Разностные схемы для уравнения конвективной диффузии. Лекция 3

О.С.Мажорова

Сентябрь 2020 г.

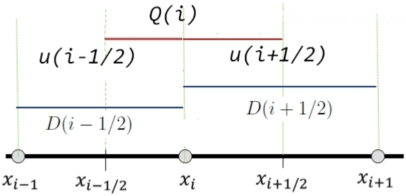
Нестационарная задача

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial (uQ)}{\partial x} = D\frac{\partial^2 Q}{\partial x^2}. \qquad (1)$$

Пусть $u = const > 0$; и число Пекле $Pe = \dfrac{uL}{D} \gg 1$.
В области $\Omega = \{t \geq 0,\ x \in [-L, L]\}$ введём сетку
$\Omega_{\tau h} = \Omega_\tau \times \Omega_h,\ \ \Omega_\tau = \{t_0 = 0, t_{k+1} = t_k + \tau\}$,
$\Omega_h = \{x_i, i = -N_1, -N_1+1 \ldots, N_2-1, N_2, x_{-N_1} = -L, x_{N_2} = L\}$
с шагами h_i – по пространству и τ – по времени.

Обозначения

Сеточные функции определяются как и раньше: $Q_i = Q(x_i)$, $D_{i+\frac{1}{2}} = D(x_{i+\frac{1}{2}})$ $\quad u_{i+\frac{1}{2}} = u(x_{i+\frac{1}{2}})$.



Сеточные производные.

Функция задана в узлах: $Q_x = \dfrac{Q_{i+1} - Q_i}{h_{i+\frac{1}{2}}}$ и $Q_{\bar{x}} = \dfrac{Q_i - Q_{i-1}}{h_{i-\frac{1}{2}}}$.

Функция задана в потоковых точках: $Q_{\hat{x}} = \dfrac{Q_{i+\frac{1}{2}} - Q_{i-\frac{1}{2}}}{\hbar_i}$.

Производная по времени: $Q_t = \dfrac{Q_{k+1} - Q_k}{\tau}$

Построение разностной схемы

Проинтегрируем уравнение (1) по ячейке сетки $[t_{k+1}, t_k] \times [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$.

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial Q}{\partial t} dxdt + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial x} \left[uQ - D_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial Q}{\partial x} \right] dxdt =$$

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{\partial}{\partial t} \Big[\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} Q_i dx \Big] dt + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \Big[W_{i+\frac{1}{2}} - W_{i-\frac{1}{2}} \Big] dt \approx$$

$$\Big[Q_i^{k+1} - Q_i^k \Big] \hbar_i + \Big[W^{(\sigma)}_{i+\frac{1}{2}} - W^{(\sigma)}_{i-\frac{1}{2}} \Big] \tau = 0; \qquad (2)$$

Поделив (2) на $\tau \hbar_i$, получим

Схема с весами

$$Q_t + \frac{(uQ)^{(\sigma)}_{i+\frac{1}{2}} - (uQ)^{(\sigma)}_{i-\frac{1}{2}}}{\hbar_i} = DQ^{(\sigma)}_{x\hat{x}} \qquad (3)$$

Здесь $Q_t = \dfrac{Q_i^{k+1} - Q_i^k}{\tau}$; параметр σ определяет аппроксимацию по времени: $Q^{(\sigma)} = \sigma Q^{k+1} + (1-\sigma)Q^k$, $\widehat{Q} = Q^{k+1}$. При вычислении конвективного потока используется та или иная интерполяция искомой функции в потоковую точку.

Найдем решение разностной задачи (3) на отрезке $x \in [-L, L]$ с начальными условиями

$$Q_0(x) = \begin{cases} 1, & x \le 0 \\ 0, & x > 0 \end{cases} \qquad (4)$$

В точках $x{=}-L$ и $x{=}L$ зададим соответствующие значения точного решения задачи (1) на прямой с начальными данными (4)

Решение модельной задачи.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial (uQ)}{\partial x} = D\frac{\partial^2 Q}{\partial x^2}. \tag{5}$$

Сделаем замену переменных:

$$s = t; \quad y = x - ut \quad Q(x,t) = Q(y(x,t), s(t))$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial Q}{\partial s}\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\partial Q}{\partial s} - u\frac{\partial Q}{\partial y}; \frac{\partial Q}{\partial x} = \frac{\partial Q}{\partial y} \Rightarrow \frac{\partial Q}{\partial s} = D\frac{\partial^2 Q}{\partial y^2}$$

