

Hodnota ε charakterizuje priemernú voľnú dráhu častíc.

Pre dvojicu (v, w) označme symbolmi (v_*, w_*) ich predinterakčné rýchlosti. Jakobián transformácie z (v, w) do (v_*, w_*) pomocou \mathfrak{C} označujeme $J(x, v; y, w)$, tj. $v = \mathfrak{C}(x, v_*; y, w_*)$, $w = \mathfrak{C}(x, v_*; y, w_*)$. (Predpokladáme, že zobrazenie \mathfrak{C} je invertovateľné.)

Operátor Q poskytuje stochastický opis interakcií deja medzi každou dvojicou jedincov. Preto je mezoskopické správanie popísané priemerovaním. Zaujímá nás hlavne interakčné pravidlo pre časticové modely (1.1) a (1.2), tj.

(C1)

$$\mathfrak{C}(x, v; y, w) = v + \eta[(\alpha - \beta|v|^2)v - \nabla U(|x - y|)],$$

(C2)

$$\mathfrak{C}(x, v; y, w) = [1 - \eta a(|x - y|)]v + \eta a(|x - y|)w,$$

kde $\eta > 0$ značí silu interakcie.

Vyhnúť sa Jakobiánu J môžeme uvažovaním slabej formulácie. Vezmeme rovnicu (1.3), prenásobíme ju testovaciu funkciou $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ a zintegrujeme podľa premennej v a y . Následne použitím Greenovej vety dostaneme slabú formuláciu.

Každú hustotu f nazveme slabé riešenie problému (1.3)-(1.4) s počiatočnou podmienkou $f_0(x, v)$ splňajúcu

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} f(x, v, t) \varphi(x, v) dv dx + \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} (v \cdot \nabla_x f(x, v, t)) \varphi(x, v) dv dx \\ & = \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} (\varphi(x, v_*) - \varphi(x, v)) f(x, v, t) f(y, w, t) dv dx dw dy \end{aligned} \quad (1.5)$$

pre $t > 0$ a každú funkciu $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ a takej, že

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x, v) f(x, v, t) dx dv = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} f_0(x, v) \varphi(x, v) dx dv. \quad (1.6)$$

Forma (1.5) je východisková forma na poznávanie evolúcie makroskopických veličín.

Taylorovým rozvojom funkcie $\varphi(x, v_*)$ v bode $(x, v_* - v)$ druhého rádu, využitím našich predpokladov (C1), resp. (C2) a za predpokladu $\eta \ll 1$, tj. sila interakcie je veľmi malá taká, že $\varepsilon\eta = \lambda$ je konštanta a $\varepsilon\eta^2 \ll 1$ (možno zanedbať členy 2. rádu), obdržíme operátor interakcie (aproximácia pravej strany rovnice (1.5)) tvaru

(Ak platí (C1))

$$\lambda \int_{\mathbb{R}^{4d}} \left(\nabla_v \varphi(x, v) \cdot [(\alpha - \beta|v|^2)v - \nabla U(|x - y|)] \right) f(x, v, t) f(y, w, t) dx dv dy dw$$

alebo
(Ak platí (C2))

$$\lambda \int_{\mathbb{R}^{4d}} \left(\nabla_v \varphi(x, v) \cdot (w - v) \right) a(|x - y|) f(x, v, t) f(y, w, t) dx dv dy dw.$$

Prechodom späť k silnej formulácii určíme tieto dve nelineárne rovnice:

Self-Propelling, Friction and Attraction-Repulsion Kinetic Model

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \lambda \left[(\nabla_x U * \rho) \cdot \nabla_v f - \nabla_v \cdot ((\alpha - \beta |v|^2) v f) \right], \quad (1.7)$$

kde

$$\rho(x, t) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x, v, t) dv \quad (1.8)$$

a $*$ je x -konvolúcia.

Cucker-Smaleho kinetický model flockingu

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \lambda \nabla_v \cdot [\xi(f) f], \quad (1.9)$$

kde

$$\xi(f)(x, v, t) = [(H(x) \nabla_v W(v)) * f] = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{K(v - w)}{(\sigma^2 + |x - y|^2)^\beta} f(y, w, t) dy dw,$$

$$W(v) = \frac{1}{2} |v|^2, \quad H(x) = a(|x|)$$

a $*$ je (x, v) -konvolúcia.

1.3 Hydrodynamické modely

Hlavnou nevýhodou kinetických modelov je to, že sú časovo náročné pre viac ako 4 dimenzie (dve pre pozíciu, dve pre rýchlosť). Problém dimezionality zredukujeme na problém makroskopických limít takých, že numerické simulácie sa stanú lepšie riešiteľné.

Podobne ako v kinetickej teórii sa budeme snažiť získať rovnice kontinuity počítaním evolúcie makroskopických veličín vychádzajúc z (1.7), resp. (1.9).

Makroskopické veličiny sú momenty rýchlosti z $f(x, v, t)$. Rýchlostné pole $u(x, t)$ so zložkami $u_i, i = 1, \dots, d$ a teplota $T(x, t)$ sú definované pre jednoatómový plyn ako

$$\rho u = \int_{\mathbb{R}^3} v f(x, v, t) dv$$

a

$$3\rho T = \int_{\mathbb{R}^3} |v - u|^2 f dv.$$

Integrovaním (1.7), resp. (1.9) podľa premennej v obdržíme rovnicu kontinuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) = 0.$$

Za predpokladu, že rozdelenie rýchlosti je *monokinetické*, a teda $f(x, v, t) = \rho(x, t)\delta(v - u(x, t))$ a teplota $T(x, t) = 0$, zintegrovaním (1.7)-(1.9) podľa v dostaneme druhý moment distribučnej funkcie. Obdržíme nasledujúce hydrodynamické systémy:

Hydrodymický model - Self-Propelling, Friction and Attraction-Repulsion

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) &= 0, \\ \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u u_i) &= \rho(\alpha - \beta|u|^2)u_i - \rho \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} * \rho \right).\end{aligned}$$

Cucker-Smaleho hydrodynamický model flockingu

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) &= 0, \\ \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u u_i) &= \int_{\mathbb{R}^d} H(x - y)\rho(x, t)\rho(y, t)[u_i(y, t) - u_i(x, t)]dy.\end{aligned}$$

1.4 Flocking pomocou Povzner-Boltzmannovej rovnice

V nasledujúcej časti je zhrnutý článok [12]. Pri jeho dôslednom študovaní sme našli chyby, ktoré sme následne aj opravili. Tieto opravy boli konzultované a uznané autormi tohto článku.

K odvodeniu hľadaných rovníc využijeme dôležitý výsledok z práce [16]. Jej autormi sú Lachowicz a Pulvirenti, ktorí dokázali zaujímavé spojenie medzi riešením Eulerových rovníc pre stlačiteľné prúdenie s riešením rovnice popisujúcej dynamiku systému častíc podstupujúcich elastické kolízie pri stochastickej vzdialenosti.

1.4.1 Povznerova rovnica

Uvažujme hustotu, rýchlosť a teplotu $\rho(x, t)$, $u(x, t)$ a $T(x, t)$, ktoré tvoria hladké riešenie Eulerových rovníc (do nejakého času t_0 , kým nevznikne nespojitosť) a skonštruujme Maxwellianovú funkciu \mathcal{M} , ktorej priemerná hustota, rýchlosť a teplota sú dané ako ρ , u a T

$$\mathcal{M}(x, v, t) = \frac{\rho(x, t)}{(2\pi T(x, t))^{3/2}} \exp\left(-\frac{|v - u(x, t)|^2}{2T(x, t)}\right). \quad (1.10)$$

Ďalej nech máme daný systém N častíc nachádzajúcich sa v bodoch x_1, x_2, \dots, x_N v oblasti \mathbb{R}^3 , ktoré sa pohybujú voľne až kým nejaký pár nepodľahne elastickej kolízii, tj.

$$v'_i = v_i - ((v_i - v_j) \cdot n_{ij})n_{ij}, \quad (1.11)$$

$$v'_j = v_j + ((v_i - v_j) \cdot n_{ij})n_{ij}, \quad (1.12)$$

kde

$$n_{ij} = \frac{x_i - x_j}{|x_i - x_j|}. \quad (1.13)$$

Vstupujúce rýchlosti pred kolíziou sú v_i, v_j také, že $(v_i - v_j) \cdot n_{ij} < 0$ a vystupujúce v'_i, v'_j . Každá binárna kolízia podlieha stochastickému zákonu. Časy kolízie pre každý pár i a j častíc sú nezávislé Poissonové procesy s intenzitou danou ako $\varphi(x_i, x_j, v_i, v_j) |(v_i - v_j) \cdot n_{ij}|$ a φ danou ako

$$\varphi(x_i, x_j, v_i, v_j) = \frac{3}{N\delta^3\varepsilon} \chi(|x_i - x_j| \leq \delta) \chi(|v_i - v_j| \leq \theta), \quad (1.14)$$

kde ε charakterizuje priemernú voľnú dráhu častíc a $\chi(I)$ je charakteristická funkcia podmnožiny I .

Vývoj systému častíc je popísaný pomocou N -časticových distribučných funkcií $f^N(x_1, v_1, \dots, x_N, v_N, t)$ udávajúcich hustotu pravdepodobnosti nájdania N častíc v bodoch x_1, x_2, \dots, x_N s rýchlosťami v_1, v_2, \dots, v_N v čase $t \geq 0$.

Nech s -časticových distribučných funkcií je definovaných pomocou marginálií

$$f^{N,s}(x_1, v_1, \dots, x_s, v_s) = \int f^N(x_1, v_1, \dots, x_N, v_N) dx_{s+1} dv_{s+1} \dots dx_N dv_N.$$

Potom podľa niektorých hypotéz na regularitu riešenia Eulerovov systém na časovom intervale $[0, t_0]$, dokázané [16], pre každé $\sigma > 0$ existujú $\varepsilon_0(\sigma)$, $\delta_0(\sigma, \varepsilon)$, $\theta_0(\sigma, \varepsilon, \delta)$ a $N_0(\sigma, \varepsilon, \delta, \theta)$ také, že vo vhodnej norme pre každé $\varepsilon \leq \varepsilon_0$, $\delta \leq \delta_0$, $\theta \geq \theta_0$ a $N \geq N_0$ platí

$$\sup_{t \in [0, t_0]} \|\mathcal{M} - f^{N,1}\| < \sigma,$$

kde $f^{N,1}$ je 1-časticová marginália odpovedajúca N -časticovej distribučnej funkcii $f^N(x_1, v_1, \dots, x_N, v_N, t)$ s počiatočnými podmienkami

$$f^{N,s}(x_1, v_1, \dots, x_s, v_s, t = 0) = \prod_{j=1}^s \mathcal{M}(0; x_j, v_j).$$

Analýza z [16] ukazuje, že pre $N \rightarrow \infty$ spĺňa 1-časticová marginália $f^{N,1} = f$ (elastickú) Povznerovú rovnicu [18]. Rovnice Povznerovho typu sú založené na integrácii kolízie (1.4) v Boltzmannovej rovnici (1.3).

Modifikovaný Povznerov operátor kolízie je nasledovný

$$\begin{aligned} Q_P(f, f)(x, v) & \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} B(x - y, v - w) (f(x, v_*) f(y, w_*) - f(x, v) f(y, w)) dw dy, \end{aligned} \quad (1.15)$$

kde B je jadro kolízie, pokiaľ (v_*, w_*) sú predkolízne rýchlosti, tzn. inverznej kolízie, ktorá generuje pár (v, w) . Vzťah medzi páru (v, w) a pokolíznych rýchlosti (v^*, w^*) je vyjadrený vzťahom

$$\begin{aligned} v^* &= (\mathbb{I} - \mathbb{A}(x - y))v + \mathbb{A}(x - y)w, \\ w^* &= \mathbb{A}(x - y)v + (\mathbb{I} - \mathbb{A}(x - y))w, \end{aligned}$$

kde $\mathbb{A}(\cdot)$ je matica 3×3 a \mathbb{I} je identická matica. V Povznerovej rovnici je matica taká, že hybnosť a energia sú zachované v kolízii. Zo zachovania energie $(v^*)^2 + (w^*)^2 = v^2 + w^2$ získame

$$2(\mathbb{A} - \mathbb{I})\mathbb{A}(v - w) = 0, \quad \forall v, w \in \mathbb{R}^3$$

alebo

$$\mathbb{A} = \mathbb{A}^2.$$

Zvoľme maticu \mathbb{A} hodnosti 1, vyjadrenú pomocou normálového vektoru $n = n(x - y) = \frac{x-y}{|x-y|}$ ako

$$\mathbb{A}(x - y) = n \cdot n^T.$$

Potom \mathbb{A} spĺňa $\mathbb{A} = \mathbb{A}^2$ a platí

$$v^* = v - (v - w) \cdot n(x - y)n(x - y), \quad (1.16)$$

$$w^* = w + (v - w) \cdot n(x - y)n(x - y). \quad (1.17)$$

V práci [16] bolo dokázané, že v prítomnosti stochastického zákona pre binárne interakcie, ak sú častice na počiatku identicky a nezávislo rozdelené podľa distribučnej hustoty $F = F(x, v)$, tak neskôr sú identicky a nezávisle rozdelené v závislosti na riešení kinetickej rovnice (1.3) s kolíznym integrálom daným Povznerovým operátorom (1.15) s počiatočnou hodnotou $f_0 = F$ a funkciou

$$B(x - y, v - w) = \frac{1}{2\delta^3\varepsilon} \chi(|x - y| < \delta) \chi(|v - w| < \theta) |(v - w) \cdot n|, \quad (1.18)$$

kde δ a θ sú pozitívne konštanty a $\chi(E)$ označuje charakteristickú funkciu na množine $E \subset \mathbb{R}^3$.

1.4.2 Disipatívna korekcia

Cucker a Smale v práci [7] navrhli model pre popis populácie N jedincov, ktorých interakcia závisí na ich relatívnej pozícii. Vytvárajú jednotlivé profily s časom, ako krdle vtákov, v ktorých všetky vtáky lietajú s rovnakou rýchlosťou blízko pri sebe. V [7] hlavná hypotéza ktorá odôvodňuje dlhodobé správanie populácie je, že každý vták prispôsobuje rýchlosť pridaním váženého priemerného rozdielu jeho rýchlostí s ostatnými. To znamená, že pre danú populáciu k vtákov platí pre i -tého vtáka

$$v_i^* - v_i = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k a_{ij}(v_j - v_i), \quad (1.19)$$

kde váhy $a_{ij} \geq 0$ kvalifikujú ako sa vtáky navzájom ovplyvňujú. V tomto istom článku sa predpokladá, že tento vplyv je funkcia závislá na vzdialenosti medzi vtákmi a daná ako

$$a_{ij} = \frac{K}{(\lambda + |x_i - x_j|^2)^\beta}$$

pre nejaké pevné $K, \lambda > 0$ a $\beta \geq 0$.

Rovnicu (1.19) možno preformulovať i inak (podľa (1.16)). Predpokladajme pre jednoduchosť, že máme populáciu zahrňujúcu len dva vtáky, i a j . Potom ich rýchlosti sú modifikované vzťahom (1.19) do tvaru

$$v_i^* = (1 - a_{ij})v_i + a_{ij}v_j, \quad (1.20)$$

$$v_j^* = a_{ij}v_i + (1 - a_{ij})v_j. \quad (1.21)$$

Hybnosť sa zachováva po interakcii tak, aby

$$v_i^* + v_j^* = v_i + v_j,$$

ale energia sa zvyšuje alebo znižuje v závislosti na hodnote a_{ij}

$$(v_i^*)^2 + (v_j^*)^2 = v_i^2 + v_j^2 - 2a_{ij}(1 - a_{ij})(v_i - v_j)^2.$$

Ak $a_{ij} < 1$, energia je *disipatívna*. V tomto prípade relatívne rýchlosti sa znižujú pokiaľ

$$|v_i^* - v_j^*| = |1 - 2a_{ij}||v_i - v_j| < |v_i - v_j|$$

a rýchlosti dvoch vtákov sa prikláňa k strednej rýchlosti $(v_i + v_j)/2$.

Vo všeobecnom prípade populácie k vtákov, binárny zákon (1.20) uvažovaný spolu s predpokladom, že i -tý vták upravuje svoju rýchlosť, dáva rovnaké váhy všetkým ostatným rýchlostiam. V dôsledku toho

$$v_i^* = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k (1 - a_{ij})v_i + a_{ij}v_j,$$

čo je iná cesta k interpretácii vzťahu (1.19). Teda vzťah (1.19) možno získať uvažovaním len binárnych interakcií.

Uvažujme špeciálnu voľbu a_{ij} v binárnej interakcii dvoch jedincov (x, v) a (y, w) takej, že a_{ij} závisí na $|x - y|$. Konkrétne, a_{ij} je dané pomocou koeficientu interakcie $0 < e(|x - y|) < 1$, ktorý súvisí so zložkami rýchlosti jedincov pred a po interakcii. Predpokladajme, že príspevok interakčných rýchlosti (v^*, w^*) je

$$(v^* - w^*) \cdot \frac{x - y}{|x - y|} = -e(|x - y|)(v - w) \cdot \frac{x - y}{|x - y|}.$$

Pomocou tohto vzťahu a predpokladu platnosti zákona hybnosti, nájdeme zmenu rýchlosti interagujúcich jedincov ako

$$v^* = v - \frac{1}{2}(1 + e)((v - w) \cdot n)n, \quad (1.22)$$

$$w^* = w + \frac{1}{2}(1 + e)((v - w) \cdot n)n, \quad (1.23)$$

kde $n = n(x - y) = \frac{x - y}{|x - y|}$. V prípade (konzervatívnej) interakcie Povznerovho typu spĺňa (1.11-1.12) máme $e = 1$. V tomto prípade pár (v^*, w^*) zachováva energiu páru (v', w')

$$v' = v - \frac{1}{2}((v - w) \cdot n)n,$$

$$w' = w + \frac{1}{2}((v - w) \cdot n)n.$$

Pre disipatívne interakciu e klesá s rastúcim stupňom disipácie. Zvoľme

$$e(|x - y|) = 1 - 2\gamma a(|x - y|), \quad (1.24)$$

kde $a(|x - y|)$ je dané ako

$$a(|x - y|) = \frac{K}{(\lambda + |x - y|^2)^\beta}.$$

1.4.3 Model Boltzmannovho typu pre disipatívne interakcie

Pokiaľ uvažujeme pravidlo (1.22), jednočasticová distribučná funkcia $f(x, v, t)$, uvažovaná v práci [16], v prítomnosti veľkého počtu jedincov ($N \rightarrow \infty$) spĺňa rovnicu Povznerovho typu pre disipatívne interakcie

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \bar{Q}_P(f, f)(x, v, t), \quad (1.25)$$

kde \bar{Q}_P je teraz *disipatívny kolízny operátor*, ktorý popisuje zmenu vo funkcií hustoty pomocou vytvorenia a zníženia rýchlosti jedincov v binárnych interakciách. Platí

$$\begin{aligned} & \bar{Q}_P(f, f)(x, v, t) \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} B(|x - y|) \left(\Gamma(|x - y|) f(x, v_*) f(y, w_*) - f(x, v) f(y, w) \right) dw dy. \end{aligned}$$

Hodnoty (v_*, w_*) sú predinterakčné rýchlosti. Faktor Γ je

$$\Gamma(|x - y|) = e(|x - y|)^{-1}.$$

Funkcia $B(\tau)$ reprezentuje *funkciu miery kolízie*, ktorá udáva pravdepodobnosť, že kolízia medzi jedincami sa deje vo vzdialenosti τ .

Teraz budeme postupovať podobne ako v kapitole (1.2.1), kde sme uvažovali slabú formuláciu. Opäť uvažujme hladkú testovaciu funkciu $\psi(v)$ a pre jednoduchosť sa zaoberajme len pravou stranou rovnice (1.25). Platí

$$\begin{aligned} \langle \psi, \bar{Q}_P(f, f)(x, v) \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \psi(v) \bar{Q}_P(f, f)(x, v) dv \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} B(|x - y|) (\psi(v^*) - \psi(v)) f(x, v) f(y, w) dv dw dy. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Nech (v', w') sú pointerakčné rýchlosti v Povznerovej elastickej interakcii s (v, w) . Označme ako q relatívnu rýchlosť, $q = v - w$. Potom

$$\begin{aligned} v' &= v - (q \cdot n)n \\ w' &= w + (q \cdot n)n, \end{aligned}$$

kde je $n = n(x - y) = \frac{x - y}{|x - y|}$. Obdržíme

$$\begin{aligned} v^* &= v' + \frac{1}{2}(1 - e)(q \cdot n)n, \\ w^* &= w' - \frac{1}{2}(1 - e)(q \cdot n)n. \end{aligned}$$

Ak predpokladáme, že e spĺňa vzťah (1.24), potom

$$v^* - v' = \gamma a(|x - y|)(q \cdot n)n.$$

Uvažujme Taylorov rozvoj funkcie $\psi(v^*)$ v bode v' . Dostaneme

$$\begin{aligned} \psi(v^*) &= \psi(v') + \gamma a(|x - y|) \nabla \psi(v') \cdot (q \cdot n)n \\ &+ \frac{1}{2} \gamma^2 a(|x - y|)^2 \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \psi(v')}{\partial v'_i \partial v'_j} (q \cdot n)^2 n_i n_j + \dots \end{aligned} \quad (1.27)$$

Ak interakcie sú skoro elastické, $\gamma \ll 1$, zaokrúhlime rozvoj (1.27) po člen prvého rádu. Dosadením (1.27) do (1.26) máme

$$\begin{aligned} \langle \psi, \bar{Q}_P(f, f) \rangle &\approx \frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} B(|x-y|) \left(\psi(v') - \psi(v) \right. \\ &\quad \left. + \gamma \nabla \psi(v') \cdot a(|x-y|)(q \cdot n)n \right) f(x, v) f(y, w) dv dw dy \\ &= \langle \psi, \mathcal{Q}_P \rangle + \gamma \langle \psi, \mathcal{F}(f, f) \rangle. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Operátor \mathcal{Q}_P je operátor Povznerovej kolízie, pokiaľ v' reprezentuje pointerakčnú rýchlosť pri elastickej interakcii.

Definujme

$$b(|x-y|) = B(|x-y|)a(|x-y|).$$

Operátor \mathcal{F} je operátor disipatívnej interakcie tvaru

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(f, f)(x, v, t) \\ = \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{div}_v \left(\int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} n(q \cdot n) b(|x-y|) f(x, v', t) f(y, w', t) dw dy \right). \end{aligned} \quad (1.29)$$

Prechodom k silnej formulácii s aproximáciou (1.28) získame túto *disipatívnu Povznerovú rovnicu*

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f \right) (x, v, t) = \mathcal{Q}_P(f, f)(x, v, t) + \gamma \mathcal{F}(f, f)(x, v, t),$$

kde \mathcal{Q}_P je klasický elastický Povznerov kolízny operátor a \mathcal{F} je operátor disipatívneho nelineárneho trenia, ktorý je založený na elastickej interakcii medzi jedincami.

