

# Разностные схемы для уравнения конвективной диффузии

О.С.Мажорова

## 1 Введение

Уравнение конвективной диффузии является одним из наиболее распространенных объектов исследований в вычислительной гидродинамике. Оно описывает перенос скалярной величины, температуры или концентрации, в движущейся среде, и используется в качестве модельного в задачах обтекания, при построении и тестировании алгоритмов численного решения уравнений пограничного слоя, уравнений Навье-Стокса и т.д.

В одномерном приближении уравнение конвективной диффузии имеет вид

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial(uQ)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2}, \quad t > 0, \quad x \in [-L, L] \quad (1.1)$$

Здесь  $t$  – время,  $x$  – пространственная переменная,  $L$  – характерный размер области,  $u$  – заданная скорость движения среды,  $Q$  – искомая скалярная функция, например температура или концентрация,  $D$  – коэффициент теплопроводности или диффузии.

Одновременное присутствие в уравнении конвективных и диффузионных членов предъявляет специальные требования к вычислительной процедуре. Хорошо известно, что замена конвективных членов направленными разностями первого порядка вносит в ошибку аппроксимации слагаемые, которые по величине могут превосходить члены, описывающие реальный процесс диффузии; симметричная запись конвективных членов с помощью центральных разностей приводит в областях резкого изменения решений к возникновению "нефизических колебаний". Необходимую точность центральные и направленные разности гарантируют в случае, когда локальное значение сеточного числа Пекле  $Pe_h = \frac{|u|h}{D} < 2$ , где  $h$  – шаг сетки по пространству.

Указанное ограничение на величину шага сетки не связано со свойствами изучаемого физического процесса, оно обусловлено внутренними свойствами разностных схем и в многомерных задачах является весьма обременительным. Особенно остро проблема построения разностных алгоритмов, обеспечивающих необходимую точность расчетов в рамках физически оправданных ограничений на параметры сетки, встает при численном решении задач с преобладающим влиянием конвекции, т.е. в случае, когда  $\frac{|u|L}{D} \gg 1$ . Этот важный с практической точки зрения класс задач постоянно находится в центре внимания исследователей. Построению методов решения уравнения конвективной диффузии с преобладающим влиянием конвекции посвящено огромное число работ. Невозможно дать более или менее полный обзор используемых алгоритмов. Приведем лишь некоторые из них, иллюстрирующие основные направления исследований.

## 2 Стационарная модельная задача

Рассмотрим одномерное стационарное уравнение конвективной диффузии

$$\frac{d(uQ)}{dx} - D \frac{d^2 Q}{dx^2} = 0, \quad x \in [0, 1]. \quad (2.1)$$

Введем на отрезке  $[0, 1]$  разностную сетку с узлами  $\Omega_h = \{x_i, i = 0, 1, \dots, N, x_0 = 0, x_N = 1\}$ . Обозначим  $h_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+1} - x_i$ ,  $\bar{h}_i = \frac{h_{i+\frac{1}{2}} + h_{i-\frac{1}{2}}}{2}$ ,  $x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{x_{i+1} + x_i}{2}$ . Искомую сеточную функцию будем относить к узлам разностной сетки  $Q_i = Q(x_i)$ , заданную скорость  $u$  – к центрам ячеек, которые будем называть потоковыми точками  $u_{i+\frac{1}{2}} = u(x_{i+\frac{1}{2}})$ .

Для построения разностной схемы воспользуемся интегро-интерполяционным методом [1]. Проинтегрируем уравнение (2.1) по отрезку  $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$ .

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d}{dx} \left[ uQ - D \frac{dQ}{dx} \right] dx = W_{i+\frac{1}{2}}^{tot} - W_{i-\frac{1}{2}}^{tot} = 0; \quad (2.2)$$

$W_{i+\frac{1}{2}}^{tot} = u_{i+\frac{1}{2}} Q_{i+\frac{1}{2}} + W_{i+\frac{1}{2}}^D$  – сумма конвективного  $W = uQ$  и диффузионного  $W^D = -D \frac{dQ}{dx}$  потоков. В точке  $x_{i+\frac{1}{2}}$   $W^D$  естественным образом записывается в виде  $W_{i+\frac{1}{2}}^D = D \frac{Q_{i+1} - Q_i}{h_{i+\frac{1}{2}}} = DQ_x$ . Поделив (2.2) на  $\bar{h}_i$ , получим следующую разностную схему

$$(u_{i+\frac{1}{2}} Q_{i+\frac{1}{2}})_{\hat{x}} - DQ_{x\hat{x}} = 0 \quad (2.3)$$