Решение – интеграл Пуассона:

$$Q = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\Big[\frac{\sqrt{\pi}}{2} - \int\limits_0^{\frac{y}{2\sqrt{Ds}}} e^{-z^2}dz\Big] = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\Big[\frac{\sqrt{\pi}}{2} - \int\limits_0^{\frac{x-ut}{2\sqrt{Dt}}} e^{-z^2}dz\Big] \tag{6}$$

Задача. Проверить, что (6) удовлетворяет уравнению (5)

Решение разностной задачи. Направленные разности $P_h = 25$

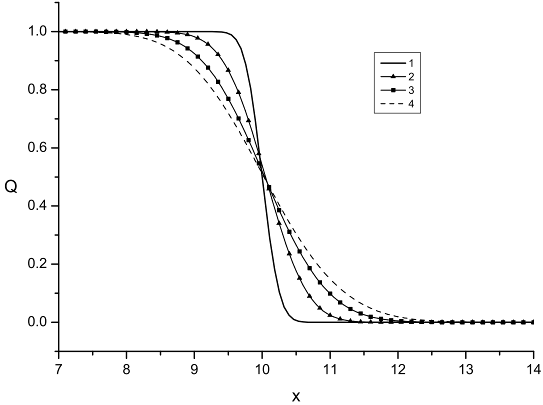


Рис.: Результаты расчетов по схеме с направленными разностями 1 – точное решение, $2 - \sigma = 0$, $3 - \sigma = 0.5$, $4 - \sigma = 1$.

Решение разностной задачи. Центральные разности $P_h = 25$

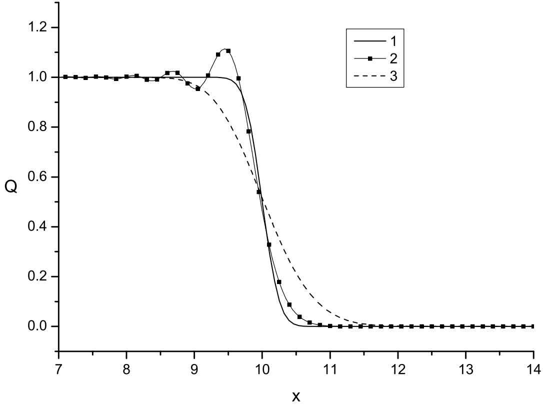


Рис.: Результаты расчетов по схеме с центральными разностями 1 – точное решение, 2 – $\sigma = 0.5$, 3 – $\sigma = 1$.

Диффузия и дисперсия

$$\frac{\partial Q}{\partial t}+u\frac{\partial Q}{\partial x}=D\frac{\partial^2 Q}{\partial x^2}+\beta\frac{\partial^3 Q}{\partial x^3}+\gamma\frac{\partial^4 Q}{\partial x^4}$$

$$Q(t,x) = e^{-p(m)t}e^{\mathbf{i}m[x-q(m)t]}, \tag{7}$$

где m – волновое число, $p(m)$ – скорость затухания амплитуды, $q(m)$ – скорость распространения волны, $\mathbf{i}^2 = -1$.

$$p(m) = Dm^2 - \gamma m^4, \quad q(m) = u + m^2\beta \tag{8}$$

Скорость убывания амплитуды определяется длиной волны $(T = \frac{2\pi}{m})$. Появилась зависимость скорости движения от длины волны–это дисперсия.

Метод дифференциального приближения

Пусть $\mathcal{L}(Q)=0$ – дифференциальное уравнение, а $\mathcal{L}_h^\tau(Q)=0$ – его разностная аппроксимация. Оператор $\mathcal{L}_h^\tau(Q)=0$ рассматривается на том же классе функций, что и исходное дифференциальное уравнение.
Используя разложение в ряд Тейлора, уравнение $\mathcal{L}_h^\tau(Q)=0$ можно записать в виде

$$\mathcal{L}_h^\tau(Q)=\mathcal{L}(Q)+\mathcal{E}(Q,\tau,h)=0, \tag{9}$$

где $\mathcal{E}(Q,\tau,h)$ – погрешность аппроксимации.
Соотношение (9) преобразуется так, чтобы в $\mathcal{E}(Q,\tau,h)$ содержались только пространственные производные. Производные по t и смешанные производные по времени и пространству исключаются с помощью самого уравнения (9), продифференцированного необходимое число раз.
Полученное дифференциальное уравнение с бесконечным числом членов называется дифференциальным представлением разностной схемы.

$$\mathcal{L}_h^\tau(Q)=\mathcal{L}(Q)+\sum_{l=n}^{\infty}a_l\frac{\partial^l Q}{\partial x^l}=0 \tag{10}$$

n – порядок исходного дифференциального уравнения.