1.4.4 Vlastnosti nelineárneho operátora trenia

V tejto časti popíšeme niektoré dôležité vlastnosti nelineárneho operátora trenia \mathcal{F} definovaného v (1.28). Ak zvolíme $\psi = 1$, dostaneme

$$\langle 1, \mathcal{F}(f, f) \rangle = 0. \quad (1.30)$$

Voľbou $\psi = v_i$ a využitím toho, že $\nabla \psi(v') \cdot n = n_i$, obdržíme

$$\langle v, \mathcal{F}(f, f) \rangle = \frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} nb(|x-y|)(u(x, t) - u(y, t)) \cdot n \rho(x, t) \rho(y, t) dy. \quad (1.31)$$

Vo vzťahu (1.31) označujú funkcie $\rho(x, t)$ a $u(x, t)$ *lokálnu hustotu* a *celkovú rýchlosť*. Platí pre ne

$$\rho(x, t) = \int_{\mathbb{R}^3} f(x, v, t) dv, \quad u(x, t) = \frac{1}{\rho(x, t)} \int_{\mathbb{R}^3} v f(x, v, t) dv. \quad (1.32)$$

Voľbou $\psi = v^2$ a použitím $v' \cdot n = w \cdot n$, dostaneme

$$\begin{aligned} \langle v^2/2, \mathcal{F}(f, f) \rangle &= \frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} b(|x-y|) \rho(x, t) \rho(y, t) n \cdot u(x, t) n \cdot u(y, t) dy \\ &\quad - \frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} b(|x-y|) |w \cdot n|^2 f(y, w, t) dw dy. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Na rozdiel od rovnice (1.31) ktorú možno vyjadriť pomocou makroskopických veličín, u rovnice (1.33) to vo všeobecnom prípade nejde. Je to možné ale v prípade, pokiaľ je hustota $f(x, v, t)$ *izotropická* v rýchlosti, tj. $f(x, v, t) = f(x, |v|, t)$. Potom

$$\int_{\mathbb{R}^3} |v \cdot n|^2 f(x, v, t) dv = \frac{1}{3} \int_{\mathbb{R}^3} |v|^2 f(x, v, t) dv$$

a

$$\int_{\mathbb{R}^3} |v|^2 f(x, v, t) dv = \rho(x, t) |u(x, t)|^2 + 2\rho(x, t) e(x, t),$$

kde $e(x, t)$ je vnútorná energia odpovedajúca jednotke hmotnosti daná ako

$$e(x, t) = \frac{3}{2} T(x, t) = \frac{1}{2\rho(x, t)} \int_{\mathbb{R}^3} |v - u(x, t)|^2 f(x, v, t) dv.$$

Zmenou premenných $v \leftrightarrow w$ a v rovnakom čase aj $x \leftrightarrow y$ máme $v' \leftrightarrow w'$, $n \leftrightarrow -n$. Preto

$$\int_{\mathbb{R}^3} \langle v^2/2, \mathcal{F}(f, f) \rangle dx \leq 0,$$

tj. nelineárny operátor trenia je *globálne disipatívny*. Pokiaľ Maxwellian $\mathcal{M} = \mathcal{M}(x, v, t)$ definovaný v (1.10) je izotropická funkcia v rýchlosti, obdržíme

$$\begin{aligned} & \langle v^2/2, \mathcal{F}(\mathcal{M}, \mathcal{M}) \rangle & (1.34) \\ & = \frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} b(|x - y|) \rho(x, t) \rho(y, t) \left[n \cdot u(x, t) n \cdot u(y, t) - \left(\frac{1}{3} |u(y, t)|^2 + T(y, t) \right) \right] dy. \end{aligned}$$

1.5 Eulerové rovnice

Podľa výsledku z práce [16] vieme, že riešenie (1.3) je dobre aproximované pomocou Maxwellianovej funkcie \mathcal{M} , ktorej momenty spĺňajú Eulerov systém. Substitúciou tejto Maxwellianovej funkcie do (1.4), môže byť vypočítaná pravá strana presne použitím (1.31) a (1.34).

Uvažujme slabú formuláciu disipatívnej Boltzmann- Povznerovej rovnice

$$\left\langle \varphi, \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f \right\rangle = \left\langle \varphi, \mathcal{Q}_P(f, f)(x, v, t) + \frac{\gamma}{\varepsilon} \mathcal{F}(f, f)(x, v, t) \right\rangle.$$

Testujme $1, v, v^2/2$ a využime vzťahy (1.30), (1.31) a (1.34). Položme $f = \mathcal{M}$ a predpokladáme, že $\frac{\gamma}{\varepsilon} \rightarrow \lambda$. Obdržíme nasledujúce Eulerove rovnice

Model flockingu popísaný stlačiteľnými Eulerovými rovnicami s korekciou pravej strany

Model flockingu popísaný Eulerovými rovnicami s korekciou pravej strany je systém rovníc

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \\ & \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u u_i + \rho T e_i) = \lambda \mathcal{A}_i(\rho, u), \quad i = 1, 2, 3, \\ & \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left(\frac{3}{2} T + \frac{|u|^2}{2} \right) \right) + \operatorname{div} \left(\rho u \left(\frac{|u|^2}{2} + \frac{5}{2} T \right) \right) = \lambda \mathcal{B}(\rho, u, T), \end{aligned}$$

kde e_i je i -tá zložka jednotkového vektoru e . Veličiny $\rho(x, t)$, $u(x, t)$ a $T(x, t)$ označujú po rade hustotu, celkovú rýchlosť a teplotu.

Funkcie \mathcal{A}_i a \mathcal{B} sú dané vzťahmi

$$\mathcal{A}_i(\rho, u)(x, t) = \int_{\mathbb{R}^3} nb(|x - y|)(u(x, t) - u(y, t)) \cdot n\rho(x, t)\rho(y, t)dy,$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{B}(\rho, u, T)(x, t) \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} b(|x - y|)\rho(x, t)\rho(y, t) \left[n \cdot u(x, t)n \cdot u(y, t) - \left(\frac{|u(y, t)|^2}{3} + T(y, t) \right) \right] dy, \end{aligned}$$

kde

$$n = n(x - y) = \frac{x - y}{|x - y|}.$$

Funkcia $b(|x|)$ je tvaru

$$b(|x|) = \frac{K}{(\lambda + |x|^2)^{\beta+1}}, \quad (1.35)$$

kde $K > 0$, $\lambda > 0$, $\beta > 0$ sú dané konštanty.

1.5.1 Jednorozmerný model

Vzhľadom k náročnosti problému numericky riešime len jednorozmerný model. Otázna je správna formulácia. Rôznymi úvahmi sme dospeli k rôznym voľbám posledného člena \mathcal{B} . Zavádzame preto funkciu var_k , $k = 1, 2$ a to nasledovne:

Ak $k = 1$:

$$var_1(y, t) = 2E(y, t) = \rho(y, t) \left(3T(y, t) + u^2(y, t) \right). \quad (1.36)$$

Ak $k = 2$:

$$var_2(y, t) = \frac{2E(y, t)}{3} + \frac{2\rho(y, t)u^2(y, t)}{3} = \rho(y, t) \left(T(y, t) + u^2(y, t) \right). \quad (1.37)$$

Autori článku nám vysvetlili, že správna varianta podľa ich odvodenia je druhá varianta, tj. $var_2(y, t)$. Zaujímavé je však sledovať riešenie pre oba prípady. Preto v numerickej časti budeme uvádzať aj riešenia, ktoré sme obdržali pre prvú variantu (nie však tak dopodrobna ako pre funkciu var_2).

2. Nespojité Galerkinová metóda

V prvej kapitole sme odvodili rovnice popisujúce flocking. Rovnice majú tvar odpovedajúci popisu nevazkých tekutín, tzv. Eulerových rovníc, avšak s nenulovou pravou stranou. Eulerové rovnice sú vďaka homogenite vektorových funkcií a hyperbolicite prepisateľné do tvaru hyperbolickej kvazilineárnej parciálnej diferenciálnej rovnice prvého rádu. Tie sú zložité na numerické riešenie, pretože ich riešenie je typicky nespojité.

Nespojitá Galerkinová metóda je veľmi výhodná na numerické riešenie problémov, v ktorých sú očakávané nespojitosti. Vychádza z metódy konečných objemov a metódy konečných prvkov.

Metóda konečných objemov bola odvodená pre hyperbolicke problémy. Jej hlavná nevýhoda je, že nedosahuje vysokého rádu presnosti bez komplikovaných rekonštrukčných procedúr. Aproximuje sa len po častiach konštatnými funkciami. Túto nevýhodu môžeme odstrániť jej kombináciou s metódou konečných prvkov, ktorou môžeme dosiahnuť vyššieho rádu presnosti.

V tejto kapitole pomocou nespojitej Galerkinovej metódy diskretizujeme rovnice popisujúce flocking, ktoré sme odvodili v predchádzajúcej kapitole. Ich tvar v 1D je nasledovný

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u^2 + p) = \lambda \mathcal{A}(\rho, u), \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}\left(u(E + p)\right) = \lambda \mathcal{B}(\rho, u, T), \quad (2.3)$$

kde je ρ hustota, u rýchlosť a T teplota. Funkcie z pravej strany \mathcal{A} a \mathcal{B} sú dané vzťahmi

$$\mathcal{A}(\rho, u)(x, t) = \int_{\mathbb{R}} b(|x - y|) \left(u(x, t) - u(y, t) \right) \rho(x, t) \rho(y, t) dy,$$

$$\mathcal{B}(\rho, u, T)(x, t) = \int_{\mathbb{R}} b(|x - y|) \rho(x, t) \left(\rho(y, t) u(x, t) u(y, t) - \operatorname{var}_k(y, t) \right) dy,$$

kde funkcia var_k daná jedným zo vzťahov (1.36) alebo (1.37). Energia E a tlak p spĺňajú

$$\begin{aligned} E &= \rho \left(\frac{3}{2} T + \frac{u^2}{2} \right), \\ p &= \rho T. \end{aligned}$$

2.1 Systém Eulerových rovníc

Nech $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \{1, 2, 3\}$, je ohraničená oblasť s Lipschitzovsky spojitou hranicou a $T > 0$. Systém Eulerových rovníc vychádzajúci zo zákonov zachovania,

popisujúci prúdenie stlačiteľného neviskozného ideálneho plynu má tvar

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{s=1}^d \frac{\partial f_s(w)}{\partial x_s} = 0 \quad \text{v } Q_T = \Omega \times (0, T), \quad (2.4)$$

kde

$$\begin{aligned} w &= (\rho, \rho v_1, \dots, \rho v_d, E)^T \in \mathbb{R}^{d+2}, \\ f_s(w) &= (f_{s1}(w), \dots, f_{s(d+2)}(w))^T \\ &= (\rho v_s, \rho v_1 v_s + \delta_{1s} p, \rho v_2 v_s + \delta_{2s} p, \dots, \rho v_d v_s + \delta_{ds} p, (E + p)v_s)^T. \end{aligned}$$

Jednotlivé neznáme sú:

$\rho(x, t)$ hustota, $p(x, t)$ tlak, $v(x, t) = (v_1(x, t), \dots, v_d(x, t))^T$ vektor rýchlosti a $E(x, t)$ celková energia.

Celkovo máme $d + 3$ neznámych o $d + 2$ rovníc. Systém dourčíme stavovou rovnicou

$$p = (\gamma - 1) \left(E - \frac{\rho |v|^2}{2} \right),$$

kde $\gamma = c_p/c_V > 1$ je Poissonová adiabatická konštanta.

Funkcie f_s , $s = 1, \dots, d$ nazývame neviskózne Eulerové toky. Platí $f_s \in C^1(D)^{d+2}$, kde $D \subset \mathbb{R}^{d+2}$ je otvorená množina vektorov $w = (w_1, w_2, \dots, w_{d+2})^T$ taká, že odpovedajúca hustota a tlak sú kladné:

$$D = \left\{ w = \left(\rho, \rho v_1, \dots, \rho v_d, \frac{p}{\gamma - 1} + \sum_{i=2}^{d+1} \frac{w_i^2}{2w_1} \right)^T \in \mathbb{R}^{d+2}; \rho > 0, p > 0 \right\}.$$

Kvôli časovej závislosti a ohraničenosti Ω v (2.4) je nutné predpísať počiatočnú a okrajovú podmienku

$$\begin{aligned} w(x, 0) &= w^0(x), \quad x \in \Omega, \\ B(w) &= 0, \quad \text{v } \partial\Omega \times (0, T), \end{aligned}$$

kde $w^0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ je daná funkcia a B je daný operátor. Čo sa týka okrajových podmienok, nebudeme zachádzať do podrobností, pretože v modely flockingu budeme uvažovať najjednoduchšie periodické okrajové podmienky.

2.2 Niektoré dôležité vlastnosti Eulerových rovníc

Predpokladajme, že $w \in (C^1(Q_T))^{d+2}$. Potom je systém (2.4) prepísateľný na kvazilineárnu parciálnu diferenciálnu rovnicu prvého rádu v tvare

$$\mathbb{A}_0(w) \frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{s=1}^d \mathbb{A}_s(w) \frac{\partial w}{\partial x_s} = 0,$$

kde \mathbb{A}_s , $s = 1, \dots, d$ je Jakobiho matica typu $(d + 2) \times (d + 2)$ zobrazenia f_s sú definované pre každé $w \in D$

$$\mathbb{A}_s(w) = \frac{Df_s(w)}{Dw}, \quad s = 1, \dots, d$$

a $\mathbb{A}_0(w) = \mathbb{I}$ je jednotková matica typu $(d+2) \times (d+2)$.

Eulerové rovnice spĺňajú tri dôležité vlastnosti

- homogenita vektorových funkcií,
- hyperbolicita,
- rotačná invariantnosť v $d = 3$.

Prvá vlastnosť sa dá formálne vyjadriť ako

$$f_s(\alpha w) = \alpha f_s(w), \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad \alpha \neq 0, \quad s = 1, \dots, d.$$

Z tejto vlastnosti možno dostať aj iný dôležitý vzťah

$$f_s(w) = \mathbb{A}_s(w)w, \quad s = 1, \dots, d.$$

Nech je $n = (n_1, n_2, \dots, n_d)^T \in \mathbb{R}^d$ vektor spĺňajúci $|n| = 1$. Potom definujeme

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(w, n) &:= \sum_{s=1}^d \mathbb{A}_s(w)n_s, \\ P(w, n) &:= \sum_{s=1}^d f_s(w)n_s. \end{aligned}$$

Druhá vlastnosť Eulerových rovníc (hyperbolicita) hovorí, že pre takéto n je matica $\mathbb{P}(w, n)$ diagonalizovateľná s reálnymi vlastnými číslami, tj. existuje matica $\mathbb{T}(w, n) \in \mathbb{R}^{d+2, d+2}$ a $(\lambda_1, \dots, \lambda_d) \in \mathbb{R}^d$ také, že

$$\mathbb{P}(w, n) = \mathbb{T} \mathbb{D} \mathbb{T}^{-1}, \quad \mathbb{D}(w, n) = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{d+2}).$$

a vlastné čísla sú

$$\lambda_1 = u - a, \quad \lambda_2 = \dots = \lambda_{d+1} = u, \quad \lambda_{d+2} = u + a,$$

kde a je rýchlosť zvuku spĺňajúca

$$a = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}.$$

V jednej dimenzii má Jakobiho matica tvar

$$\mathbb{A}(w) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{\gamma-3}{2}u^2 & (3-\gamma)u & \gamma-1 \\ \frac{\gamma-2}{2}u^3 - \frac{a^2u}{\gamma-1} & \frac{3-2\gamma}{2}u^2 + \frac{a^2}{\gamma-1} & \gamma u \end{pmatrix},$$

kde u je rýchlosť a matica \mathbb{T} má tvar

$$\mathbb{T}(w) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ u-a & u & u+a \\ \frac{u^2}{2} + \frac{a^2}{\gamma-1} - ua & \frac{u^2}{2} & \frac{u^2}{2} + \frac{a^2}{\gamma-1} + ua \end{pmatrix}.$$

Odpovedajúce vlastné vektory v jednej dimenzii k vlastným číslam $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ sú stĺpce matice \mathbb{T}

$$\begin{aligned} r_1 &= \left(1, u - a, \frac{u^2}{2} + \frac{a^2}{\gamma - 1} - ua \right)^T, \\ r_2 &= \left(1, u, \frac{u^2}{2} \right)^T, \\ r_3 &= \left(1, u + a, \frac{u^2}{2} + \frac{u^2}{2} + \frac{a^2}{\gamma - 1} + ua \right)^T. \end{aligned}$$

Rotačná invariantnosť hovorí, že afinnou transformáciou kartézskych súradníc sa Eulerové rovnice formálne nezmenia.

Bližšie informácie a odvodenie týchto vlastností možno nájsť v [11, 22, 24].

2.2.1 Flocking v tvare Eulerových rovníc v 1D

Systém rovníc (2.1)-(2.3) možno zapísať nasledovne

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial f(w)}{\partial x} = g(w) \quad \text{v } Q_T = \Omega \times (0, T), \quad (2.5)$$

$$w(x, 0) = w^0(x), \quad x \in \Omega, \quad (2.6)$$

$$B(w) = 0, \quad \text{v } \partial\Omega \times (0, T), \quad (2.7)$$

kde ľavá strana v rovnici (2.5) má tvar Eulerových rovníc a pravá strana je $g(w)(x, t) = \lambda(0, \mathcal{A}, \mathcal{B})^T$. Tlak a energia spĺňajú

$$\begin{aligned} p &= \rho T, \\ E &= \rho \left(\frac{u^2}{2} + \frac{3}{2} T \right). \end{aligned}$$

Poissonová adiabatická konštanta je v tomto prípade $\gamma = 5/3$ (hodnota pre jednoatómový plyn).

2.3 Diskretizácia problému

Teraz popíšeme diskretizáciu Eulerových rovníc nespojitou Galerkinovou metódou pre $d \in \{1, 2, 3\}$. Nech \mathcal{T}_h je triangulácia uzáveru oblasti Ω na konečný počet elementov K s navzájom disjunktnými vnútrajškami. Platí

$$\bar{\Omega} = \overline{\cup_{K \in \mathcal{T}_h} K}.$$

Pre element K budeme označovať jeho hranicu ako ∂K a jeho mieru $|K|$ (plocha v 2D, objem v 3D). Ďalej budeme označovať $h_K = \text{diam}(K)$ a $h = \max_{K \in \mathcal{T}_h} h_K$. O dvoch elementoch $K, K' \in \mathcal{T}_h$ budeme hovoriť ako o susedoch, ak $|\partial K \cap \partial K'| > 0$ (v tomto prípade $|\cdot|$ značí $(d-1)$ -dimenzionálnu mieru).

V \mathbb{R}^3 budeme stenou (resp. uzlom v \mathbb{R} alebo hranou v \mathbb{R}^2) $\Gamma \subset K$ nazývať maximálnu súvislú otvorenú podmnožinu množiny $\partial K \cap \partial K'$, kde K' je sused K alebo $\partial K \cap \partial\Omega$. Steny rozdelíme na dve množiny

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_h^I &= \{\Gamma \in \mathcal{F}_h; \Gamma \subset \Omega\}, \\ \mathcal{F}_h^B &= \{\Gamma \in \mathcal{F}_h; \Gamma \subset \partial\Omega\}. \end{aligned}$$

Prvá množina reprezentuje množinu všetkých vnútorných stien a druhá predstavuje steny ležiace na hranici výpočetnej oblasti. Ich zjednotenie budeme značiť \mathcal{F}_h .

Pre každú stenu definujeme normálu n_Γ a to tak, že pre $\Gamma \in \mathcal{F}_h^I$ je jej orientácia ľubovoľná, ale pevná, a pre $\Gamma \in \mathcal{F}_h^B$ má rovnakú orientáciu ako vonkajšia normála k hranici $\partial\Omega$.

Pre každú stenu $\Gamma \in \mathcal{F}_h^I$ existujú dva elementy $K_\Gamma^{(L)}, K_\Gamma^{(R)} \in \mathcal{T}_h$ také, že $\Gamma \subset K_\Gamma^{(L)} \cap K_\Gamma^{(R)}$. Budeme predpokladať, že n_Γ je vonkajšia normála „ľavého“ elementu $K_\Gamma^{(L)}$ a vnútorná normála „práveho“ elementu $K_\Gamma^{(R)}$.

Nad touto trianguláciou definujeme tzv. *broken Sobolev space*

$$H^k(\Omega, \mathcal{T}_h) = \{v \in L^2(\Omega); v|_K \in H^k(K) \forall K \in \mathcal{T}_h\}$$

so seminormou

$$|v|_{H^k(\Omega, \mathcal{T}_h)} = \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} |v|_{H^k(K)}^2 \right)^{1/2},$$

kde $H^k(K)$ je štandardný Sobolevov priestor.

Pre $v \in H^1(\Omega, \mathcal{T}_h)$ a $\Gamma \in \mathcal{F}_h^I$ definujeme

$$\begin{aligned} v|_\Gamma^{(L)} &= \text{stopa } v|_{K_\Gamma^{(L)}} \text{ na } \Gamma, \\ v|_\Gamma^{(R)} &= \text{stopa } v|_{K_\Gamma^{(R)}} \text{ na } \Gamma, \\ \langle v \rangle_\Gamma &= \frac{1}{2}(v|_\Gamma^{(L)} + v|_\Gamma^{(R)}), \text{ priemer stôp } v \text{ na } \Gamma, \\ [v]_\Gamma &= v|_\Gamma^{(L)} - v|_\Gamma^{(R)}, \text{ skok stôp } v \text{ na } \Gamma. \end{aligned}$$

Pre $\Gamma \in \mathcal{F}_h^B$, $K_\Gamma^{(L)} \in \mathcal{T}_h$ a $v \in H^1(\Omega, \mathcal{T}_h)$

$$v_\Gamma = [v]_\Gamma = \langle v \rangle_\Gamma = v|_\Gamma^{(R)} = v|_\Gamma^{(L)} = \text{stopa } v|_{K_\Gamma^{(L)}} \text{ na } \Gamma.$$

Pokiaľ vo výraz typu $[\cdot]_\Gamma$, $\langle \cdot \rangle_\Gamma$ vyskytne v integráloch, pre jednoduchosť vynecháme index Γ a budeme písať napríklad $\int_{\mathcal{F}_h^I} [w][\varphi] dS$.

Definujme priestor nespojitých po častiach polynomiálnych funkcií

$$S_{hp} = \{v \in L^2(\Omega); v|_K \in P^p(K) \forall K \in \mathcal{T}_h\},$$

kde $P^p(K)$ je priestor všetkých polynómov na K stupňa najviac p . Aproximujúce riešenie budeme hľadať v tomto priestore.

Teraz odvodíme vhodnú slabú formuláciu Eulerových rovníc v zmysle priestoru $[H^1(\Omega, \mathcal{T}_h)]^{d+2}$.

Nech w je klasické riešenie problému (2.5). Skalárnym prenasobením rovnice (2.5) ľubovoľnou funkciou $\varphi \in [H^1(\Omega, \mathcal{T}_h)]^{d+2}$, zintegrovaním cez element $K \in \mathcal{T}_h$ a použitím Greenovej vety dostaneme

$$\int_K \frac{\partial w}{\partial t} \cdot \varphi dx + \int_{\partial K} \sum_{s=1}^d f_s(w) n_s^K \cdot \varphi dS - \int_K \sum_{s=1}^d f_s(w) \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx = \int_K g(w) \cdot \varphi dx,$$

kde n_s^K je vonkajšia jednotková normála na ∂K . Sčítaním cez všetky elementy $K \in \mathcal{T}_h$ a preusporiadaním hraničných členov obdržíme

$$\int_{\Omega} \frac{\partial w}{\partial t} \cdot \varphi dx + \int_{\mathcal{F}_h} \sum_{s=1}^d f_s(w) n_s \cdot [\varphi] dS - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^d f_s(w) \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx = \int_{\Omega} g(w) \cdot \varphi dx. \quad (2.8)$$

Podobne ako v metóde konečných objemov aproximujeme fyzikálny tok $\sum_{s=1}^d f_s(w) n_s$ numerickým tokom $H(w^{(L)}, w^{(R)}, n)$

$$\int_{\Gamma} \sum_{s=1}^d f_s(w) n_s \cdot [\varphi] dS \approx \int_{\Gamma} H(w^{(L)}, w^{(R)}, n) [\varphi] dS.$$

Voľbu numerického toku a jeho vlastnosti popíšeme neskôr.