Для вычисления конвективного потока необходимо доопределить функцию  $Q$  в полудельных точках. Способ интерполяции искомой функции из узлов разностной сетки, где она задана, в центры ячеек определяет аппроксимацию конвективного потока. Пусть, для начала, интерполяция осуществляется по двум соседним узлам:

$$Q_{i+\frac{1}{2}} = \theta_{i+\frac{1}{2}} Q_i + (1 - \theta_{i+\frac{1}{2}}) Q_{i+1} \quad (2.4)$$

Если  $\theta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}$ , то конвективный поток вычисляется по формуле  $W_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}} Q_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}} \frac{Q_{i+1} + Q_i}{2}$ . Подставляя это выражение в (2.3), получим симметричную схему

$$\left( u_{i+\frac{1}{2}} \frac{Q_{i+1} + Q_i}{2} \right)_{\hat{x}} - DQ_{x\hat{x}} = 0 \quad (2.5)$$

На равномерной сетке при постоянной скорости это обычная схема с центральными разностями:

$$uQ_{\circ_x} - DC_{x\bar{x}} = 0$$

Если  $\theta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{|u_{i+\frac{1}{2}}|}{u_{i+\frac{1}{2}}} \right)$ , то получится схема с направленными разностями первого порядка:

$$(u_{i+\frac{1}{2}}^+ Q_i + u_{i+\frac{1}{2}}^- Q_{i+1})_{\hat{x}} - DC_{x\hat{x}} = 0, \quad (2.6)$$

где  $u_{i+\frac{1}{2}}^+ = \frac{1}{2}(u_{i+\frac{1}{2}} + |u|_{i+\frac{1}{2}})$ ,  $u_{i+\frac{1}{2}}^- = \frac{1}{2}(u_{i+\frac{1}{2}} - |u|_{i+\frac{1}{2}})$ .

Свойства разностных схем (2.5), (2.6) иллюстрируют результаты численного решения уравнения (2.1) с граничными условиями  $Q(0) = 0$ ,  $Q(1) = 1$ ,  $u = \text{const} > 0$ . Дифференциальная задача имеет решение

$$Q(x) = A(1 - e^{ux/D}); \quad A = 1/(1 - e^{u/D}) \quad (2.7)$$

На равномерной сетке  $\{x_i = ih, i = 0, \dots, N, h = 1/N\}$  разностные задачи на основе схем (2.5) и (2.6) имеют соответственно вид

$$-(1 + \frac{1}{2}P_h)Q_{i-1} + 2Q_i - (1 - \frac{1}{2}P_h)Q_{i+1} = 0, i \neq 0, N; \quad Q_0 = 0, Q_N = 1. \quad (2.8)$$

$$-(1 + P_h)Q_{i-1} + (2 + P_h)Q_i - Q_{i+1} = 0, i \neq 0, N; \quad Q_0 = 0, Q_N = 1 \quad (2.9)$$

Здесь  $P_h = uh/D$  – сеточное число Пекле.

Решение задачи (2.8) для случая  $u/D = 50$  приведено на рис. 1.

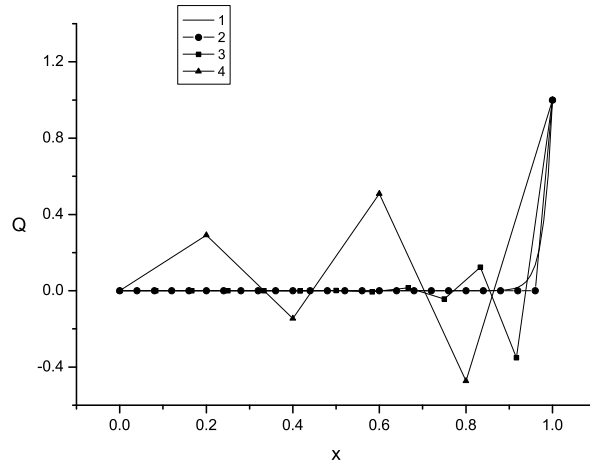


Рис. 1: Результаты расчетов по схеме с центральными разностями 1 – точное решение, 2 –  $P_h = 2$ , 3 –  $P_h = 4$ , 4 –  $P_h = 10$