Дифференциальное приближение для схемы с направленными разностями

Дифференциальное приближение получается, если в $\mathcal{E}(Q, \tau, h)$ сохранить только конечное число членов.
Построим дифференциальное приближение для схемы

$$Q_t + uQ_{\bar{x}}^{(\sigma)} - DQ_{\bar{x}x}^{(\sigma)} = 0 \qquad (11)$$

С помощью $Q^{(\sigma)} = Q^{(0.5)} + (\sigma - 0.5)\tau Q_t$, перепишем (11) в виде

$$Q_t + uQ_{\bar{x}}^{(0.5)} - DQ_{\bar{x}x}^{(0.5)} + u(\sigma - 0.5)\tau Q_{t\bar{x}} - D(\sigma - 0.5)\tau Q_{t\bar{x}x} = 0. \qquad (12)$$

Используя разложение функции Q в ряд Тейлора в окрестности точки $(t_k + \tau/2, x_i)$, получим представление для разностных операторов, входящих в (12). Например,

$$\begin{aligned} Q_t &= \frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + \frac{\tau^2}{24}\frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t^3} + \dots \\ Q^{(0.5)} &= \bar{Q} + \frac{\tau^2}{8}\frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial t^2} + \dots \\ Q_{\bar{x}}^{(0.5)} &= \frac{\partial \bar{Q}}{\partial x} - \frac{h}{2}\frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} + \frac{h^2}{6}\frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial x^3} + \frac{\tau^2}{8}\frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t^2 \partial x} + \dots \quad \text{и т.д.} \end{aligned} \qquad (13)$$

Здесь $\bar{Q} = Q(t_k + \tau/2, x_i)$. Подставим (13) и аналогичные выражения для $Q_{t\bar{x}}$ и $Q_{\bar{x}x}$ в (12):

$$\frac{\partial\bar{Q}}{\partial t}+u\frac{\partial\bar{Q}}{\partial x}-D\frac{\partial^2\bar{Q}}{\partial x^2}-\frac{uh}{2}\frac{\partial^2\bar{Q}}{\partial x^2}+u(\sigma-0.5)\tau\frac{\partial^2\bar{Q}}{\partial t\partial x}+\frac{uh^2}{6}\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial x^3} \quad (14)$$

$$+\frac{\tau^2}{24}\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial t^3}-(\sigma-0.5)(u\frac{\tau h}{2}+D\tau)\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial t\partial x^2}+\frac{u\tau^2}{8}\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial t^2\partial x}+\ldots=0$$

Исключим $u(\sigma-0.5)\tau\dfrac{\partial^2\bar{Q}}{\partial t\partial x}$ из (14). Для этого подействуем оператором $-u(\sigma-0.5)\tau\dfrac{\partial}{\partial x}$ на уравнение (14) и найденное уравнение прибавим к (14). В результате получим

$$\frac{\partial\bar{Q}}{\partial t}+u\frac{\partial\bar{Q}}{\partial x}-D\frac{\partial^2\bar{Q}}{\partial x^2}-\left(\frac{uh}{2}+u^2\tau(\sigma-0.5)\right)\frac{\partial^2\bar{Q}}{\partial x^2}+$$

$$\left(\frac{uh^2}{6}+u^2\frac{\tau h}{2}(\sigma-0.5)+uD\tau(\sigma-0.5)\right)\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial x^3}+\frac{\tau^2}{24}\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial t^3}$$

$$-(\sigma-0.5)\left(u\frac{\tau h}{2}+u^2\tau^2(\sigma-0.5)+D\tau\right)\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial t\partial x^2}+\frac{u\tau^2}{8}\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial t^2\partial x}+\ldots=0 \quad (15)$$

Аналогично исключим член $\dfrac{\tau^2}{24}\dfrac{\partial^3\bar{Q}}{\partial t^3}$, подействовав на (15) оператором $-\dfrac{\tau^2}{24}\dfrac{\partial^2}{\partial t^2}$ и сложив полученное уравнение с (15).

$$\frac{\partial\bar{Q}}{\partial t}+u\frac{\partial\bar{Q}}{\partial x}-D\frac{\partial^2\bar{Q}}{\partial x^2}-\left(\frac{uh}{2}+u^2\tau(\sigma-0.5)\right)\frac{\partial^2\bar{Q}}{\partial x^2}+$$
$$\left(\frac{uh^2}{6}+u^2\frac{\tau h}{2}(\sigma-0.5)+uD\tau(\sigma-0.5)\right)\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial x^3} \tag{16}$$
$$-(\sigma-0.5)\left(u\frac{\tau h}{2}+u^2\tau^2(\sigma-0.5)+D\tau\right)\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial t\partial x^2}+\frac{u\tau^2}{12}\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial t^2\partial x}+\ldots=0$$