Označme

$$b_h(w, \varphi) = \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h} \int_{\Gamma} H(w^{(L)}, w^{(R)}, n) [\varphi] dS - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^d f_s(w) \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx$$

a pravú stranu

$$l_h(w, \varphi) = - \int_{\Omega} g(w) \cdot \varphi dx.$$

Definícia 2.3.1. Hovoríme, že w_h je DGM riešenie problému (2.5)-(2.7), ak

- $w_h \in C^1([0, T]; S_{hp})$,
- $\frac{d}{dt}(w_h(t), \varphi_h) + b_h(w_h(t), \varphi_h) + l_h(w_h, \varphi_h) = 0, \forall \varphi_h \in S_{hp}, \forall t \in (0, T)$,
- $w_h(0) = w_h^0$,

kde w_h^0 je S_{hp} aproximácia počiatočnej podmienky w^0 .

2.3.1 Numerické toky

V predchádzajúcej časti sme aproximovali fyzikálny tok numerickým tokom podobne ako v metóde konečných objemov.

Predpokladáme, že *numerický tok* H má nasledujúce vlastnosti:

- $H(u, v, n)$ je definovaný a *spojitý* na $D \times D \times B_1$, kde D je definičný obor tokov f_s a $B_1 = \{n \in \mathbb{R}^d; |n| = 1\}$.
- H je *konzistentný*

$$H(u, u, n) = P(u, n) = \sum_{s=1}^d f_s(u) n_s.$$

- H je *konzervatívny*

$$H(u, v, n) = -H(v, u, -n), \quad u, v \in D, n \in B_1.$$

Numerické toky spĺňajúce tieto vlastnosti sú napr. Lax-Friedrichs, Godunov, Roe, Osher-Solomon, atď. My budeme používať Vijayasundaramov numerický tok, ktorý sa veľmi dobre osvedčil v kontextu nespojitej Galerkinovej metódy pre veľkú škálu komplikovaných úloh pre Eulerové rovnice, viz. [10].

2.3.2 Vijayasundaramov numerický tok H_{VS}

Vieme, že základná vlastnosť systému Eulerových rovníc je hyperbolicita. To znamená, že matica $\mathbb{P}(w, n)$ je diagonalizovateľná s reálnymi vlastnými číslami a preto existujú matice $\mathbb{T}(w, n) \in \mathbb{R}^{d+2, d+2}$ a $\mathbb{D}(w, n) = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{d+2})$ spĺňajúce

$$\mathbb{P}(w, n) = \mathbb{T}\mathbb{D}\mathbb{T}^{-1},$$

kde $\lambda_1, \dots, \lambda_d \in \mathbb{R}$ sú vlastné čísla matice $\mathbb{P}(w, n)$. Platí

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(w, n) &= \mathbb{P}^+(w, n) + \mathbb{P}^-(w, n), \\ \mathbb{P}^\pm(w, n) &= \mathbb{T}\mathbb{D}^\pm\mathbb{T}^{-1}, \quad \mathbb{D}^\pm = \text{diag}(\lambda_1^\pm, \dots, \lambda_{d+2}^\pm). \end{aligned}$$

Vijayasundaramov numerický tok definujeme ako

$$H_{VS}(w_L, w_R, n) = \mathbb{P}^+ \left(\frac{w_L + w_R}{2}, n \right) w_L + \mathbb{P}^- \left(\frac{w_L + w_R}{2}, n \right) w_R,$$

kde $\lambda^+ = \max\{0, \lambda\}$, $\lambda^- = \min\{0, \lambda\}$.

2.4 Časová diskretizácia

Pre časovú diskretizáciu nášho problému použijeme ako základ semi-implicitnú Eulerovú metódu z [10]. Vďaka tejto diskretizácii obdržíme len jednu sústavu lineárnych rovníc na 1 časovej vrstve. Diskretizácia tohto typu má to veľmi dobré vlastnosti stability.

Nech $\mathcal{B} = \{z_\alpha\}_{\alpha=1}^n$ je báza v priestore S_{hp} , $n = \dim S_{hp}$. Hľadáme približné riešenie $w_h \in S_{hp}$ tvaru

$$w_h(t) = \sum_{\alpha=1}^n \xi_\alpha(t) z_\alpha.$$

Vďaka linearite v (2.8) v premennej φ , možno ako testovacie funkcie použiť práve bázové funkcie $z_\alpha \in \mathcal{B}$, $\alpha = 1, \dots, n$. Dostaneme tým systém obyčajných diferenciálnych rovníc pre neznáme $\xi_\alpha(t)$, $\alpha = 1, \dots, n$.

Uvažujme časové delenie intervalu $[0, T]$, $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots$. Označme $\tau_k = t_{k+1} - t_k$. Použijeme Eulerovú doprednú diskretizáciu, tj.

$$\frac{\partial w_h(t_k)}{\partial t} \approx \frac{w_h^{k+1} - w_h^k}{\tau_k},$$

kde $w_h^k \approx w_h(t_k)$.

Naša úloha teraz je nájsť w_h^{k+1} také, že

- $w_h^{k+1} \in S_{hp}$,
- $\left(\frac{w_h^{k+1} - w_h^k}{\tau_k}, \varphi_h \right) + \tilde{b}_h(w_h^{k+1}, w_h^k, \varphi_h) + \tilde{l}_h(w_h^{k+1}, \varphi_h) = 0$,
- $\forall \varphi_h \in S_{hp}$, $k = 0, 1, \dots$,
- $w_h^0 \in S_{hp}$ je aproximácia w^0 ,

kde $\tilde{b}_h(w_h^{k+1}, w_h^k, \varphi_h)$ dostaneme linearizáciou formy b_h pomocou homogenity vektorových funkcií Eulerových rovníc a to nasledovne. Položme

$$\sigma_1 = - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^d \mathbb{A}(w_h^k) w_h^{k+1} \cdot \frac{\partial \varphi_h}{\partial x} dx$$

a

$$\sigma_2 = \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h} \int_{\Gamma} \left(\mathbb{P}^+(\langle w_h^k \rangle_{\Gamma}, n_{\Gamma}) (w_h^{k+1})_{\Gamma}^{(L)} + \mathbb{P}^-(\langle w_h^k \rangle_{\Gamma}, n_{\Gamma}) (w_h^{k+1})_{\Gamma}^{(P)} \right) \cdot [\varphi_h] dS.$$

Formu $\tilde{b}_h(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h)$ definujeme ako súčet σ_1 a σ_2 , tj.

$$\tilde{b}_h(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h) = \sigma_1 + \sigma_2. \quad (2.9)$$

Forma \tilde{b}_h je v prvej premennej nelineárna, tú berieme explicitne a v druhej premennej lineárna, tú berieme implicitne.

Semi-implicitná schéma je

Definícia 2.4.1. Pre každé $k = 0, 1, \dots$ a $\varphi_h \in S_{hp}$ hľadáme w_h^{k+1} také, že

- $w_h^{k+1} \in S_{hp}$,
- $(w_h^{k+1}, \varphi_h) + \tau_k \tilde{b}_h(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h) + \tau_k \tilde{l}_h(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h) = (w_h^k, \varphi_h)$,
- $w_h^0 \in S_{hp}$.

Funkcia w_h^0 je S_{hp} aproximácia počiatočnej podmienky w^0 .

Voľbu formy \tilde{l}_h popíšeme v nasledujúcej podkapitole. Teraz je dôležité upozorniť, že táto diskretizácia odpovedá n lineárnym rovniciam

$$\underbrace{(\mathbb{M} + \tau_k \mathbb{B})}_{\mathbb{C}} \xi^{k+1} = \mathbb{M} \xi^k, \quad (2.10)$$

kde $\xi^k = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ a ξ_{α}^k je aproximácia $\xi_{\alpha}(t_k)$.

Volíme bázové funkcie s nosičom na jednom elemente K . Dvojitý integrál v \tilde{l}_h sa zredukuje z $\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \cdot dy dx$ na $\int_K \int_{\mathbb{R}} \cdot dy dx$. Za predpokladu nulovosti formy \tilde{l}_h je matica \mathbb{C} riedka. Riedká matica pre veľké systémy lineárnych rovníc môžeme numericky riešiť napr. pomocou softvérového balíka UMFPAK. Túto riedkosť potrebujeme zachovať a zohľadniť pri voľbe formy \tilde{l}_h .

Matica $\mathbb{M} = (m_{ij})_{i,j=1}^n$ je symetrická, pozitívne definitná blokovo diagonálna matica tuhosti s prvkami

$$m_{ij} = \int_{\Omega} z_i z_j.$$

Matica \mathbb{B} reprezentuje formy \tilde{b}_h a \tilde{l}_h . Pokiaľ je \mathbb{M} regulárna, očakávame, že pre malé τ_k je matica \mathbb{C} tiež regulárna. Pre dostatočne malé τ_k je matica \mathbb{C} blízka blokovo diagonálnej matici s dvoma blokmi v prvom hornom a ľavom dolnom rohu (Obr.2.1).

integrály. Volíme dve nasledovné diskretizácie.

1.možnosť

Vychádzajme z predposledných integrálov, tj.

$$\mathcal{A} = \int_{\mathbb{R}} b(|x-y|)w(y,t) \cdot \left(w_2(x,t), -w_1(x,t), 0 \right) dy$$

a

$$\mathcal{B} = \int_{\mathbb{R}} b(|x-y|)w(y,t) \cdot \left(0, w_2(x,t), -2w_1(x,t) \right) dy.$$

Vektor $g(w)$ môžeme zapísať ako

$$g(w)(x,t) = \int_{\mathbb{R}} b(|x-y|)U(w(x,t))w(y,t)dy,$$

kde $U(w) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ je matica tvaru

$$U(w(x,t)) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ w_2(x,t) & -w_1(x,t) & 0 \\ 0 & w_2(x,t) & -2w_1(x,t) \end{pmatrix}.$$

Zvoľme aproximáciu $w(x,t) \approx w_h^k$ a $w(y,t) \approx w_h^{k+1}$ a definujme diskretizáciu formy $l_h(w, \varphi_h)$ ako formu

$$\tilde{l}_h(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} b(|x-y|)U(w_h^k(x))w_h^{k+1}(y)dy \cdot \varphi_h(x)dx.$$

2.možnosť

Teraz vychádzajme z posledných integrálov, tj.

$$\mathcal{A} = \int_{\mathbb{R}} b(|x-y|)w(x,t) \cdot \left(-w_2(y,t), w_1(y,t), 0 \right) dy$$

a

$$\mathcal{B} = \int_{\mathbb{R}} b(|x-y|)w(x,t) \cdot \left(-2w_3(y,t), w_2(y,t), 0 \right) dy.$$

V tomto prípade môžeme vektor $g(w)$ zapísať nasledovne

$$g(w)(x,t) = \int_{\mathbb{R}} b(|x-y|)U(w(y,t))w(x,t)dy,$$

kde $U(w) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ je matica tvaru

$$U(w(y,t)) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -w_2(y) & w_1(y) & 0 \\ -2w_3(y) & w_2(y) & 0 \end{pmatrix}.$$

Zvoľme aproximáciu $w(x,t) \approx w_h^{k+1}$ a $w(y,t) \approx w_h^k$ a definujme diskretizáciu formy $l_h(w, \varphi_h)$ ako formu

$$\tilde{l}_h(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h) = \int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}} b(|x-y|)U(w_h^k(y))dy \right) w_h^{k+1}(x) \cdot \varphi_h(x)dx. \quad (2.11)$$

V prvom prípade dostaneme hustú maticu sústavy lineárnych rovníc, čo by bol problém pre numerické riešenie. Preto túto možnosť vylúčime.

Naopak v druhom prípade sa riedkosť zachová a táto forma je nelineárna v prvej premennej, ktorú berieme ako explicitnú a v druhej premennej lineárna, ktorú berieme implicitne. Navrhnutá diskretizácia formy l_h je blízka postupu voľby diskretizácie formy b_h . Touto diskretizáciou dostaneme schému blízku semi-implicitnej linearizácii Eulerových rovníc z článku [10].

Odvedenie diskretizácie sme spravili len pre funkciu (1.36), tj. var_1 . U druhej varianty (1.37) by sme boli schopný takto napísať len 2. možnosť, čo zrejme nevádi, pretože je to ten efektívnejší spôsob. Jediný rozdiel je v matici $U(w)$. Ak budeme voliť funkciu var_2 , potom matica je tvaru

$$U(w(y, t)) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -w_2(y) & w_1(y) & 0 \\ -\frac{2w_3(y)}{3} - \frac{2w_2(y)w_2(y)}{3w_1(y)} & w_2(y) & 0 \end{pmatrix}.$$

2.5 Zachytenie šoku

Systém Eulerových rovníc je hyperbolická rovnica 1. rádu. Riešenie takýchto rovníc je typicky nespojité a to už v konečnom čase i pre hladkú počiatočnú podmienku. Metóda konečných objemov pracuje s takými nespojitostami dobre. U schém vyšších rádoov pozorujeme lokálne Gibsov jav (blízko nespojitosti sa vytvorí oscilácia). Vyhnúť sa takému chovaniu môžeme použitím dodatočných stabilizačných členov.

Stabilizačná technika z práce [10] je nasledujúca. Označme u_h^k nejakú skalárnu veličinu charakterizujúcu aproximáciu riešenia w_h^k . Z numerických experimentov vyplýva, že vhodnou voľbou pri Eulerových rovniciach je hustota. Definujme indikátor nespojitosti

$$g^k(K) = \int_{\partial K} \frac{[u_h^k]^2}{h_K^\mu} dS, \quad \forall K \in \mathcal{T}_h,$$

kde $\mu > 0$ je daná konštanta a diskretný indikátor nespojitosti

$$G^k(K) = \begin{cases} 0 & \text{ak } g^k(K) < 1, \\ 1 & \text{inak.} \end{cases}$$

Osvedčilo sa nám v jednej priestorovej dimenzii použiť $\mu = 1/2$ alebo $\mu = 1$.

Definujme formu umelej viskozity

$$\Phi_h^1(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h) = \nu_1 \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K G^k(K) \int_K \nabla w_h^{k+1} \cdot \nabla \varphi_h dx, \quad (2.12)$$

kde $\nu_1 = O(1)$ je daná konštanta. Táto forma odpovedá pridaniu Laplaceovho operátora s nulovou Neumannovou okrajovou podmienkou na každom elemente zvlášť. V práci [10] bolo dokázané, že táto stabilizácia je občas nedostatočná, pretože funguje na každom elemente zvlášť. V niektorých prípadoch je potreba pridať difúziu pôsobiacu medzi elementami. V práci [10] je navrhnutá nasledujúca forma penalizujúca skoky medzi elementami

$$\Phi_h^2(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h) = \nu_2 \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h} \sum_{K: \Gamma \subset \partial K} \frac{1}{2} (G^k(K)) \int_{\Gamma} [w_h^{k+1}] \cdot [\varphi_h] dS, \quad (2.13)$$

kde $\nu_2 = O(1)$ je daná konštanta.

Z numerických experimentov sme zistili, že je výhodné použiť $\nu_1 = \nu_2 = 0, 3$.

2.6 Zhrnutie - výsledná schéma

Výsledná semi-implicitná schéma aj so stabilizačnými členmi je

Definícia 2.6.1. Pre každé $k = 0, 1, \dots$ a $\varphi_h \in S_{hp}$ nájsť w_h^{k+1} také, že

- $w_h^{k+1} \in S_{hp}$,
- $\left(\frac{w_h^{k+1} - w_h^k}{\tau_k}, \varphi_h \right) + \tilde{b}_h(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h) + \tilde{l}_h(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h) + \Phi_h^1(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h) + \Phi_h^2(w_h^k, w_h^{k+1}, \varphi_h) = 0$,
- $w_h^0 \in S_{hp}$.

Funkcia w_h^0 je S_{hp} aproximácia počiatočnej podmienky w^0 .

Stabilizačné členy Φ_h^1, Φ_h^2 sú dané vzťahmi (2.12) a (2.13). Formy \tilde{b}_h a \tilde{l}_h sú definované v (2.9) a (2.11).

2.7 Implementácia

Posledný krok k získaniu numerických výsledkov tohto problému je jeho implementácia. Numerické výsledky predstavené v nasledujúcej kapitole sme dostali pomocou programu napísanom v jazyku C. Na vyriešenie lineárneho systému rovníc bol použitý softvérový balík UMFPACK. Voľbu bazových funkcií a kvadratúrnych vzorcov popíšeme v nasledujúcich podkapitolách. Pri numerických experimentoch sme zistili, že riešenie typicky dosahuje stavu vákua v oblastiach, kde sa nevyskytuje krdeľ. Pretože Eulerové rovnice prestávajú byť v tomto prípade dobre definované, je nutné tomuto problému venovať zvlášť pozornosť. Výslednú procedúru nazývame postprocessing a je popísaný v podkapitole 2.7.3.

2.7.1 Numerická integrácia

Vo formulácii nespojitej Galerkinovej metódy sa vyskytujú integrály typu $\int_K f(x)dx$ a $\int_\Gamma f(x)dS$. Naším cieľom je dosiahnuť vysokého rádu presnosti. Na numerické riešenie týchto integrálov preto volíme *Gaussove kvadratúrne vzorce*, tj.

$$\int f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i),$$

kde váhy kvadratúry sú w_i a x_i značia uzly kvadratúry ([3], [14]).

Uzlové body sú volené optimálne tak, aby bolo možné dosiahnuť vysokého rádu presnosti. Pri konštrukcii Gaussových kvadratúr je postačujúce voliť za uzly korene Legendrových polynómov. Váhy Gaussovej kvadratúry sa už následne volia tak, aby bol dosiahnutý rád presnosti $2n - 1$.

Uzly a váhy pre nami používanú hodnotu $n = 3$ (vypočítané pre Gaussove kvadratúry definovaných na intervale $\langle 0, 1 \rangle$) možno nájsť v tabuľke (Tab. 2.1).

n	Uzly x_i	Váhy w_i
3	$\frac{1 \pm \sqrt{3/5}}{2}$ $\frac{1}{2}$	$\frac{5}{18}$ $\frac{4}{9}$

Tabuľka 2.1: Váhy a uzly pre Gaussovu kvadratúru $n=3$.

2.7.2 Bázové funkcie

Numerické riešenie hľadáme v priestore S_{hp} , ktorého dimenziu označíme ako n . Do tohto priestoru patria aj polynómy. Môžeme zvoliť bázu $\{1, x, x^2, \dots, x^{n-1}\}$. Avšak v tomto prípade sú bloky matice \mathbb{M} zle podmienené a dochádza k strate presnosti. Vhodnejšie je použitie ortogonálnych polynómov, napr. Legendrových polynómov. Použitím Legendrových polynómov v nespojitej Galerkinovej metóde dostaneme diagonálnu maticu \mathbb{M} .

Legendrov polynóm stupňa n definovaný na intervale $\langle -1, 1 \rangle$ budeme označovať ako P_n . Polynómy spĺňajú L^2 - ortogonalitu, tzn.

$$\int_{-1}^1 P_k(s)P_l(s)ds = \frac{2}{2k+1}\delta_{k,l}, \quad \forall k, l \in \mathbb{N}_0.$$

Norma polynómu P_n je preto

$$\|P_n(x)\|_{L^2(\langle -1, 1 \rangle)} = \sqrt{\frac{2}{2n+1}}.$$

Základné rekurentné vzťahy určujúce Legendrove polynómy

Hodnotu n -tého Legendrovho polynómu v bode x možno určiť z rekurentného vzťahu

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, \\ P_1(x) &= x, \\ P_{n+1}(x) &= \frac{2n+1}{n+1}P_n(x) - \frac{n}{n+1}P_{n-1}(x). \end{aligned}$$

Pre deriváciu n -tého Legendrovho polynómu platí

$$\begin{aligned} P'_n(1) &= \frac{n(n+1)}{2}, \\ \frac{x^2-1}{n}P'_n(x) &= xP_n(x) - P_{n-1}(x). \end{aligned}$$

Prvých päť Legendrových polynómov definovaných na $\langle -1, 1 \rangle$ je

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, \\ P_1(x) &= x, \\ P_2(x) &= \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}, \\ P_3(x) &= \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x, \\ P_4(x) &= \frac{35}{8}x^4 - \frac{30}{8}x^2 + \frac{3}{8}. \end{aligned}$$

Dôležité Legendrove polynómy, ktoré budeme používať v implementácii budú *posunuté Legendrove polynómy* Q_n . Tieto polynómy sú definované na intervale $\langle 0, 1 \rangle$ a spĺňajú

$$Q_n(x) = P_n(2x - 1),$$

$$\|Q_n(x)\|_{L^2(\langle 0,1 \rangle)} = \sqrt{\frac{1}{2n+1}}.$$

Prvých päť posunutých Legendrových polynómov definovaných na $\langle 0, 1 \rangle$ je

$$\begin{aligned} Q_0(x) &= 1, \\ Q_1(x) &= 2x - 1, \\ Q_2(x) &= 6x^2 - 6x + 1, \\ Q_3(x) &= 20x^3 - 30x^2 + 12x - 1, \\ Q_4(x) &= 70x^4 - 140x^3 + 90x^2 - 20x + 1. \end{aligned}$$

Viac informácií o ortogonálnych polynómoch možno nájsť napr. v [19].

2.7.3 Vákuum a postprocessing

Vákuum je charakteristickou podmienkou $\rho = 0$ a z toho vyplývajúcej nulovej celkovej energie $E = 0$ a tiež tlaku p .

V našom prípade máme model, ktorý by mal po nejakom čase dosiahnuť stavu $T = 0$. Tlak je definovaný ako súčin hustoty a teploty, tj. $p = \rho T$. Pokiaľ sa snažíme dosiahnuť stavu $T \rightarrow 0$, ovplyvňovať to bude ako hustotu tak i tlak.

Nevzákné Eulerové toky a tiež numerický tok sú definované na oblasti D , kde $\rho > 0$ a $p > 0$. Pokiaľ je jedna z týchto hodnôt nulová, nastane problém.

Z numerických experimentoch sa ukázalo, že hustota bude po určitom čase na niektorých elementoch nulová alebo dokonca záporná. Problémom je už spomínaný problém s numerickým tokom. Existuje niekoľko prístupov pre riešenie Eulerových rovníc s vákuom. My sme zvolili veľmi jednoduchú variantu nahradením nulových veličín malou epsilonovou hodnotou na každej časovej vrstve. Tento postup nazývame *postprocessing*.

Majme pevne dané $\varepsilon > 0$ (napr. 10^{-6}). Postprocessingom budeme nazývať postup pozostávajúci z niekoľkých krokov, ktorými budeme pre každý element zisťovať, či dáta k nemu prislúchajúce sú vákuum, resp. „skoro“ vákuum ($\rho < \varepsilon$ alebo $p < \varepsilon$) alebo nie. V kladnom prípade využijeme konštantu ε a malé hodnoty nahradíme práve touto konštantou. Tým zaručíme to, že program bude schopný pokračovať v ďalších výpočtoch. Veľký význam tohto postupu sa prejavuje hlavne v situáciách kedy máme na elementy, kde sú dáta odpovedajúce vákuu, resp. „skoro“ vákuu.

Je dôležité si uvedomiť, že pokiaľ dostaneme nulovú hustotu alebo tlak, úloha sa zmení. Nemožno teda predpokladať, že danú úlohu možno riešiť do ľubovoľného časového okamžiku metódou, ktorej numerický tok a princíp je založený na podmienke kladnosti hustoty aj tlaku. Postprocessing ale zaistí, že ak dostaneme niekde hodnoty veľmi blízke vákuu ($\rho < \varepsilon$ alebo $p < \varepsilon$), tak po postprocessingu bude program ďalej schopný pokračovať vo výpočtoch.