Смешанные производные исключаются с помощью равенств:

$$\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial t\partial x^2}+u\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial x^3}+\cdots=0$$
$$\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial t^2\partial x}-u^2\frac{\partial^3\bar{Q}}{\partial x^3}+\cdots=0,$$

Отбросим производные порядка выше третьего. Оставшееся уравнение – это дифференциальное приближение схемы с направленными разностями.

$$\frac{\partial \bar{Q}}{\partial t}+u\frac{\partial \bar{Q}}{\partial x}-D\frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2}\quad \underbrace{-uh\eta_2(\mathcal{C})\frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2}+uh^2\eta_3(\mathcal{C},\mathcal{S})\frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial x^3}}_{\text{старшие члены в погрешности аппроксимации}}\quad =0.$$

$\mathcal{C}=\dfrac{u\tau}{h}$ – число Куранта; $\mathcal{S}=\dfrac{D\tau}{h^2}$ – диффузионное число Куранта.

$$\begin{aligned} \eta_2 &=\eta_2^{WFOU} = \frac{1}{2}+\mathcal{C}(\sigma-0.5) \\ \eta_3 &=\eta_3^{WFOU} = \frac{1}{6}+\frac{\mathcal{C}^2}{12}+(\sigma-0.5)(\mathcal{C}+\mathcal{C}^2(\sigma-0.5)+2\mathcal{S}) \end{aligned} \qquad (17)$$

Скорость убывания амплитуды – схемная диффузия:
$p(m) = Dm^2(1+P_h\eta_2)$ зависит от P_h.
Скорость бегущей волны – схемная дисперсия:
$q(m) = u(1-h^2m^2\eta_3)$ зависит от волнового числа.

Дифференциальное приближение и устойчивость разностных схем

Амплитуда бегущей волны убывает, если

$$p(m) = Dm^2(1 + P_h\eta_2) > 0 \quad \text{где} \quad \eta_2 = \frac{1}{2} + \mathcal{C}(\sigma - 0.5)) \qquad (18)$$

Для явной схемы это означает, что для устойчивости необходимо выполнение неравенства

$$2\mathcal{S} + \mathcal{C} - \mathcal{C}^2 > 0. \qquad (19)$$

((19) получается после умножения (18) на $\dfrac{\tau}{h^2}$.)
Дальше мы сравним условие (19) с тем, что получится с помощью метода Неймана.

Дифференциальное приближение для схемы с центральными разностями

$$Q_t + uQ^{(\sigma)}_{\overset{\circ}{x}} - DQ^{(\sigma)}_{\bar{x}x} = 0.$$

Дифференциальное приближение с точностью до $O(h^4)$:

$$\frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + u\frac{\partial \bar{Q}}{\partial x} - D\frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2}$$

$$\underbrace{-uh\eta_2^{WCD}(\mathcal{C})\frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2}}_{\text{диффузия}} + \underbrace{uh^2\eta_3^{WCD}(\mathcal{C},\mathcal{S})\frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial x^3}}_{\text{дисперсия}} + \underbrace{uh^3\eta_4^{WCD}(\mathcal{C},\mathcal{S})\frac{\partial^4 \bar{Q}}{\partial x^4}}_{\text{антидиффузия}} = 0.$$

$$\eta_2^{WCD} = \mathcal{C}(\sigma - 0.5), \quad \eta_3^{WCD} = \frac{1}{6} + \frac{\mathcal{C}^2}{12} + (\sigma - 0.5)(\mathcal{C}^2(\sigma - 0.5) + 2\mathcal{S})$$

$$\eta_4^{CN} = -\left(\frac{1}{4}\mathcal{C}\mathcal{S} + \frac{1}{12}\frac{\mathcal{S}}{\mathcal{C}}\right) \quad \text{для} \quad \sigma = 0.5.$$

Для бегущей волны

$$p(m) = Dm^2(1 + P_h\eta_2^{WCD} + P_h h^2 m^2 \eta_4^{WCD}).$$

Четвертая производная оказывает дополнительное сглаживающее влияние на решение, если $\eta_4^{WCD} > 0$. В схеме Кранка-Николсона $\eta_4^{CN} < 0$.