Postprocessing

1. Polož FLAG=0. (Zatiaľ sme nezistili, že by nejaká hodnota popisovala vákuum, resp. bola blízka vákuu.)
2. Ak hustota $\rho|_{\Gamma} < \varepsilon$ pre nejakú $\Gamma \subset \partial K$, potom FLAG=1.
3. Ak hustota $\rho < \varepsilon$ na K (zisťujeme len v kvadrátových uzloch), potom FLAG=1.
4. Ak FLAG=1, potom $\rho = \varepsilon$ a $\rho u = 0$.
5. Polož FLAG=0.
6. Ak $T|_{\Gamma} < \varepsilon$ pre nejakú $\Gamma \subset \partial K$, potom FLAG=1.
7. Ak $T < \varepsilon$ na K (zisťujeme len v kvadrátových uzloch), potom FLAG=1.
8. Ak FLAG=1, potom $E = \rho \left(\frac{u^2}{2} + \frac{3}{2}\varepsilon \right)$.

Definícia v bode 8. má zaistiť, aby T , resp. $p = \rho T$ nemohli výjsť nulové, či záporné. Tento postup je nutné voliť pretože p a T nie sú priamo neznáme, ale veličiny závislé na E .

3. Numerické výsledky

V prvej kapitole sme sa dozvedeli niečo o rovnici popisujúcej flocking. Odvodili sme ju a zistili, že má tvar systému Eulerových rovníc so špeciálnou pravou stranou. Jej diskretizáciu sme predstavili v predchádzajúcej kapitole pomocou semi-implicitnej nespojitej Galerkinovej metódy.

V tejto časti popíšeme numerické výsledky pre jednodimenzionálny prípad. Podľa schémy z 2. kapitoly sme úlohu naprogramovali v jazyku C na oblasti $\Omega = [0, 1]$ s periodickými okrajovými podmienkami.

Rýchlosť $u(x)$, hustota $\rho(x)$, teplota $T(x)$, kde $x \in \Omega$, charakterizujú počiatočnú podmienku, tj. vektorovú funkciu $w_0(x)$. Hodnotami $\bar{\rho}, \bar{u}, \bar{T}$ označujeme konštantné funkcie.

Z numerických experimentov sa ukázalo, že je nutné voliť v stabilizačných členoch konštanty $\nu_1 = \nu_2 = 0.3$ a $\mu = 1/2$.

Konštanty vo funkcii (1.35) boli nastavené na hodnoty $\lambda = 1, \beta = 0.1$ a $K = 1$.

Počet elementov je vždy 400. Aproximácia bola vo všetkých prípadoch aproximácia kvadratickými funkciami. Počet kvadratúrnych uzlov bol nastavený na 3. Časový krok vo všetkých prípadoch bol $\tau = 10^{-3}$. V postprocessingu sme nastavili $\varepsilon = 10^{-6}$.

Zavádzame značenie:

$u_{max}(t) := \max_{x \in \Omega} |u(x, t)|$ - maximálna rýchlosť v čase t ,

$T_{min}(t) := \min_{x \in \Omega} T(x, t)$ - minimálna teplota v čase t ,

$\rho_{min}(t) := \min_{x \in \Omega} \rho(x, t)$ - minimálna hustota v čase t .

Pre každý prípad uvedieme aj graf, ktorý reprezentuje maximálnu rýchlosť $u_{max}(t)$, minimálnu teplotu $T_{min}(t)$ a minimálnu hustotu $\rho_{min}(t)$.

Pre prehľadnosť sú tabuľky z grafmi hustoty, rýchlostí, energie a teploty spolu s medzivýsledkami uvedené až na konci kapitoly.

3.1 Testovací príklad

Na overenie správnosti nášho programu, sme použili tento jednoduchý prípad:

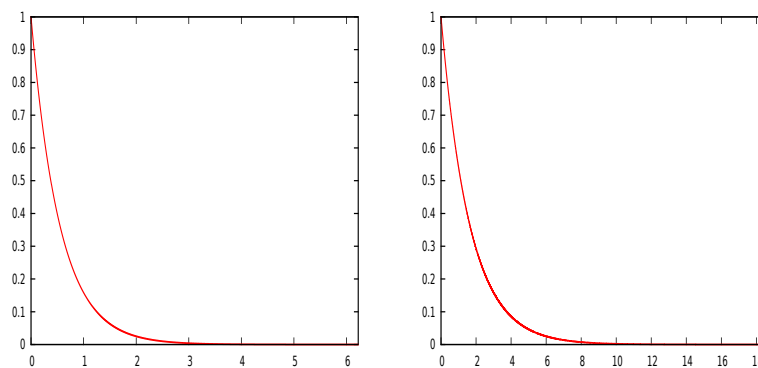
$$\begin{aligned} u(x) &= \bar{u}, \\ \rho(x) &= \bar{\rho}, \\ T(x) &= \bar{T}, \end{aligned}$$

kde $x \in \Omega$. Hodnoty $\bar{u}, \bar{\rho}$ implikujú $\mathcal{A}(\rho, u)(x) = 0$ a

$$\mathcal{B}(\rho, u, T)(x) = -c\bar{\rho}(x) \int_{\mathbb{R}} b(|x - y|)\bar{\rho}(y)T(y)dy,$$

kde c je konštanta závislá od voľby funkcie var_k (postupne pre $k = 1$, resp. $k = 2$ má hodnoty $c = 3$, resp. $c = 1$). Hustota a rýchlosť sa nebude meniť. Teplota bude vďaka nenulovosti $\mathcal{B}(\rho, u, T)$ klesať, $T \rightarrow 0$.

Pri voľbe $\rho = 1, u = 0.4$ a $T = 1$ nám program hustotu aj rýchlosť naozaj nemenil. Vývoj teploty $T(t)$ reprezentuje graf (Obr. 3.1).



Obr. 3.1: Vývoj teploty pre testovací prípad (postupne pre (1.36) a (1.37)).

3.2 Prípad č. 1

Voľba počiatocnej podmienky v tomto prípade bola

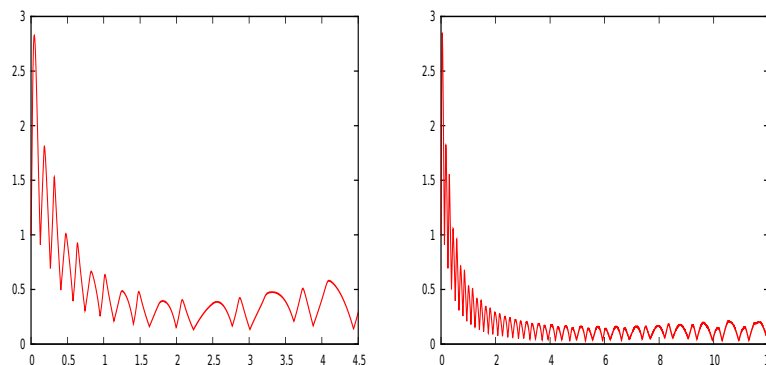
$$\begin{aligned}\rho(x) &= \exp\left(-\frac{(x-0.5)^2}{0.1}\right), \\ u(x) &= -\sin(2\pi x), \\ T(x) &= 10,\end{aligned}$$

kde $x \in \Omega$. Hustota je Gaussovská distribučná funkcia centralizovaná v 0.5.

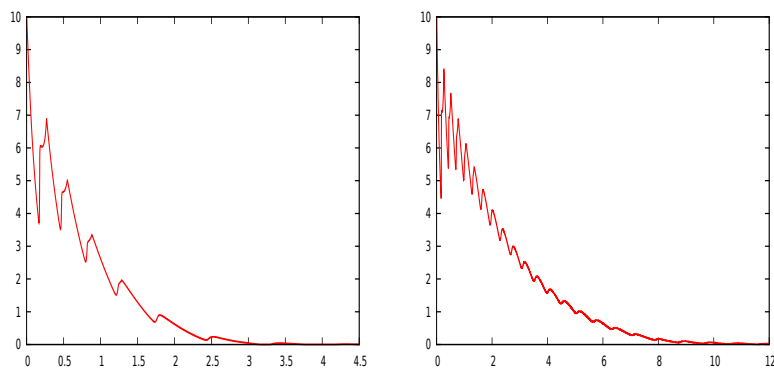
Vývoj riešenia sme sledovali do času $t = 4.5$ pre var_1 a do času $t = 12$ pre var_2 . Autori článku [12] tento vývoj sledovali len do času $t = 3.1$, pretože im to havarovalo - neriešia vákuum.

Teplota aj rýchlosť konvergujú k nulovej funkcii. Pre funkciu var_1 sa už v čase $t \approx 3$ vytvoril kúdeľ - ostrý hrb uprostred. Pre funkciu var_2 to bolo až v čase $t \approx 9$. To znamená, že model s var_1 popisuje rýchlejší flocking než model s var_2 . Riešenie tohto prípadu je znázornené v (Tab. 3.1)-(Tab. 3.8).

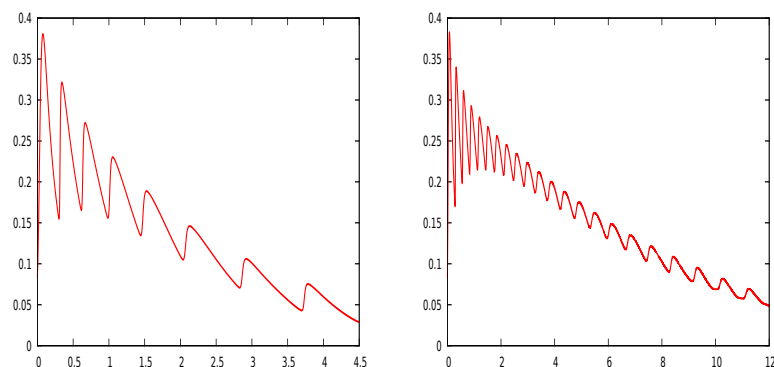
Grafy (Obr. 3.2) reprezentujú maximálne rýchlosti v čase, tj. $u_{max}(t)$. Grafy (Obr. 3.3) reprezentujú minimálnu teplotu v čase, tj. $T_{min}(t)$. Minimálne hustoty $\rho_{min}(t)$ sú na (Obr. 3.4).



Obr. 3.2: Príklad č. 1. - Maximálna rýchlosť $u_{max}(t)$ pre funkcie (1.36) a (1.37).



Obr. 3.3: Príklad č. 1. - Minimálna teplota $T_{min}(t)$ pre funkcie (1.36) a (1.37).



Obr. 3.4: Príklad č. 1. - Minimálna hustota $\rho_{min}(t)$ pre funkcie (1.36) a (1.37).

3.3 Prípad č. 2

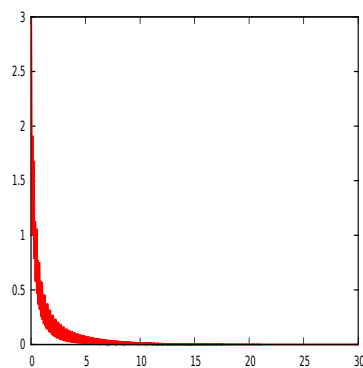
V druhom prípade boli ponechané počiatkové podmienky prvého prípadu, tj.

$$\begin{aligned} \rho(x) &= \exp\left(-\frac{(x-0.5)^2}{0.1}\right), \\ u(x) &= -\sin(2\pi x), \\ T(x) &= 10, \end{aligned}$$

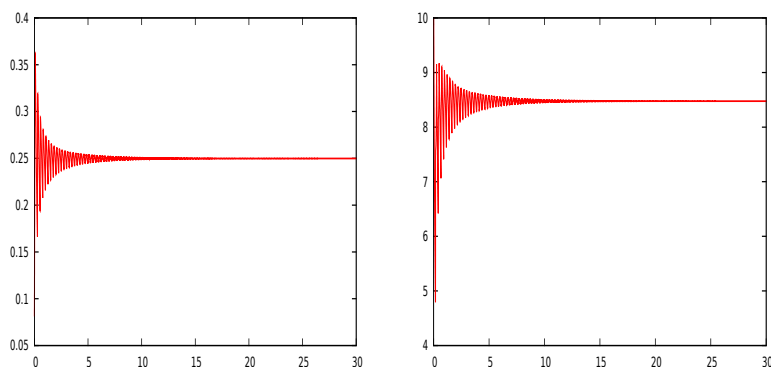
kde $x \in \Omega$.

V programe sme vypli flocking - pravú stranu nastavili na nulu, $\mathcal{A} = \mathcal{B} = 0$. Tento príklad slúži na porovnanie chovania modelu s flockingom (tj. prípad č.1) a bez neho (prípad č.2).

Riešenie rýchlo konverguje ku stacionárnemu riešeniu: $u = 0$, $p = \text{konš.}$, T, ρ konvergujú ku stacionárnej funkcii - sú nekonštantné. Riešenie je znázornené v (Tab. 3.9)-(Tab. 3.12). Pozorujeme veľký rozdiel oproti prípadu č.1. Ďalší rozdiel možno vidieť na grafoch u_{max} , ρ_{min} a T_{min} . Maximálna rýchlosť $u_{max}(t)$ konverguje k nule, (Obr. 3.5). Na rozdiel od prípadu č.1 $\rho_{min}(t), T_{min}(t)$ nekonvergujú k 0, (Obr.3.6).



Obr. 3.5: Prípád č.2 - Maximálna rýchlosť $u_{max}(t)$.



Obr. 3.6: Prípád č.2 - Minimálna hustota $\rho_{min}(t)$ a minimálna teplota $T_{min}(t)$.

3.4 Prípád č. 3

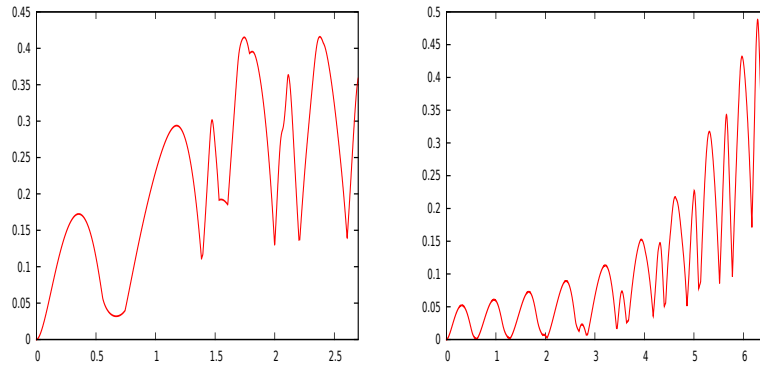
V tomto prípade nastavíme počiatkový tlak a rýchlosť na konštantu. Hustota bude rovnaká ako v prvom prípade. Počiatkové podmienky sú

$$\begin{aligned}\rho(x) &= \exp\left(-\frac{(x-0.5)^2}{0.1}\right), \\ u(x) &= 0, \\ p(x) &= \rho(x)T(x) = 1,\end{aligned}$$

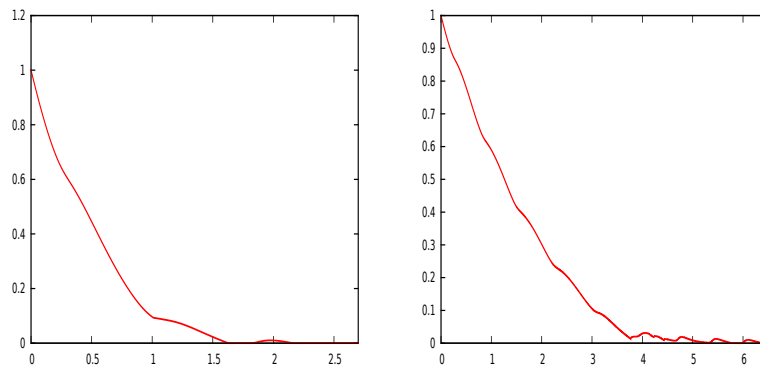
kde $x \in \Omega$.

Bez flockingu sa pre takéto počiatkové podmienky nič nemení, tj. riešenie u plynov nezávisí na čase. S flockingom je ale situácia iná. Flocking vynutí zmenu rýchlosti aj tlaku (krdel' sa dá do pohybu). Priebeh tejto situácie znázorňujú tabuľky (Tab. 3.13)-(Tab. 3.20).

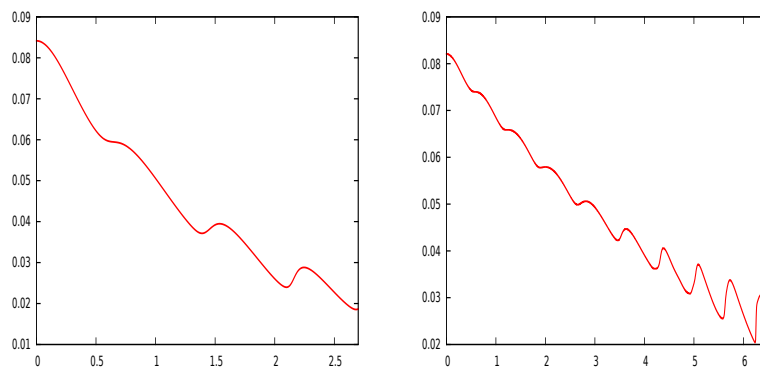
Maximálne rýchlosti $u_{max}(t)$ sú znázornené na obrázku (Obr. 3.7). Minimálne teploty $T_{min}(t)$ sú na (Obr. 3.8) a minimálne hustoty $\rho_{min}(t)$ na obrázku (Obr. 3.9)



Obr. 3.7: Prípád č.3 - Maximálna rýchlosť $u_{max}(t)$ pre funkcie (1.36) a (1.37).



Obr. 3.8: Príklad č. 3. - Minimálna teplota $T_{min}(t)$ pre funkcie (1.36) a (1.37).



Obr. 3.9: Príklad č. 3. - Minimálna hustota $\rho_{min}(t)$ pre funkcie (1.36) a (1.37).

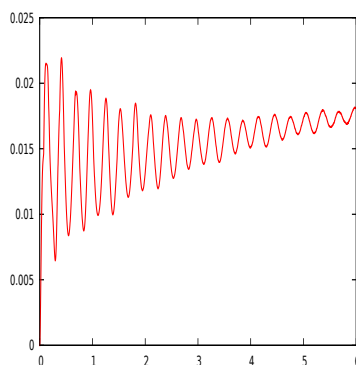
3.5 Prípád č. 4

Teraz sa pokúsme napodobniť dva krdle. Počiatočné podmienky budú

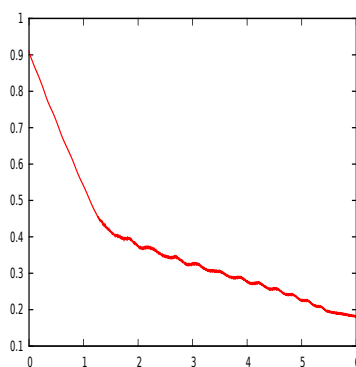
$$\begin{aligned}\rho(x) &= 0.1 + \exp(-1000(x - 0.4)^2) + 0.5 \exp(-1000(x - 0.5)^2), \\ u(x) &= 0, \\ p(x) &= \rho(x)T(x) = 1.\end{aligned}$$

Pôsobením flockingu sa to celé dá do pohybu. Krdle sa začnú koncentrovať, zlejú sa dokopy. Situáciu znázorňujú (Tab. 3.21)-(Tab. 3.24). Počítaná bola len varianta s funkciou var_2 .

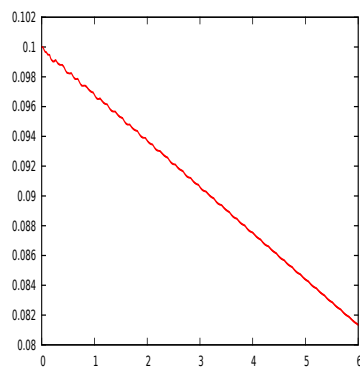
Obrázok (Obr. 3.10) reprezentuje maximálnu rýchlosť $u_{max}(t)$. Minimálnu teplotu $T_{min}(t)$ popisuje (Obr. 3.11) a minimálnu hustotu $\rho_{min}(t)$ (Obr. 3.12).



Obr. 3.10: Prípád č.4 - Maximálna rýchlosť $u_{max}(t)$ pre funkciu (1.37).

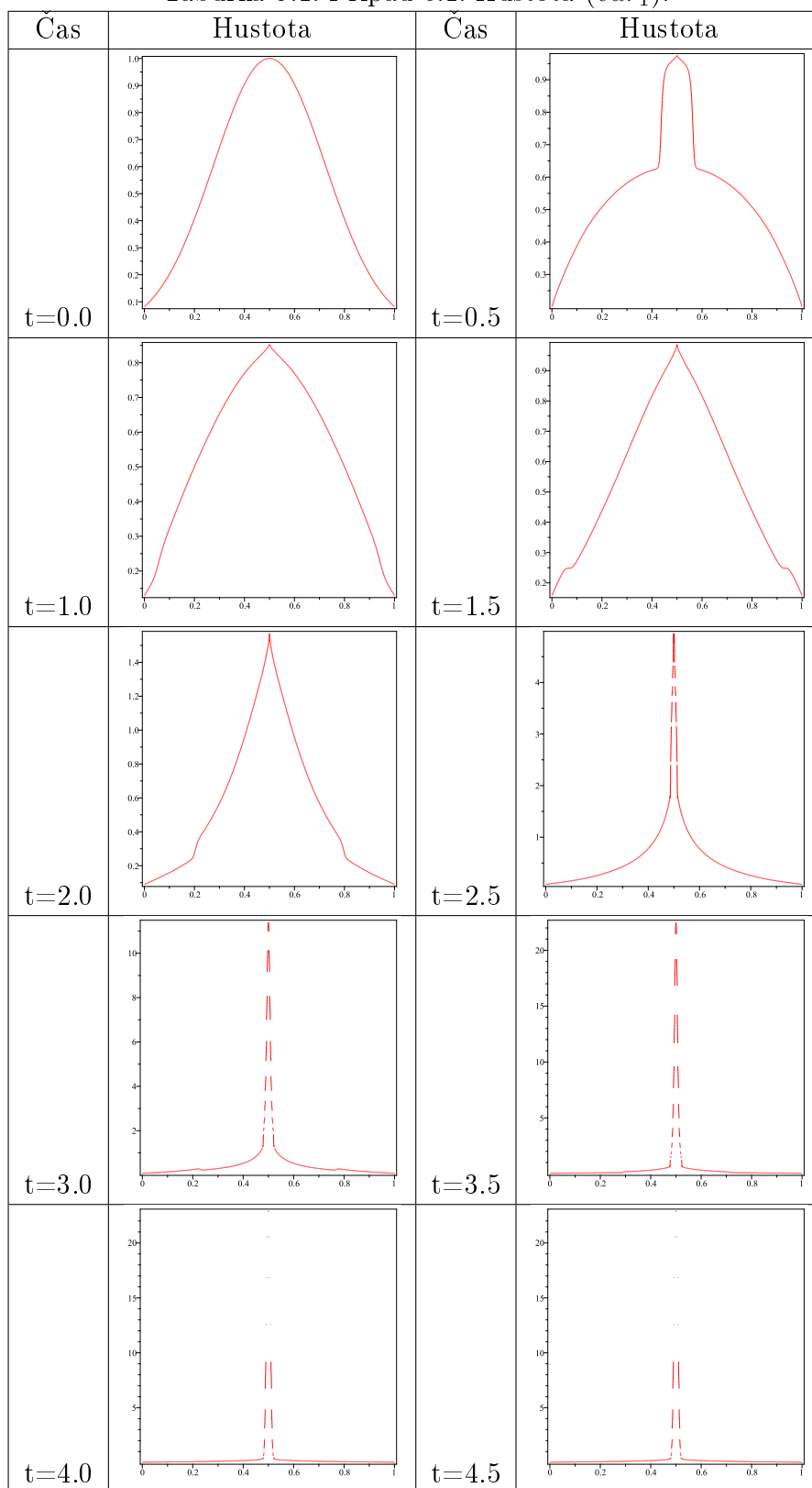


Obr. 3.11: Prípád č.4 - Minimálna teplota $T_{min}(t)$ pre funkciu (1.37).

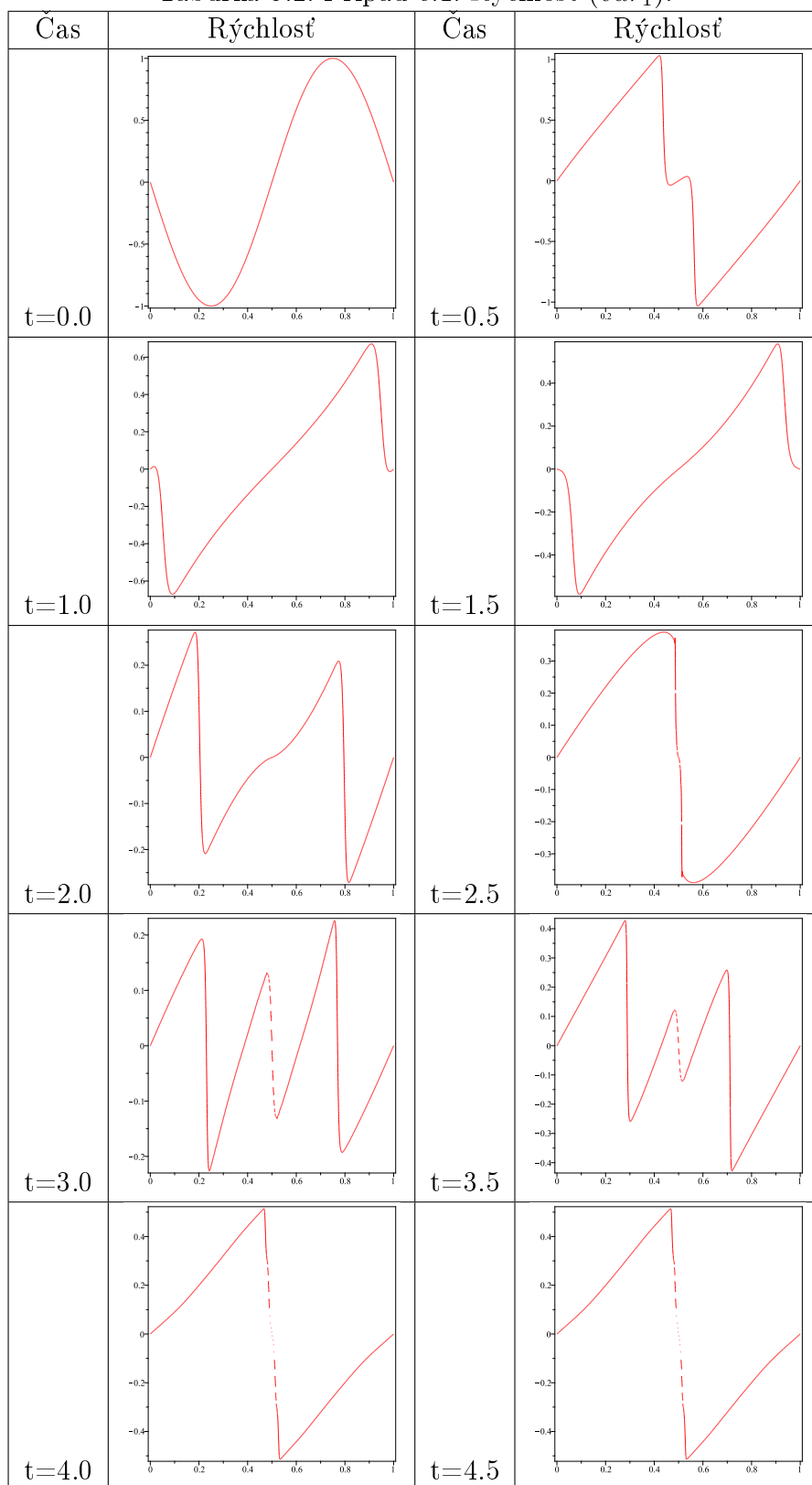


Obr. 3.12: Prípád č.4 - Minimálna hustota $\rho_{min}(t)$ pre funkciu (1.37).

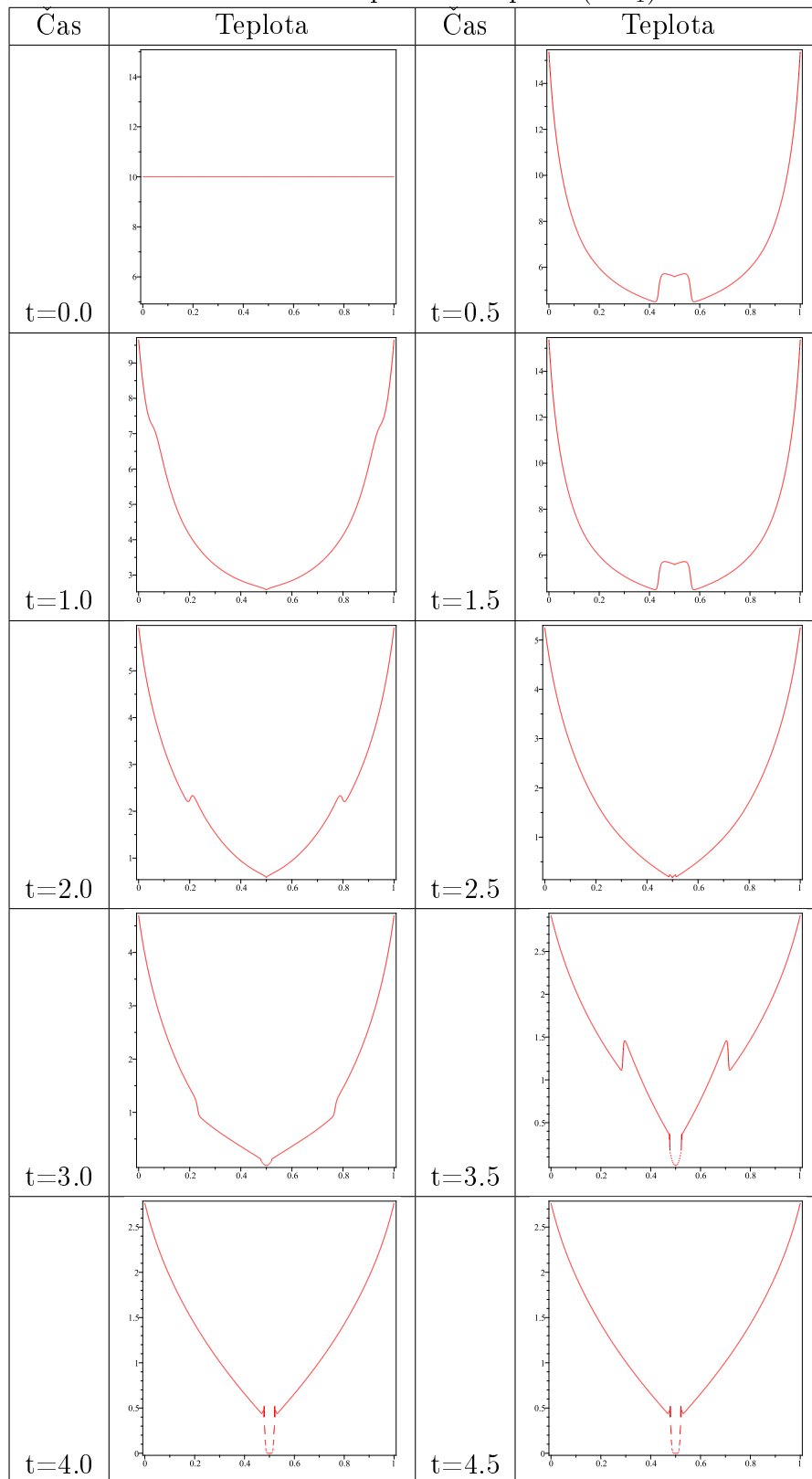
Tabuľka 3.1: Prípád č.1: Hustota (var_1).



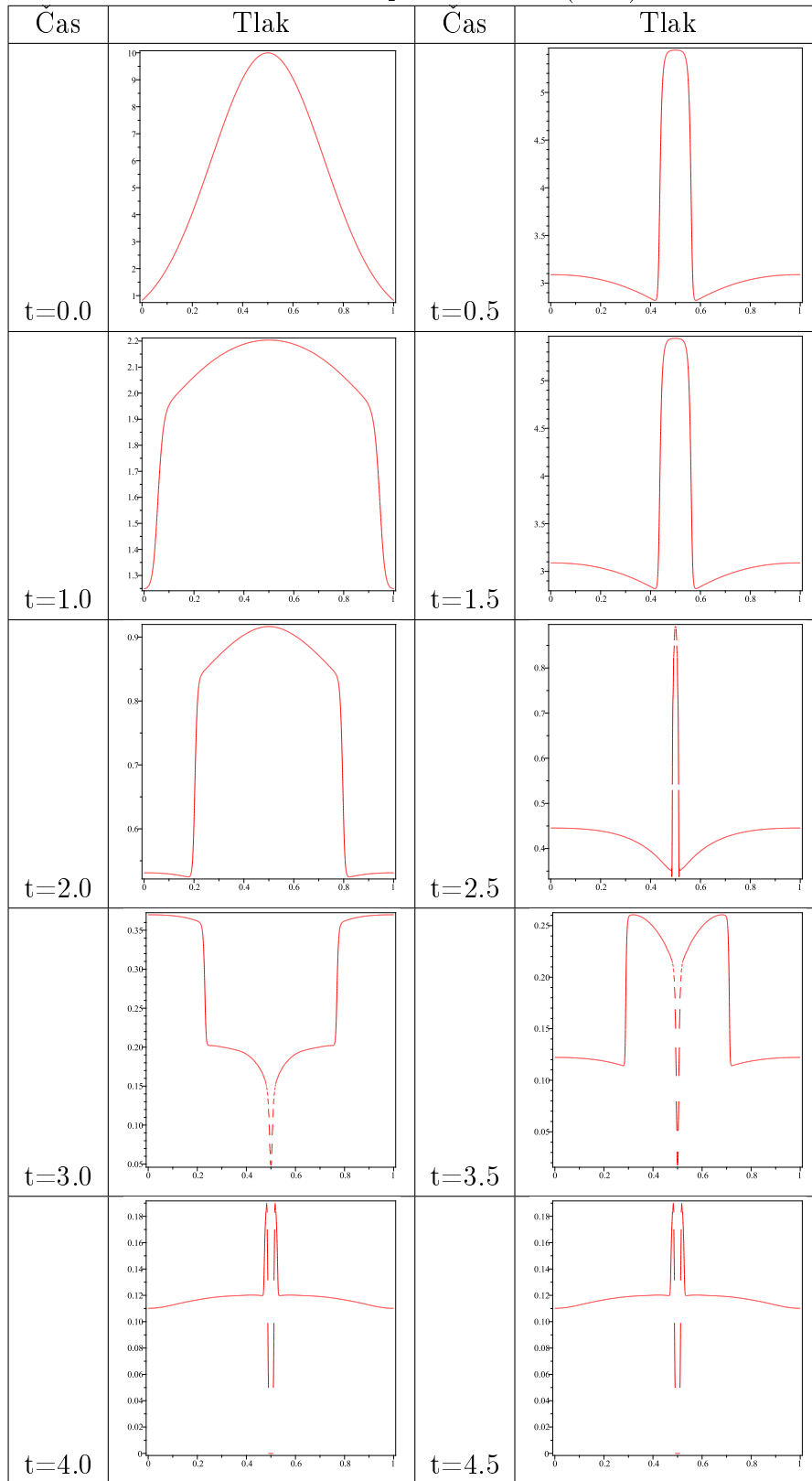
Tabuľka 3.2: Prípád č.1: Rýchlosť (var_1).



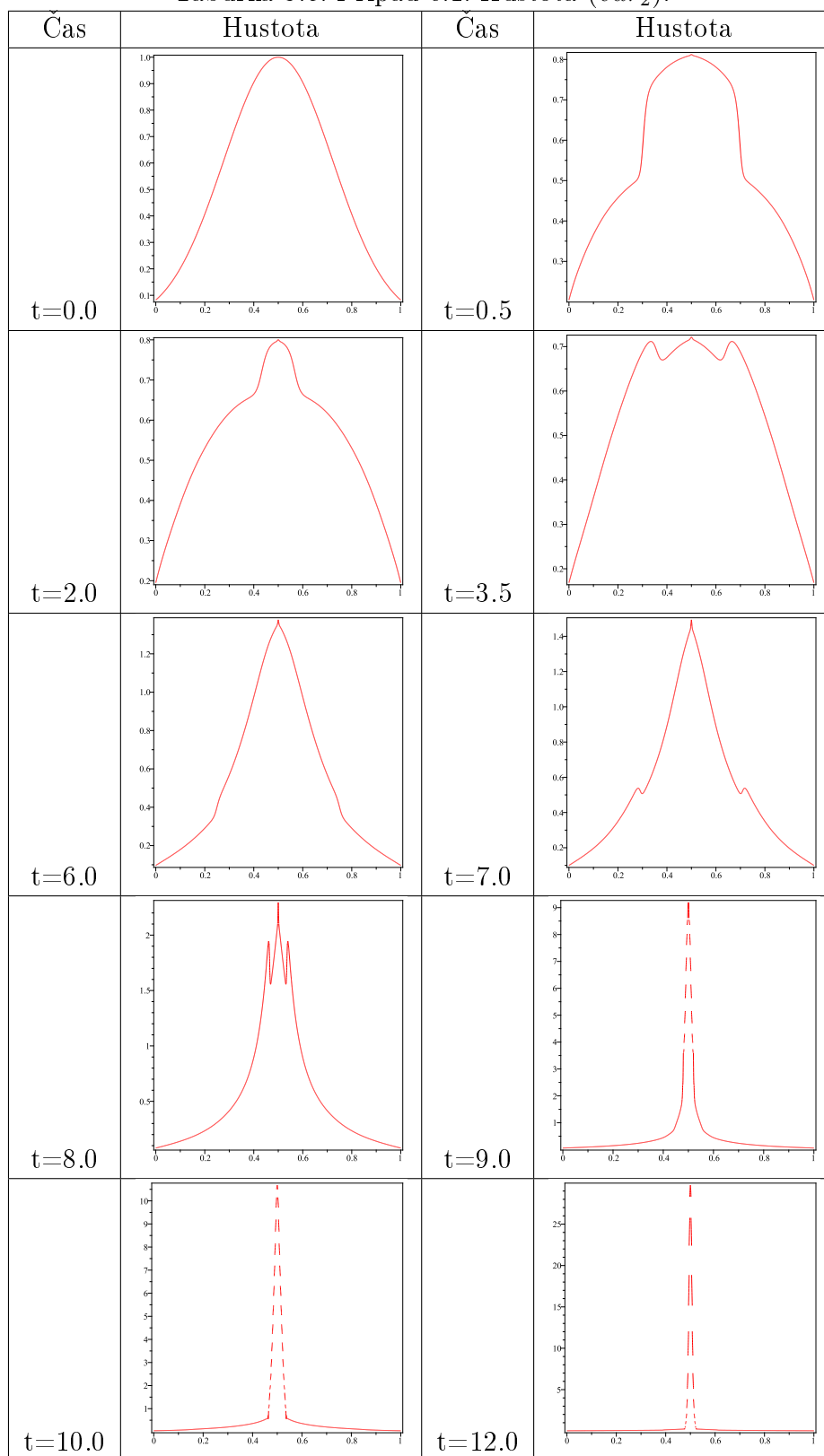
Tabuľka 3.3: Prípád č.1: Teplota (var_1).



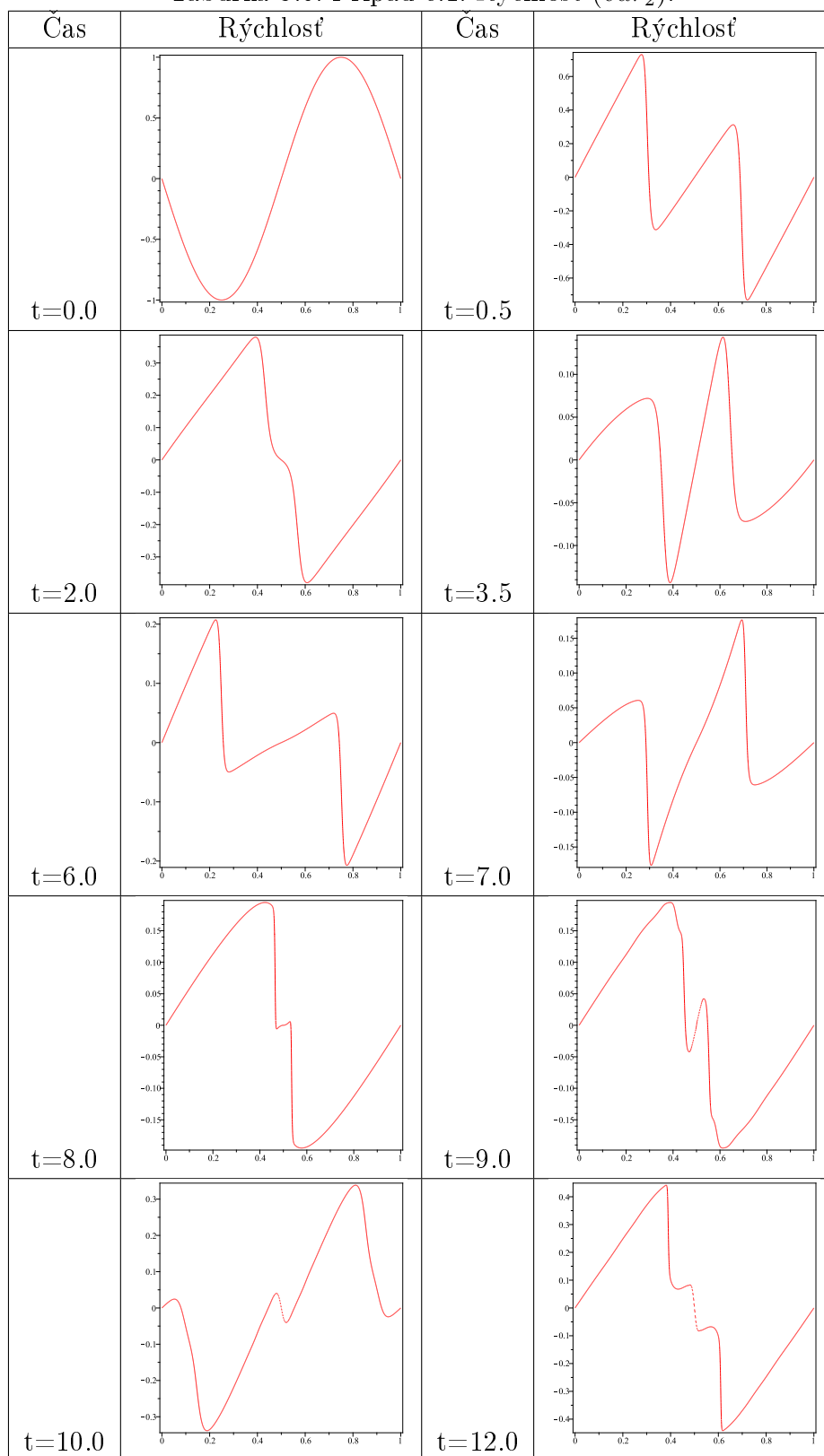
Tabuľka 3.4: Prípád č.1: Tlak (var_1).



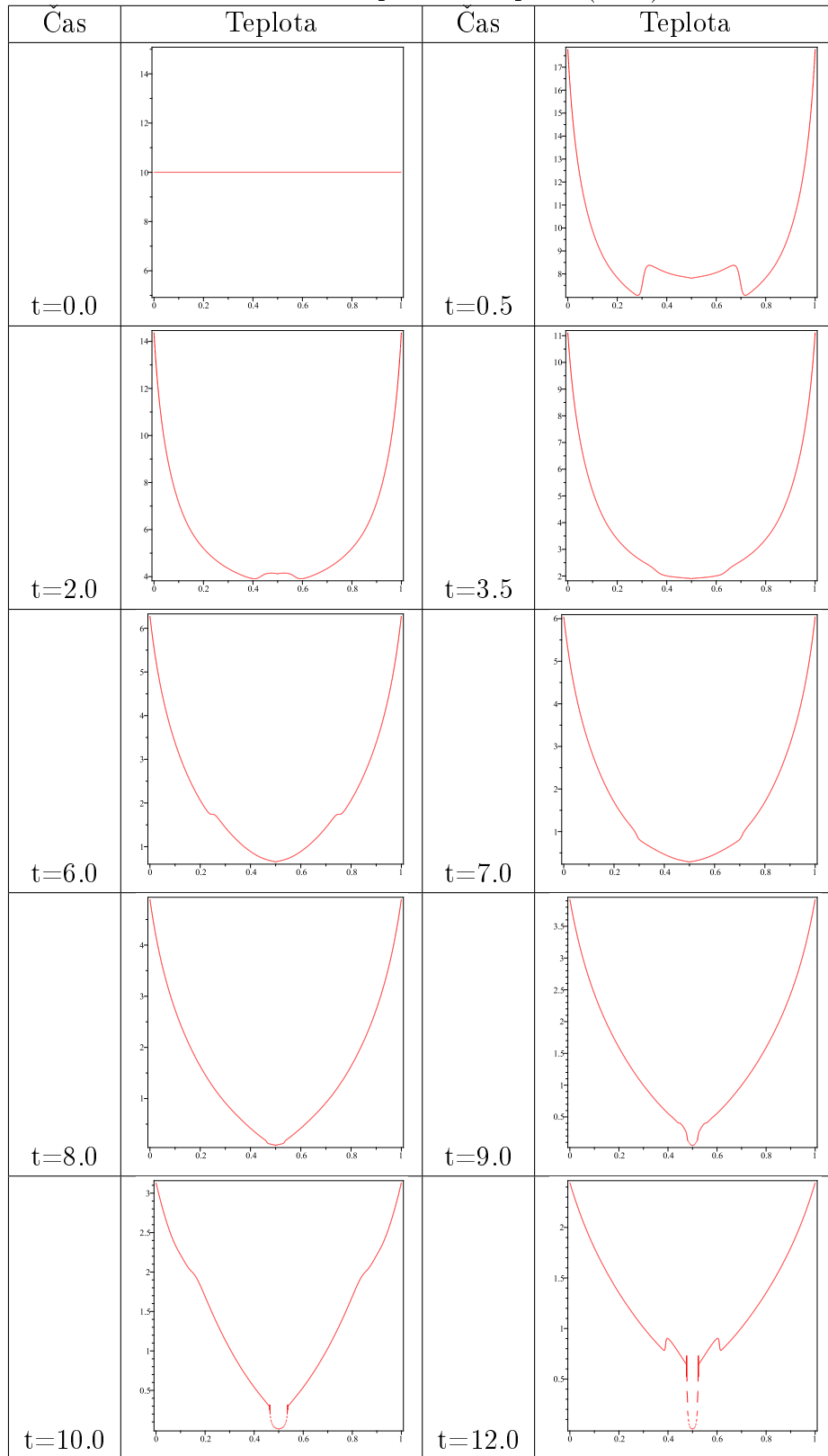
Tabuľka 3.5: Prípád č.1: Hustota (var_2).