Влияние схемной дисперсии и диффузии (антидиффузии) на качество решения видно на рисунке

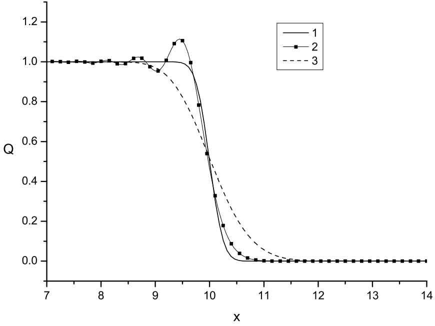


Рис.: Результаты расчетов по схеме с центральными разностями 1 – точное решение, $2 - \sigma = 0.5$, $3 - \sigma = 1$.

Схема с искусственной дисперсией

$$Q_t + uQ^{(0.5)}_{\overset{\circ}{x}} - DQ^{(0.5)}_{x\bar{x}} - h^2 u\eta_3^{ATD}[\kappa Q^{(0.5)}_{x\bar{x}x} + (1-\kappa)Q^{(0.5)}_{\bar{x}x\bar{x}}] = 0$$

$$C_{x\bar{x}x} = \frac{C_{i+2} - 3C_{i+1} + 3C_i - C_{i-1}}{h^3}$$

$$C_{\bar{x}x\bar{x}} = \frac{C_{i+1} - 3C_i + 3C_{i-1} - C_{i-2}}{h^3}$$

Аппроксимация третьей производной:

$\kappa = 0.5$ – симметричная,

$\kappa = 0$ – третья разность назад;

$\kappa = 1$ – третья разность вперед.

Пусть $\eta_3^{ATD} = \dfrac{1}{6} + \dfrac{\mathcal{C}^2}{12}$, тогда $\eta_3^{NEW} = 0$, $\eta_4^{NEW} = \eta_4^{CN} + \dfrac{\eta_3^{CN}}{2}(1-2\kappa)$.

Задача Показать, что при $u > 0$ и $\kappa = 0$

$$\eta_4^{NEW} = \left[\frac{1}{3}\left(1 - \frac{\mathcal{S}}{\mathcal{C}}\right) + \mathcal{C}^2\left(\frac{1}{6} - \frac{\mathcal{S}}{\mathcal{C}}\right)\right]\frac{1}{4}. \quad \left(P_h = \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{S}}\right)$$

Схема с искусственной дисперсией. Примеры расчетов

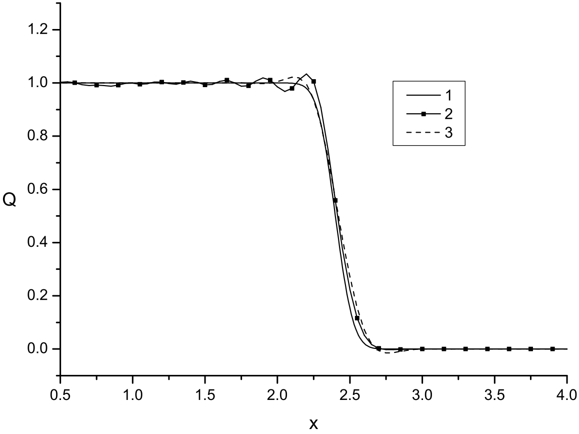


Рис.: Результаты расчетов по схеме с искусственной дисперсией 1 – точное решение, $2 - \kappa = 0.5$, $3 - \kappa = 0$. $t = 0.24$

Схема с искусственной дисперсией. Примеры расчетов

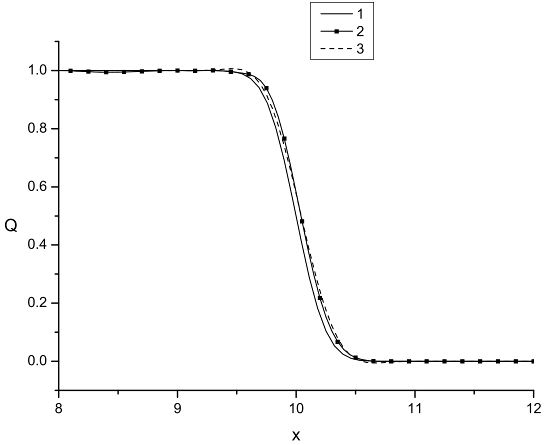


Рис.: Результаты расчетов по схеме с искусственной дисперсией 1 – точное решение, 2 – $\kappa = 0.5$, 3 – $\kappa = 0$. $t = 1$.