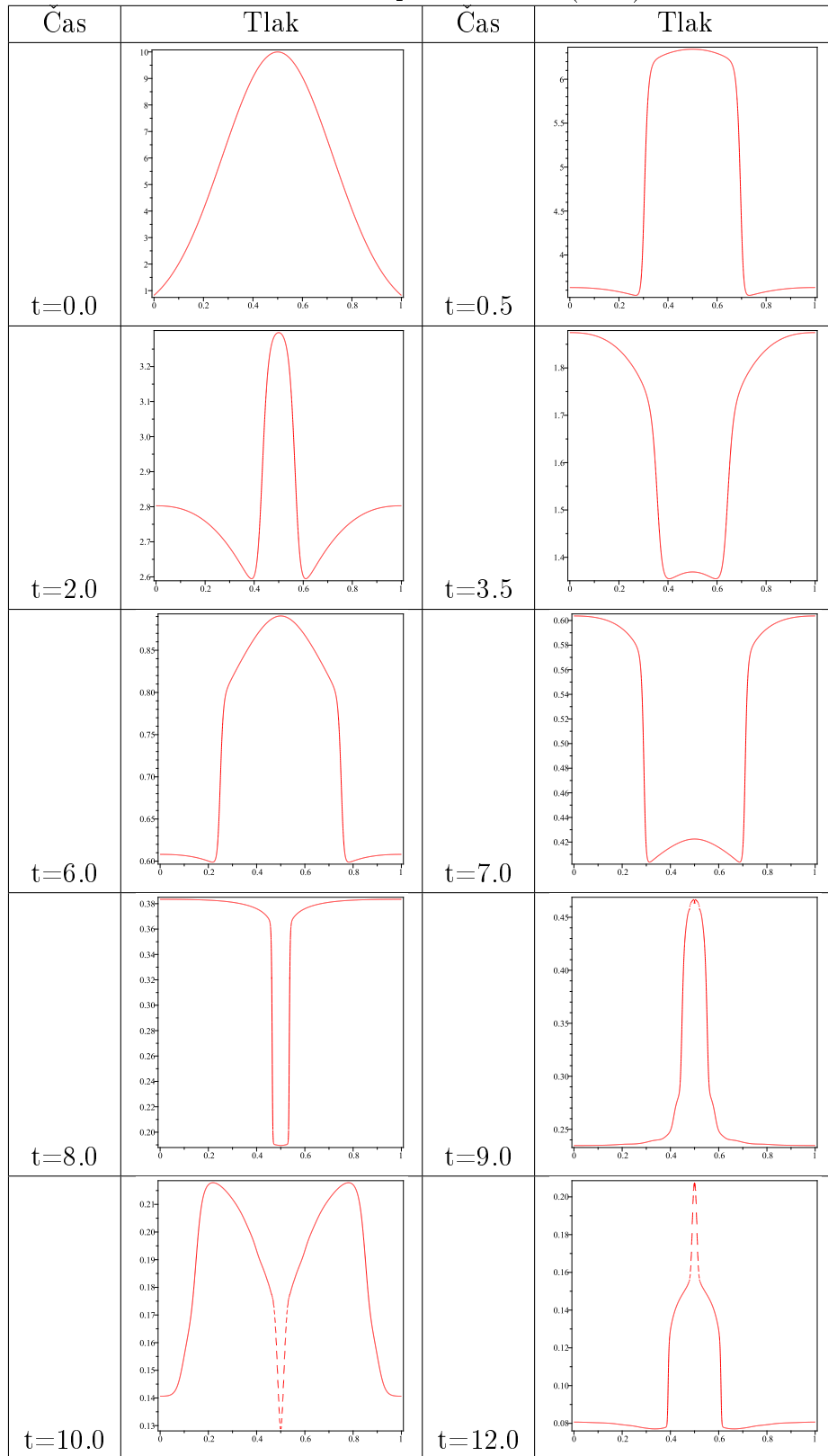
Tabuľka 3.6: Prípád č.1: Rýchlosť (var_2).



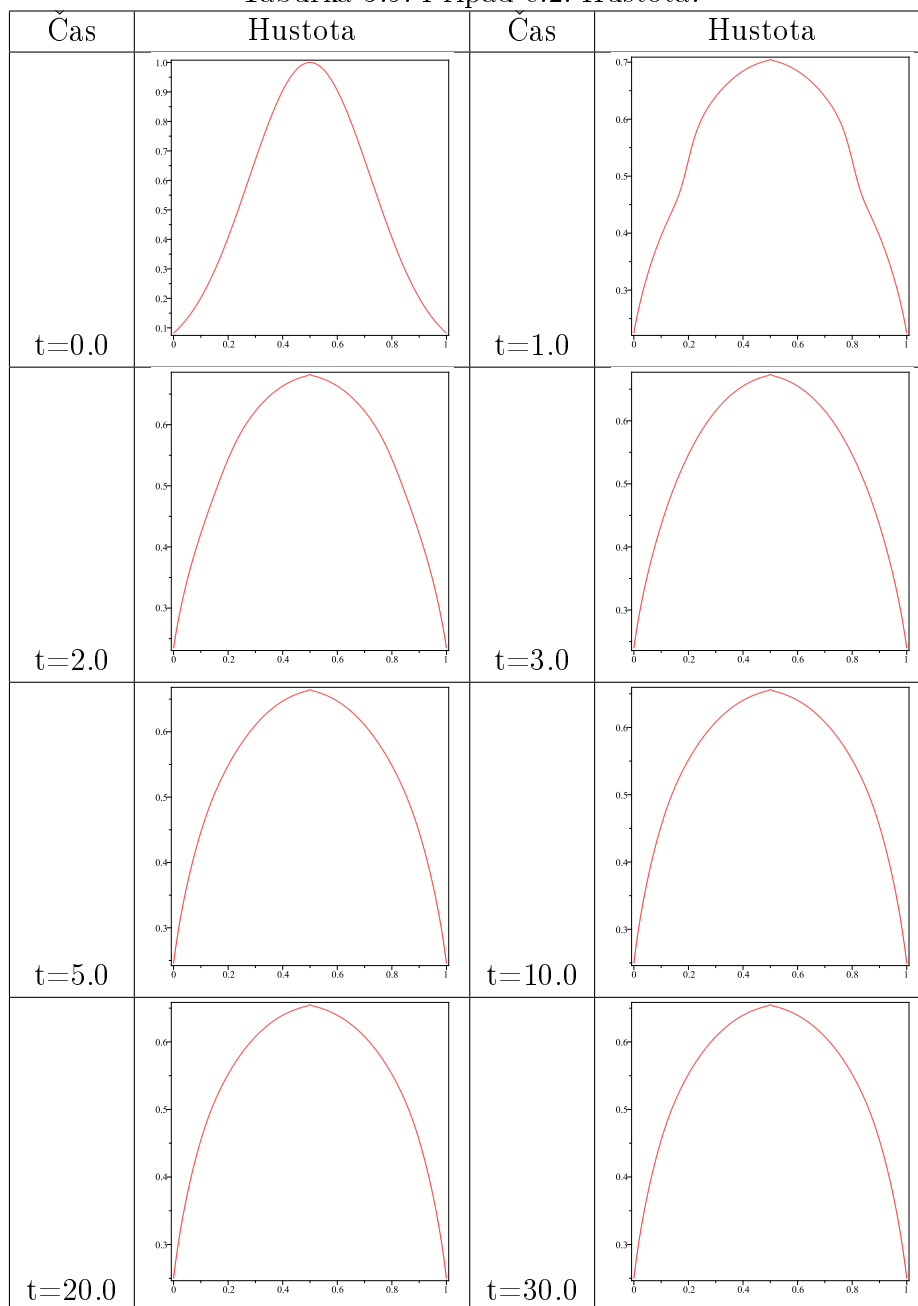
Tabuľka 3.7: Prípád č.1: Teplota (var_2).



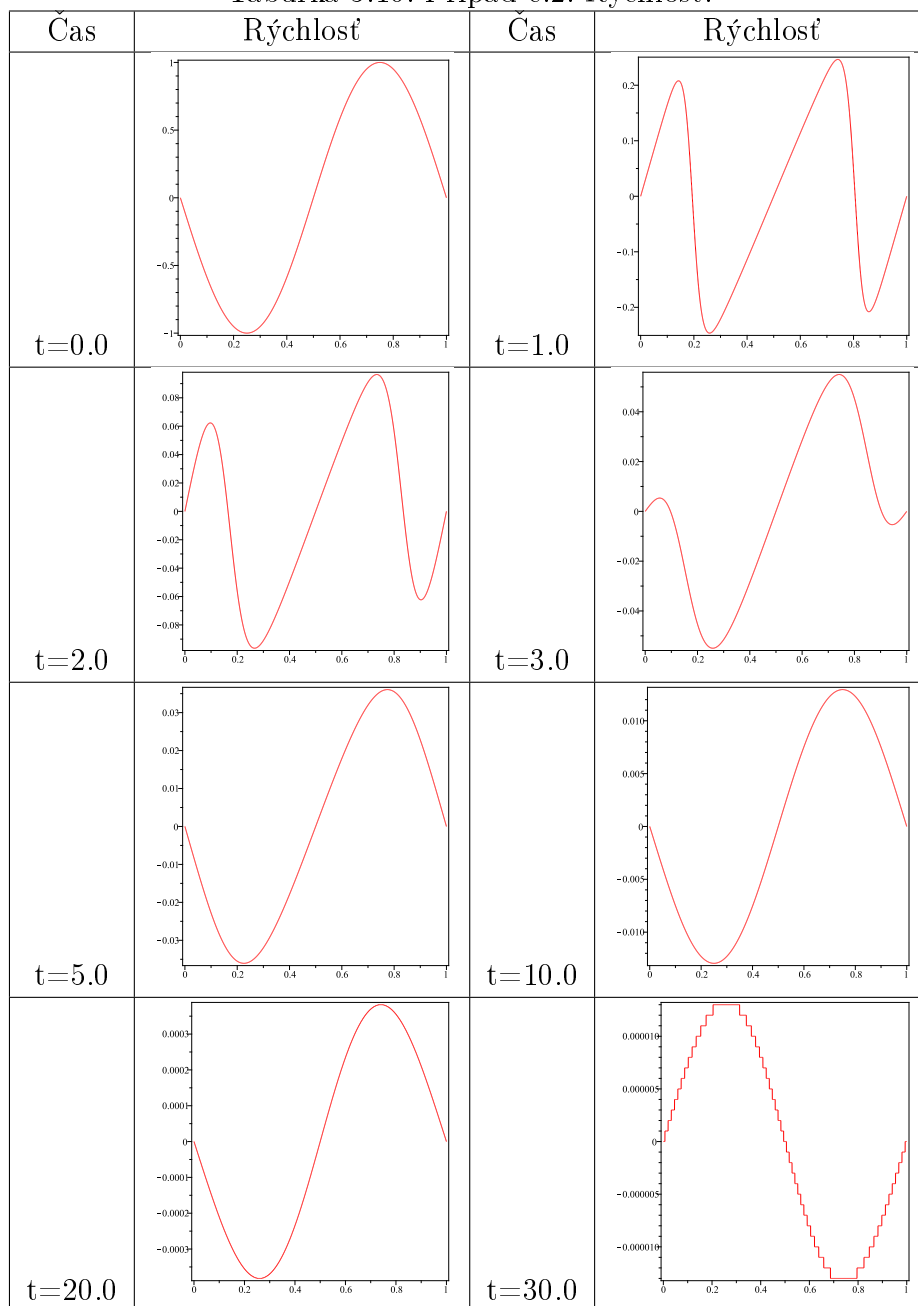
Tabuľka 3.8: Prípád č.1: Tlak (var_2).



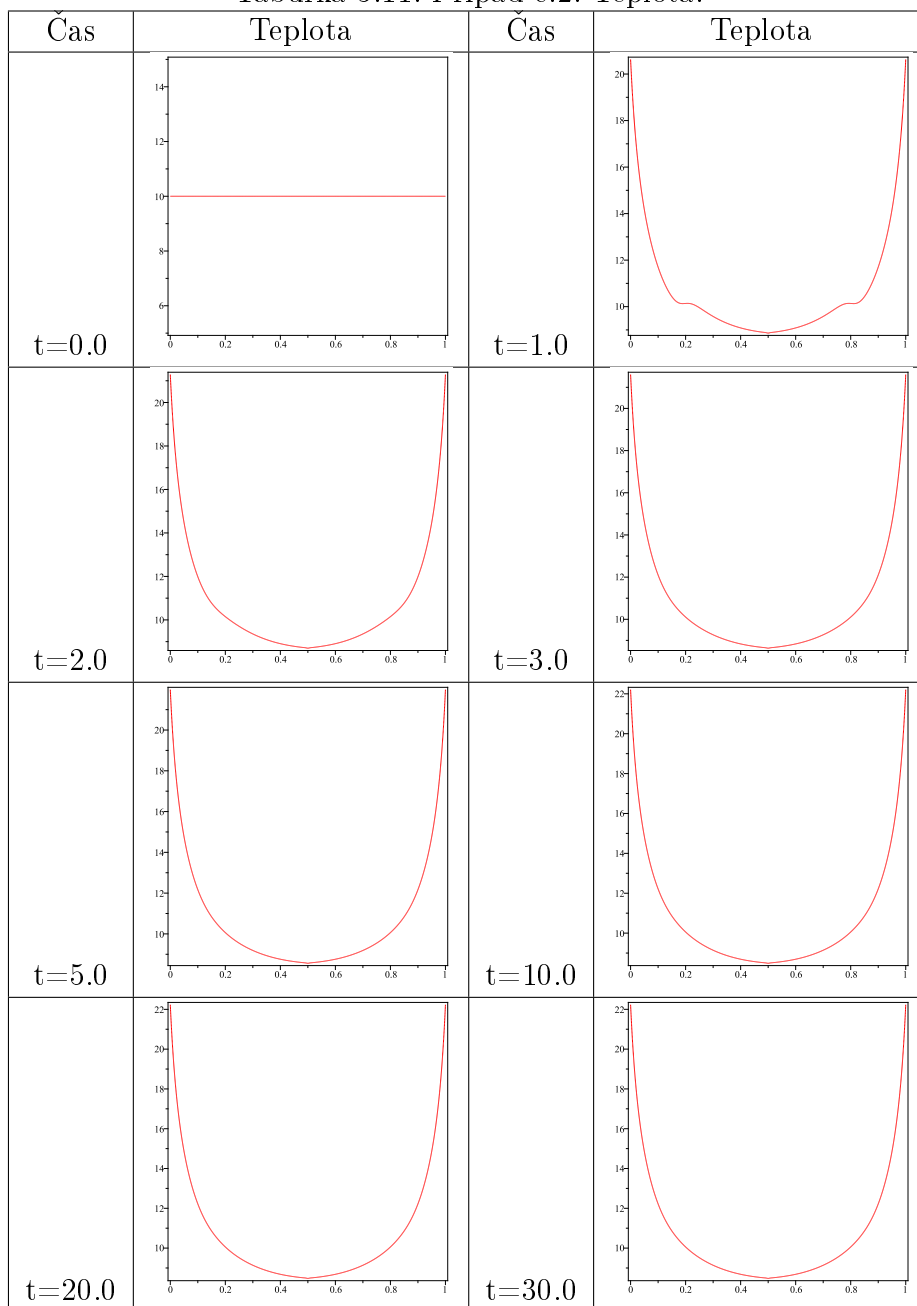
Tabuľka 3.9: Prípád č.2: Hustota.



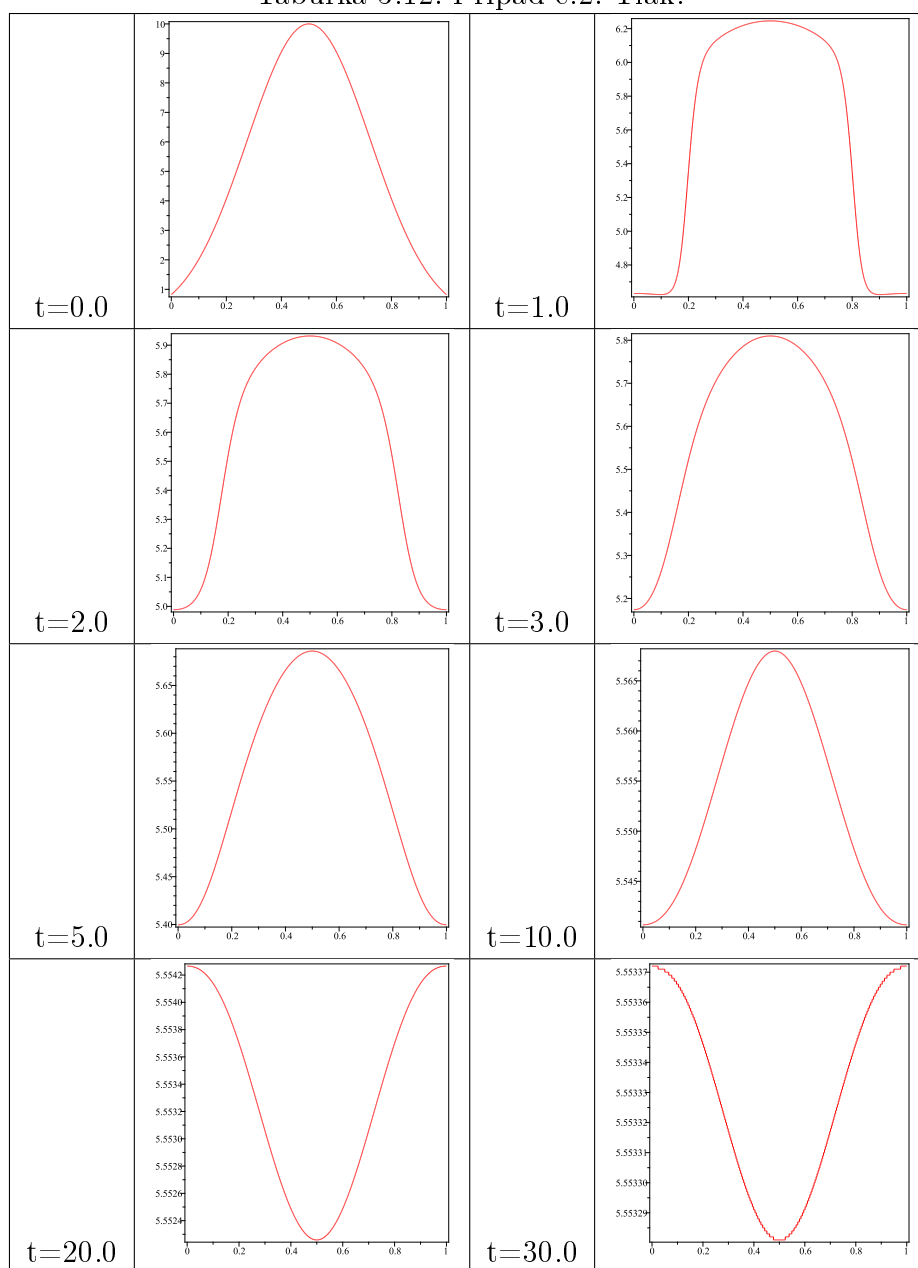
Tabuľka 3.10: Prípád č.2: Rýchlosť.



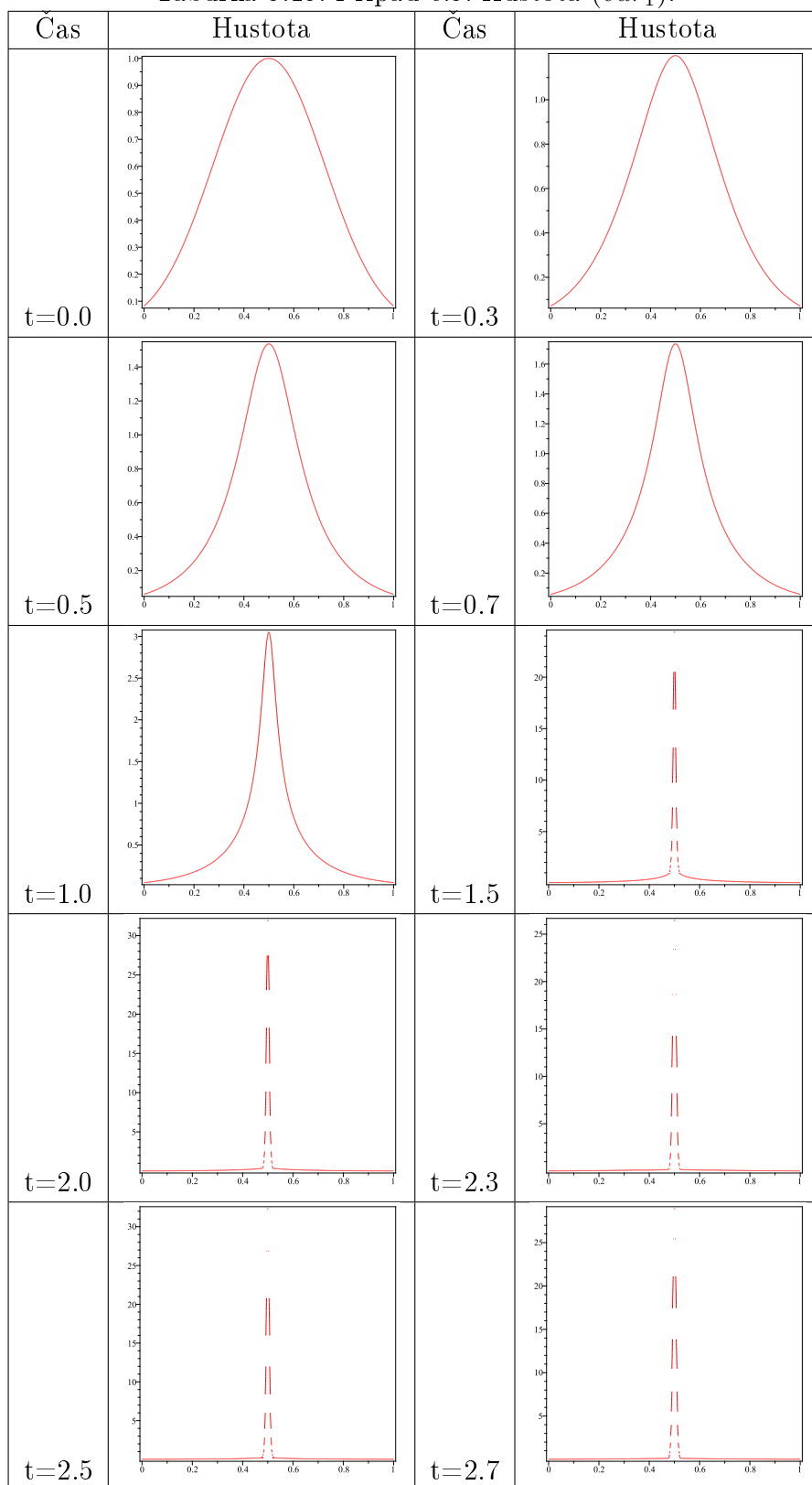
Tabuľka 3.11: Prípád č.2: Teplota.



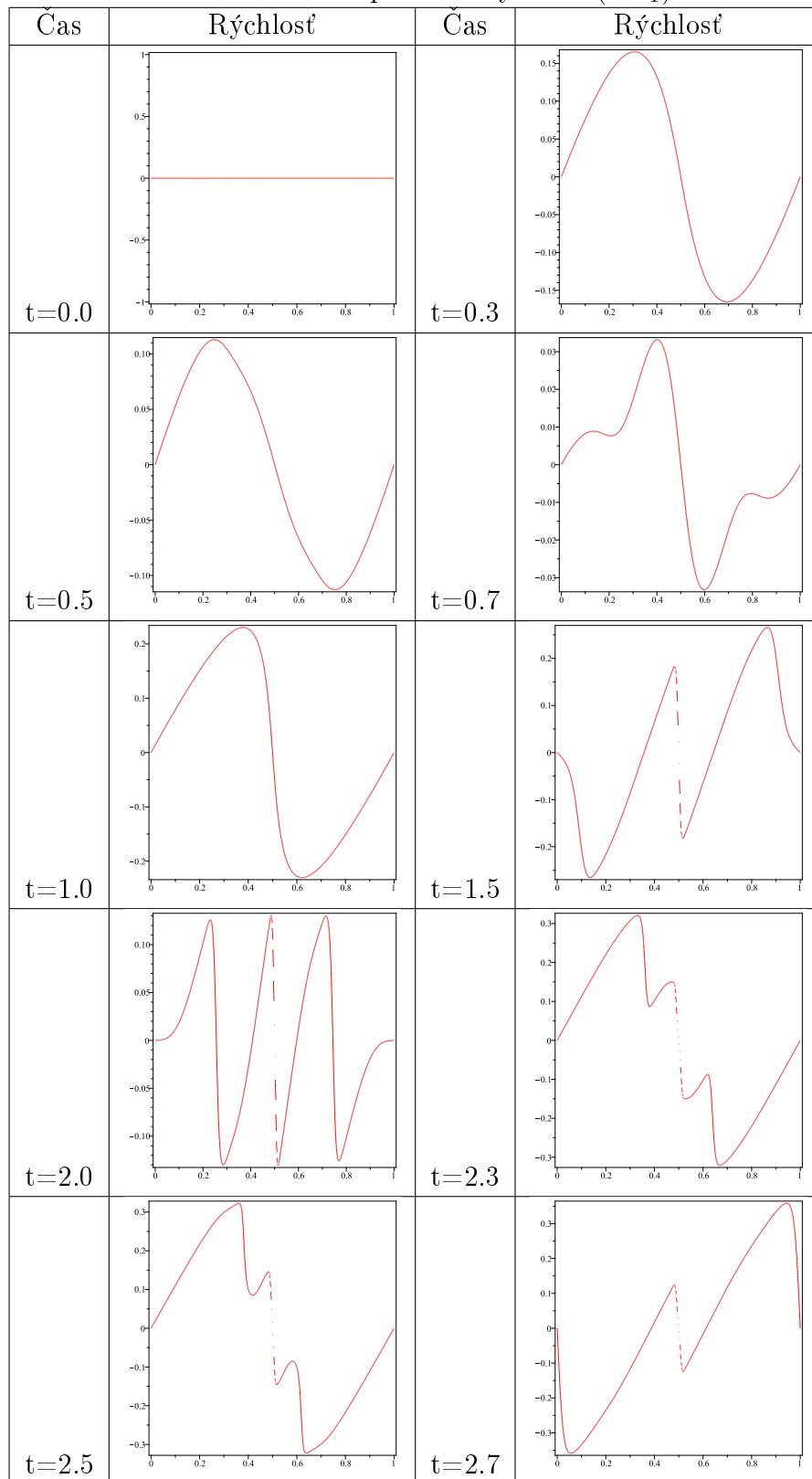
Tabuľka 3.12: Prípád č.2: Tlak.



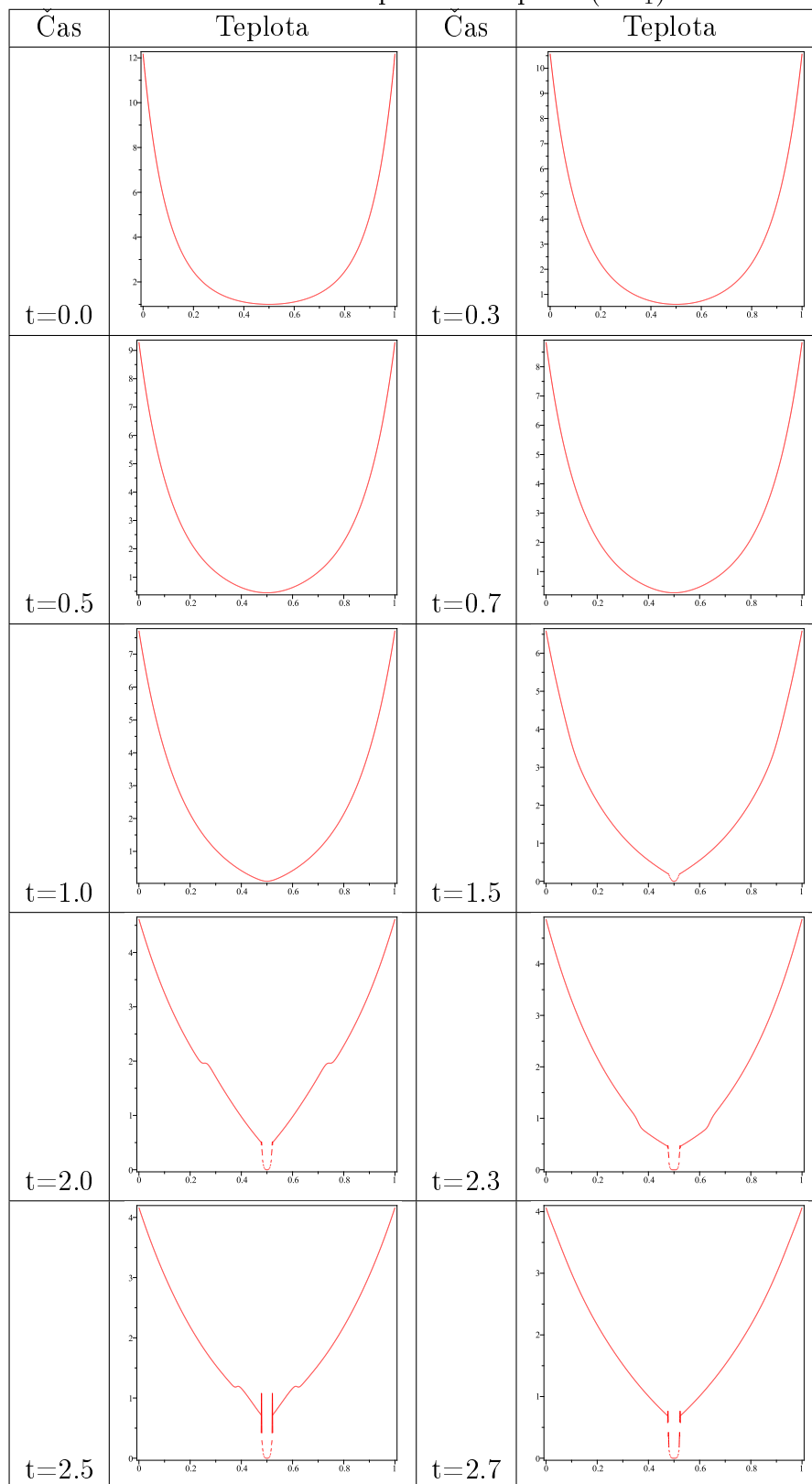
Tabuľka 3.13: Prípád č.3: Hustota (var_1).



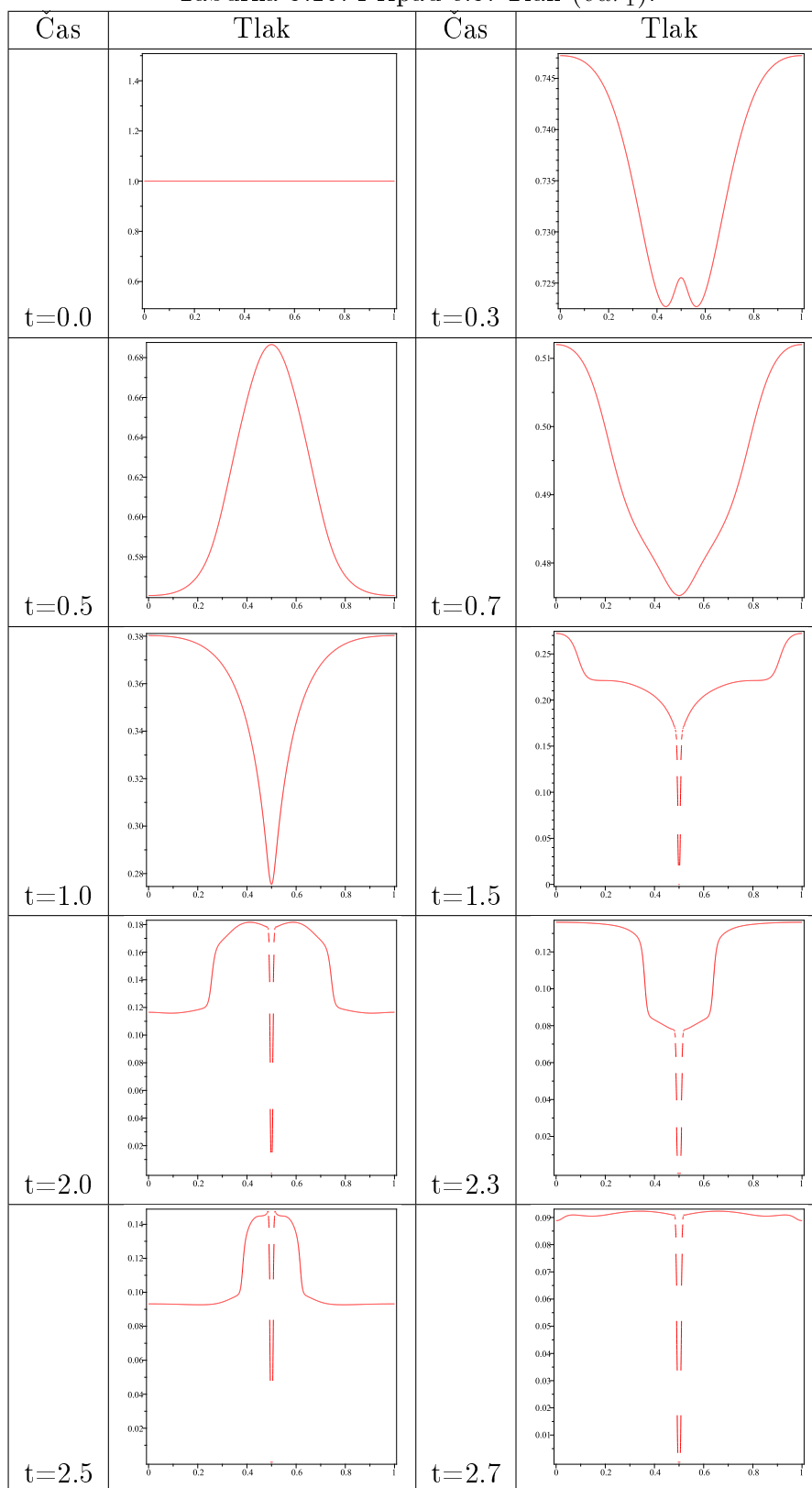
Tabuľka 3.14: Prípád č.3: Rýchlosť (var_1).



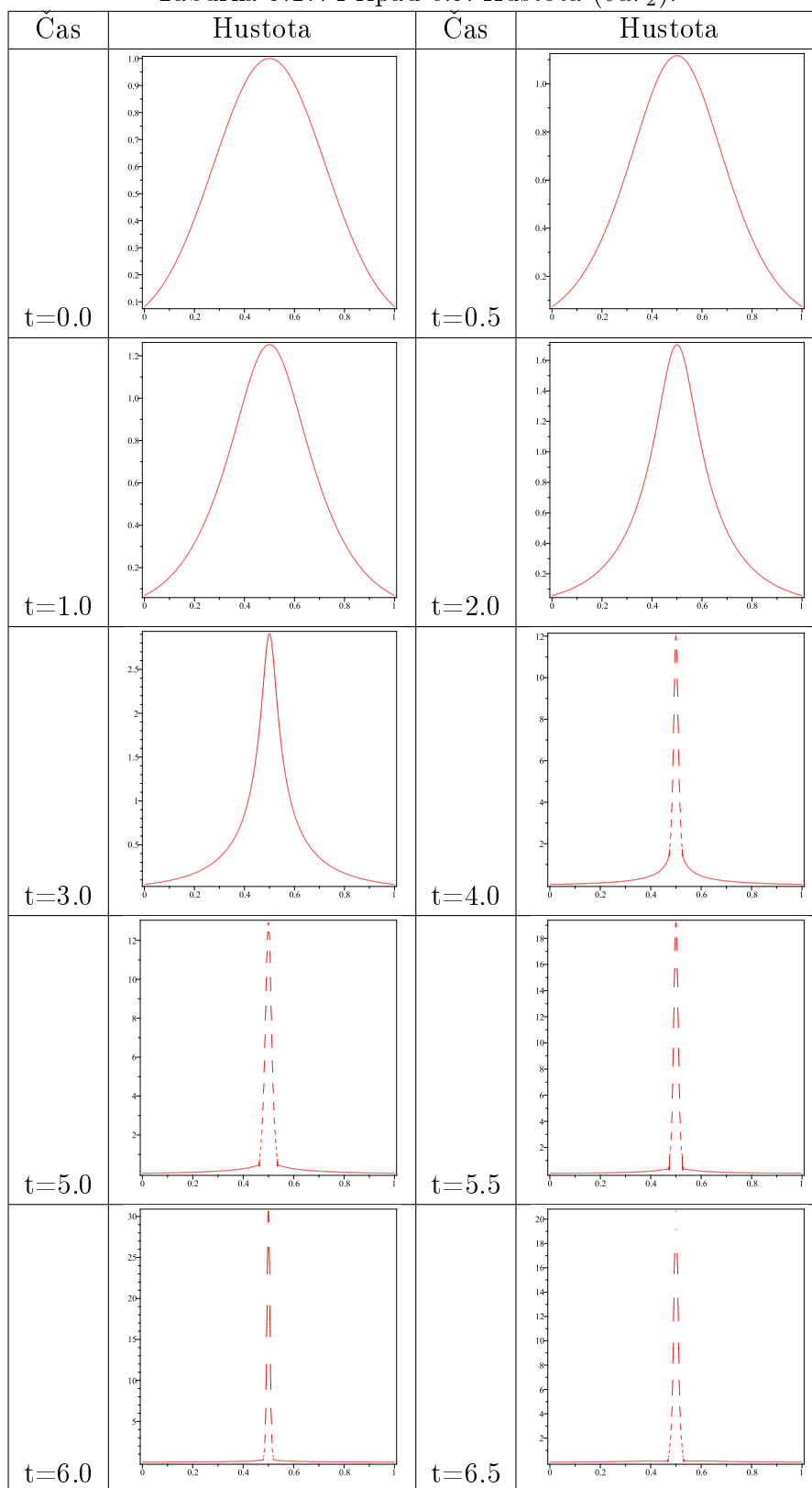
Tabuľka 3.15: Prípado č.3: Teplota (var_1).



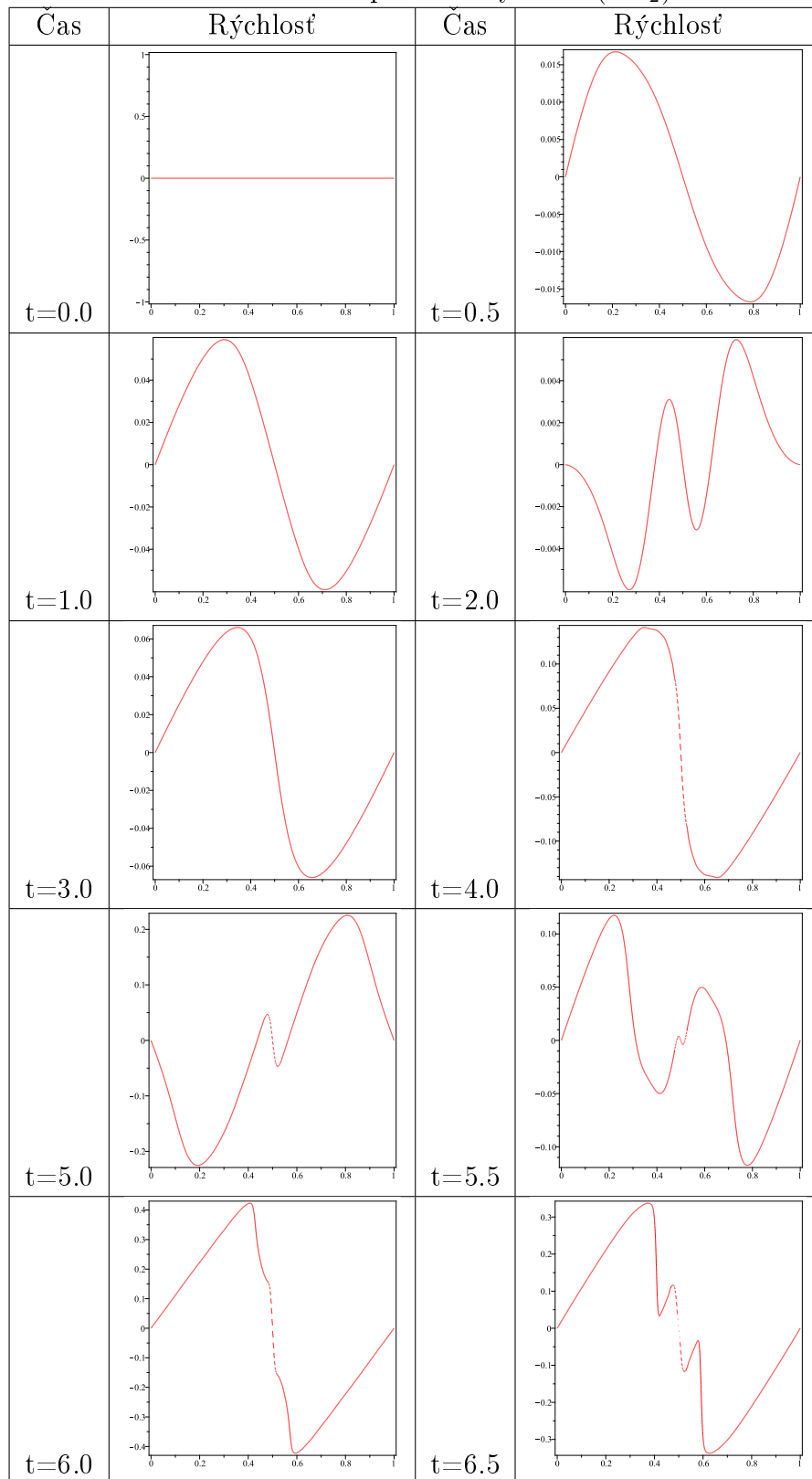
Tabuľka 3.16: Prípád č.3: Tlak (var_1).



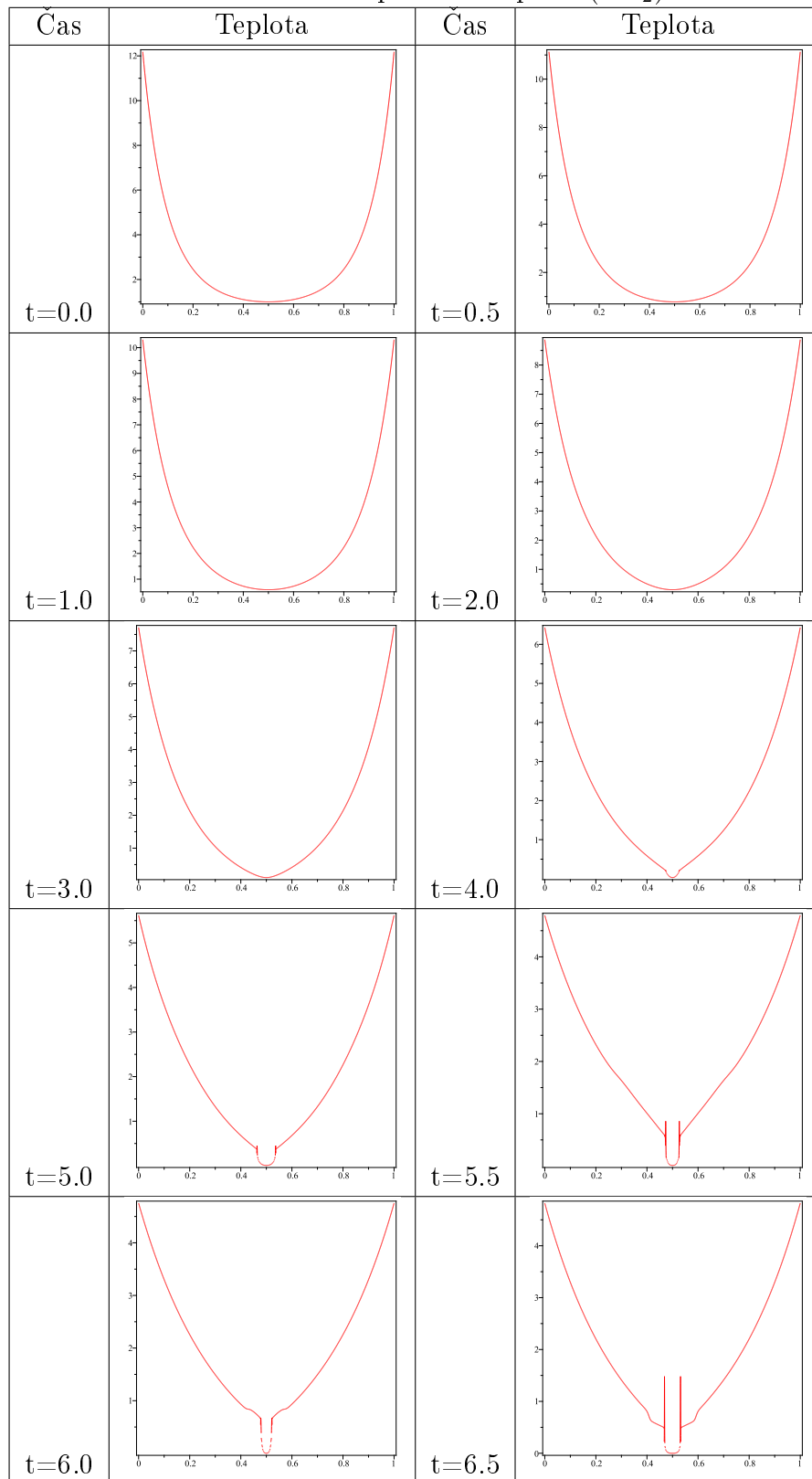
Tabuľka 3.17: Prípád č.3: Hustota (var_2).



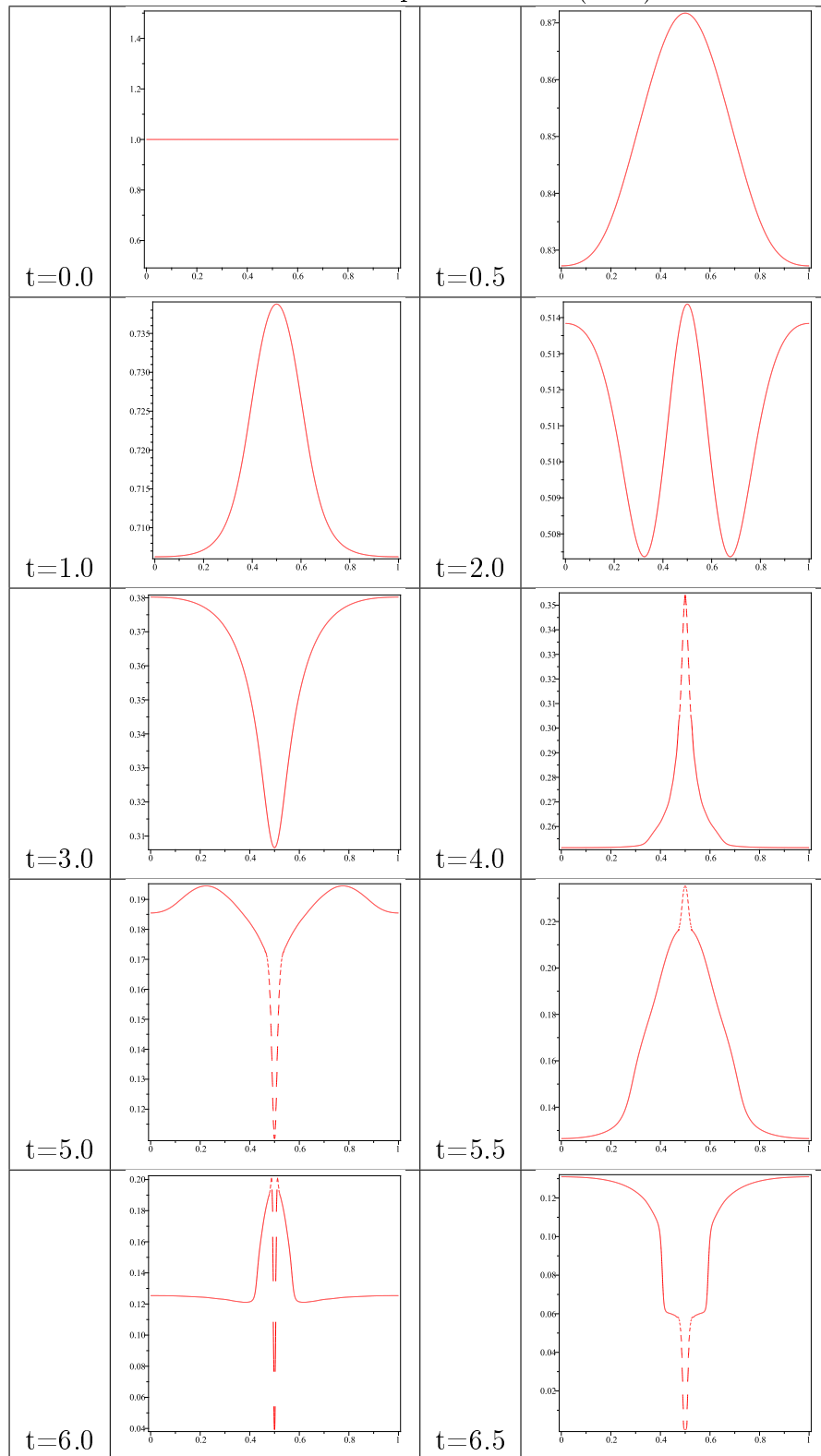
Tabuľka 3.18: Prípád č.3: Rýchlosť (var_2).



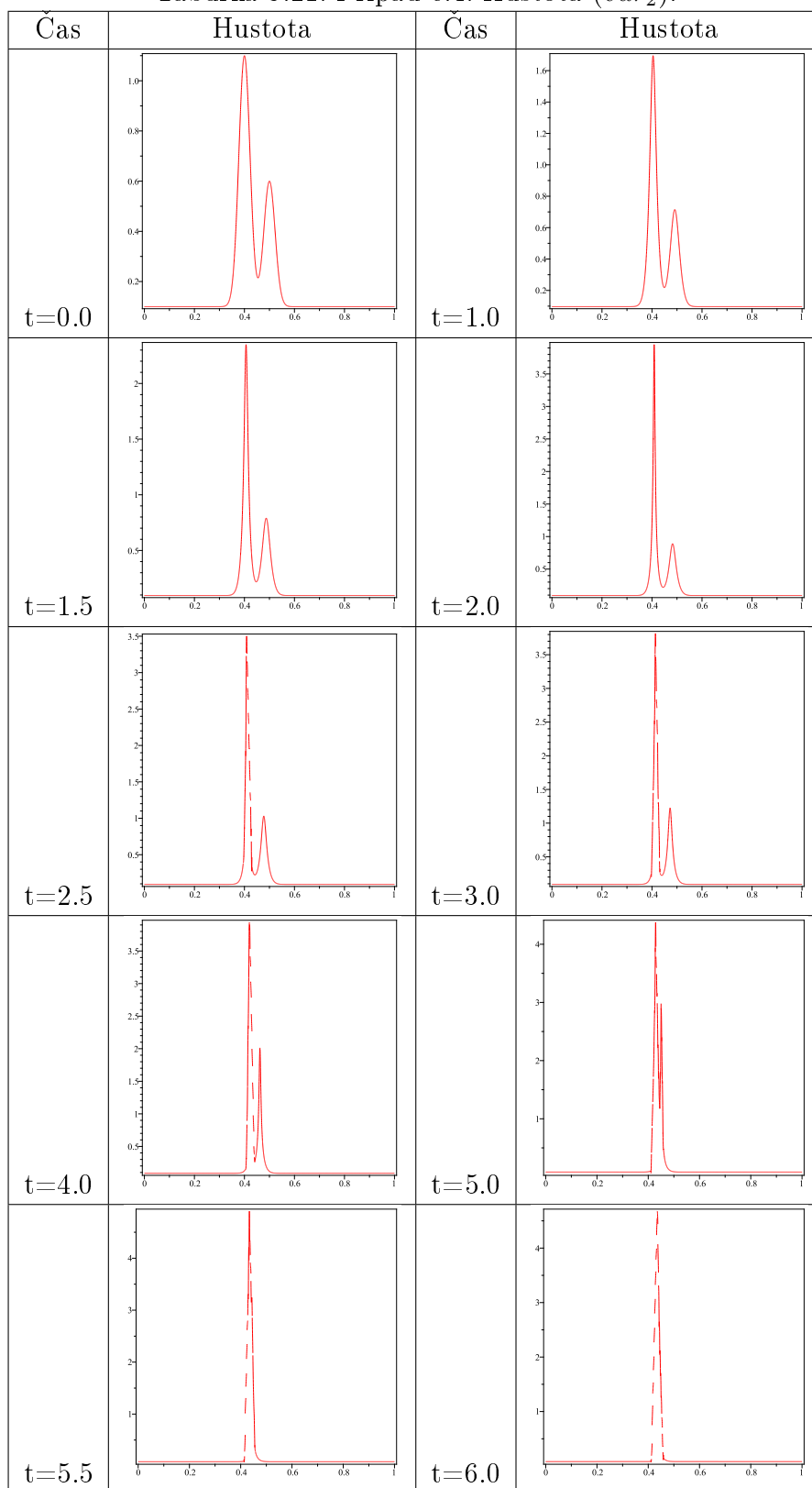
Tabuľka 3.19: Prípád č.3: Teplota (var_2).



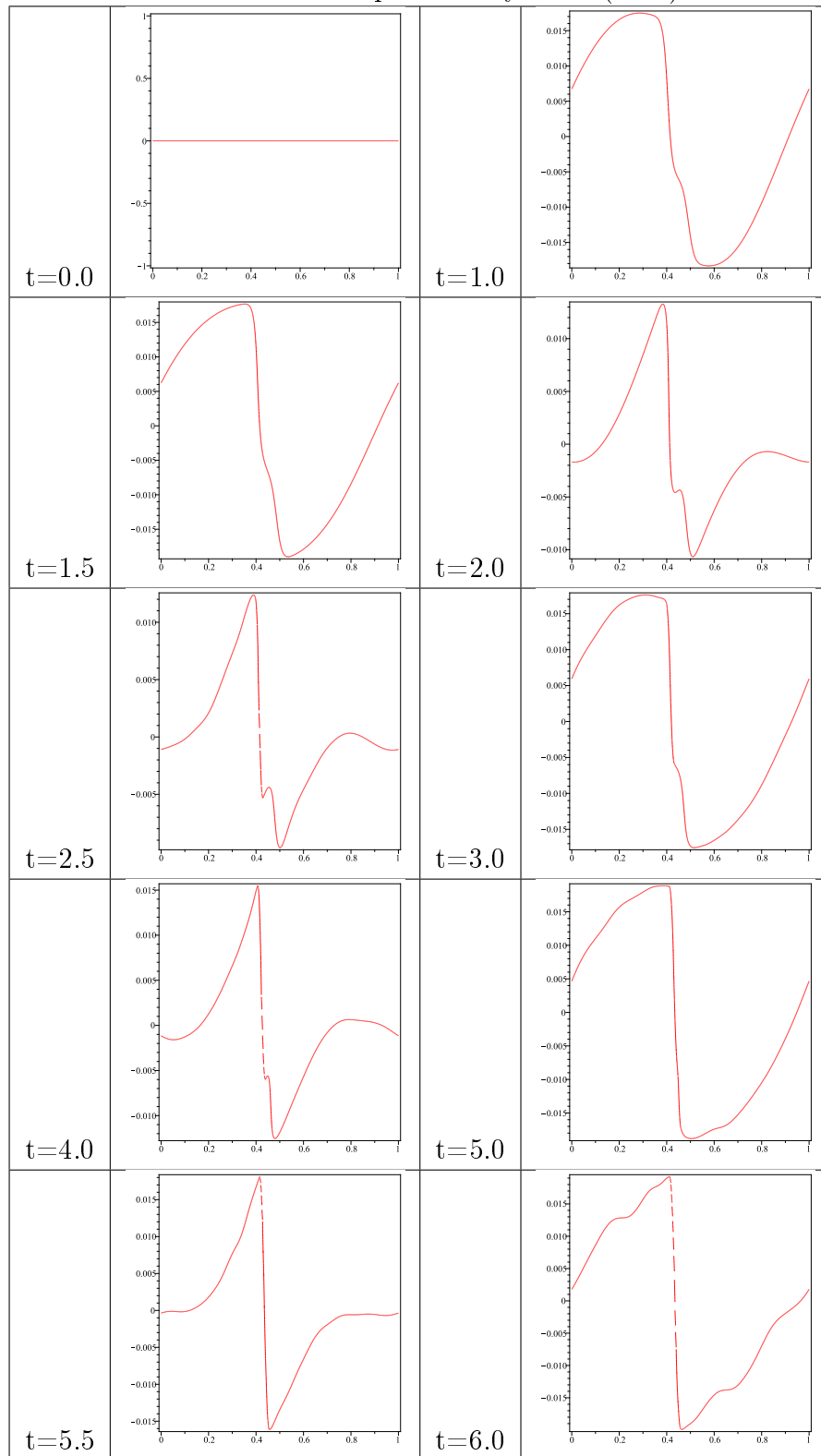
Tabuľka 3.20: Prípád č.3: Tlak (var_2).



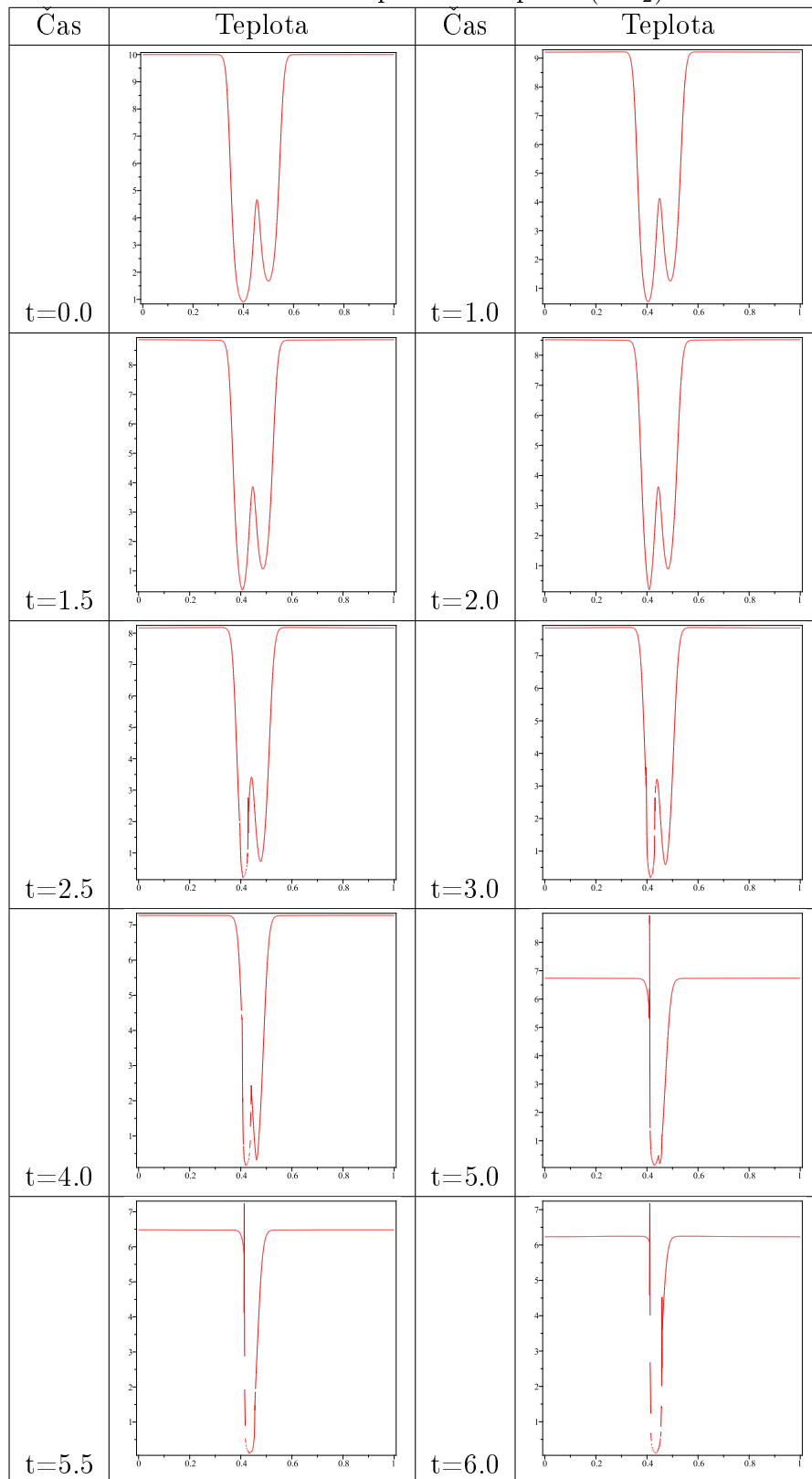
Tabuľka 3.21: Prípád č.4: Hustota (var_2).



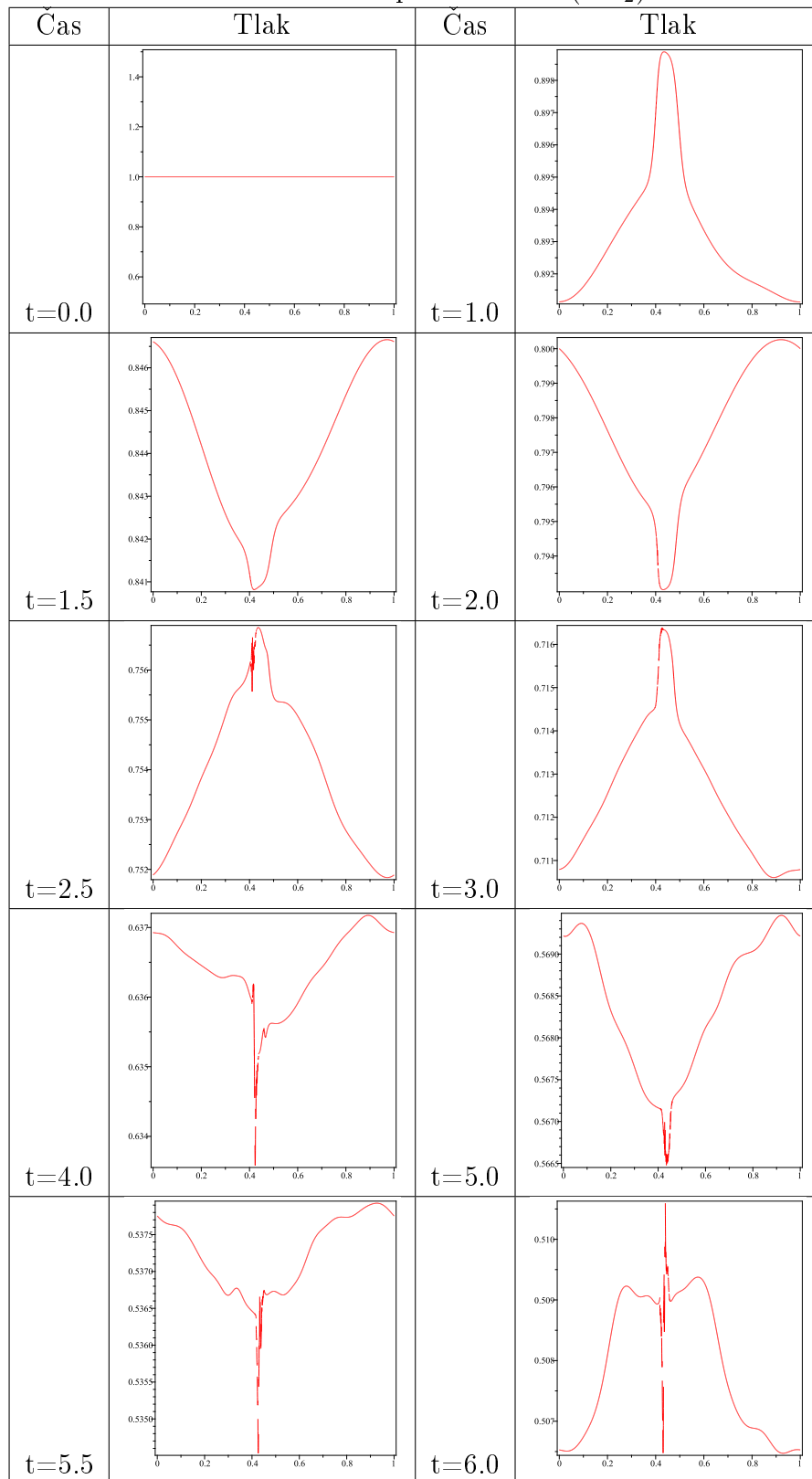
Tabuľka 3.22: Prípád č.4: Rýchlosť (var_2).



Tabuľka 3.23: Prípád č.4: Teplota (var_2).



Tabuľka 3.24: Prípád č.4: Tlak (var_2).



Záver

Cieľom tejto práce bolo numericky riešiť rovnice popisujúce dynamiku krdľov (hejn) - flocking. Náš konkrétny model vychádza z článku [12] a ide o novú variantu Eulerových rovníc s nelokálnym reaktívnym členom.

Prácu sme rozdelili do troch kapitol.

V prvej sme tento problém predstavili pomocou časticových, kinetických a hydrodynamických modelov. Časť kapitoly je zhrnutie článku, z ktorého práca vychádza. Zároveň sme opravili chyby v článku [12]. Tieto chyby boli uznané pôvodnými autormi článku.

Druhú kapitolu sme venovali popisu diskretizácie problému pomocou semi-implicitnej nespojitej Galerkinovej metódy. Táto metóda (z článku [10]) sa veľmi dobre osvedčila pre komplikované problémy stlačiteľného prúdenia popísaného Eulerovými rovnicami. V tejto práci sme navrhli vhodnú semi-implicitnú formuláciu dodatočných reaktívnych členov z [12]. Navrhnutá diskretizácia týchto členov je filozoficky blízka semi-implicitnej linearizácii Eulerových rovníc z článku [10].

V poslednej kapitole sme predstavili naše numerické výsledky počítané programom napísaným v jazyku C. Pomocou testovacieho príkladu sme overili správnosť programu. Potom na štyroch príkladoch sme zisťovali chovanie hustoty, rýchlosti, teploty a tlaku. V príklade č.1 a v príklade č.2 sme sledovali odlišnosť modelu s flockingom a bez flockingu pre rovnakú počiatočnú podmienku. Príklad č. 3 je ukážka toho, čo spraví flocking, ak počiatočná rýchlosť a tlak sú konštantné. Zistili sme, že v prípade kedy nepracuje flocking sa menila len hustota. S flockingom sa zmenili aj ostatné veličiny. Príklad č. 4 bol pokus o napodobnenie dvoch krdľov (hejn), ktoré sú blízko u seba s nulovou počiatočnou rýchlosťou. Tieto dva krdle sa časom „zliali“ dohromady - vytvoril sa jeden krdel (jedno hejno). Celkovo sa ukázalo, že navrhnutá schéma je robustná a presná ako ukazujú numerické experimenty uvedené v poslednej kapitole.

Literatúra

- [1] M. Ballerini, N. Cabibbo, R. Candelier, A. Cavagna, E. Cisbani, I. Giardinà, V. Lecomte, A. Orlandi, G. Parisi, A. Procaccini, M. Viale, and V. Zdravkovic. Interaction ruling animal collective behavior depends on topological rather than metric distance: Evidence from a field study. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, 105(4):1232–1237, 2008.
- [2] A. V. Bobylev, J. A. Carrillo, and I. Gamba. On some properties of kinetic and hydrodynamic equations for inelastic interactions. *J. Statist. Phys.*, 98:743–773, 2000.
- [3] H. Brass and K. Petras. *Quadrature Theory: The Theory of Numerical Integration on a Compact Interval*. Mathematical Surveys and Monographs. American Mathematical Society, 2011.
- [4] J. A. Carrillo, M. R. D’orsogna, and V. Panferov. Double milling in self-propelled swarms from kinetic theory. *2(2):363–378*, 2009.
- [5] J. A. Carrillo, M. Fornasier, G. Toscani, and F. Vecil. Particle, kinetic, and hydrodynamic models of swarming. In Giovanni Naldi, Lorenzo Pareschi, and Giuseppe Toscani, editors, *Mathematical Modeling of Collective Behavior in Socio-Economic and Life Sciences*, Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology, chapter 12, pages 297–336–336. Birkhäuser Boston, Boston, 2010.
- [6] C. Cercignani, R. Illner, and M. Pulvirenti. *The Mathematical Theory of Dilute Gases*. Number sv. 106 in Applied Mathematical Sciences Series. Springer-Verlag GmbH, 1994.
- [7] F. Cucker and S. Smale. Emergent behavior in flocks. *Automatic Control, IEEE Transactions on*, 52(5):852–862, 2007.
- [8] M. R. D’Orsogna, Y. L. Chuang, A. L. Bertozzi, and L. S. Chayes. Self-Propelled Particles with Soft-Core Interactions: Patterns, Stability, and Collapse. *Physical Review Letters*, 96(10):104302, March 2006.
- [9] J. Dyer, C. Ioannou, L. Morrell, D. Croft, I. Couzin, D. Waters, and J. Krause. Consensus decision making in human crowds. *Animal Behaviour*, 75(2):461–470, February 2008.
- [10] M. Feistauer and V. Kučera. On a robust discontinuous Galerkin technique for the solution of compressible flow. *Journal of Computational Physics*, 224(1):208 – 221, 2007. Special Issue Dedicated to Professor Piet Wesseling on the occasion of his retirement from Delft University of Technology.
- [11] J. Felcman and I. Straškraba. *Mathematical and Computational Methods for Compressible Flow*. Numerical mathematics and scientific computation. Oxford University Press, 2003.

- [12] M. Fornasier, J. Haškovec, and G. Toscani. Fluid dynamic description of flocking via the Povzner–Boltzmann equation. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 240(1):21 – 31, 2011.
- [13] S.-Y. Ha and E. Tadmor. From particle to kinetic and hydrodynamic descriptions of flocking. *Kinetic and Related models*, 1(3), June 2008.
- [14] N. Kovvali. *Theory and Applications of Gaussian Quadrature Methods*. Synthesis Lectures on Algorithms and Software in Engineering. Morgan & Claypool, 2011.
- [15] H. Kunz and C. K. Hemelrijk. Simulations of the social organization of large schools of fish whose perception is obstructed. *Applied Animal Behaviour Science*, 138(3–4):142 – 151, 2012. Special Issue: Living In Large Groups.
- [16] M. Lachowicz and M. Pulvirenti. A stochastic system of particles modelling the Euler equations. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 109:81–93, March 1990.
- [17] J.K. Parrish, S.V. Viscido, and D. Grünbaum. Self-organized fish schools: An examination of emergent properties. *Biol. Bull*, 202:296–305, 2002.
- [18] A.Y. Povzner. The boltzmann equation in kinetic theory of gases. *Amer. Math. Soc.*, 47(2):193–216, 1962.
- [19] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. Section 4.6. Gaussian Quadratures and Orthogonal Polynomials. In *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 3 edition, 2007.
- [20] C. W. Reynolds. Flocks, herds and schools: A distributed behavioral model. In M. C. Stone, editor, *Proceedings of the 14th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*, volume 21 of *SIGGRAPH '87*, pages 25–34. ACM, New York, NY, 1987.
- [21] R.A. Serway and J.W. Jewett. *Physics for Scientists & Engineers*. Thomson-Brooks/Cole, 2004.
- [22] E.F. Toro. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009.
- [23] G. Toscani. Kinetic and hydrodynamic models of nearly elastic granular flows. *Monatshefte für Mathematik*, 142(1-2):179–192, 2004.
- [24] A. Živčáková. *Přesné a přibližné řešiče Riemannova problému pro Eulerovy rovnice*. Bachelor thesis, Charles University in Prague, Faculty of Mathematics and Physics, 2011.