В расчетах использовалась сетка с  $h = 0.04, .08, 0.2$ , что соответствует значениям сеточного числа Пекле  $P_h = 2, 4, 10$ . Если  $P_h < 2$ , то разностная схема с центральными разностями дает решение, хорошо согласующееся с точным. На более грубой

сетке возникают колебания. Изменение поведения решения при переходе сеточного числа Пекле в область  $P_h > 2$  становится очевидным, если выписать точное решение задачи (2.8):

$$Q_i = A_h (1 - q^i), \quad q = (1 + \frac{1}{2}P_h)/(1 - \frac{1}{2}P_h), \quad A_h = 1/(1 - q^N). \quad (2.10)$$

При  $P_h > 2$  задача (2.8) не удовлетворяет принципу максимума [1], [2].

Приведенный пример показывает, что использование схем с центральными разностями на сетках с  $P_h > 2$  может приводить к возникновению "нефизических" осцилляций. Они имеют чисто разностную природу и существенно искажают свойства решений. Следует, однако, подчеркнуть, что приведенный пример демонстрирует возможность возникновения колебательных решений в области  $P_h > 2$ , а появятся ли колебания в реальных расчетах и при каких значениях сеточного числа Пекле зависит от конкретных условий: геометрии потока, граничных условий и т.д. [3].

Если для аппроксимации конвективных членов используются направленные разности (рис. 2), то осцилляций не возникает.

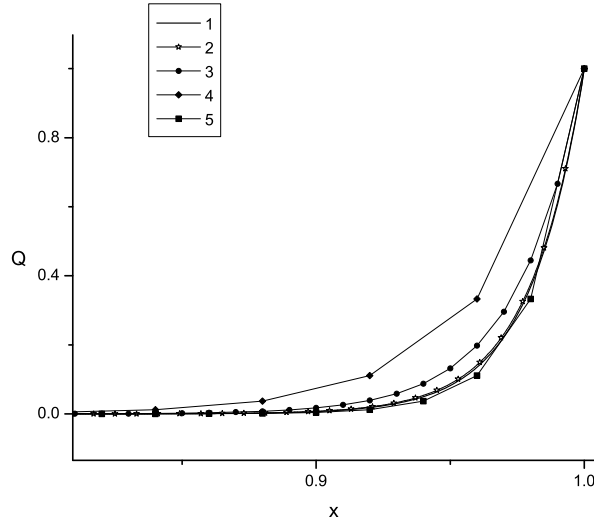


Рис. 2: Результаты расчетов по схеме с направленными и центральными разностями 1 – точное решение, 2 – направленные разности  $P_h = 0.05$ , 3 – направленные разности  $P_h = 0.5$ , 4 – направленные разности  $P_h = 2$ , 5 – центральные разности  $P_h = 1$ .

Решение имеет вид (2.10) с  $q = (1 + P_h)$ , принцип максимума выполнен на любых сетках. Однако точность результатов невелика (линия 2, рис. 2). Схема с направленными разностями (2.9) имеет первый порядок аппроксимации, с точностью до  $O(h^2)$  она аппроксимирует уравнение

$$u \frac{dQ}{dx} - D(1 + \frac{1}{2}P_h) \frac{d^2Q}{dx^2} = 0, \quad (2.11)$$

которое описывает процесс конвективной диффузии в среде с коэффициентом диффузии  $D^* = D(1 + \frac{1}{2}P_h)$ . Для получения приемлемой точности необходимо, чтобы  $P_h \ll 2$ . Это ограничение еще более жесткое, чем условие отсутствия осцилляций в схеме с центральными разностями. Как видно из рисунка 2 (линии 3 и 5), для достижения одинаковой точности схема (2.9) требует использования примерно в 10 раз более мелкого шага, чем схема (2.8).

Приведем примеры разностных схем, которые обладают более высокой точностью, чем схемы с направленными разностями первого порядка и вместе с тем не дают пилообразных решений, как схемы с центральными разностями.

## 2.1 Монотонные схемы второго порядка точности

Схема А.А.Самарского На равномерной сетке в случае  $u = \text{const}$  схема выглядит следующим образом:

$$u^+Q_{\bar{x}} + u^-Q_x - \frac{D}{1 + |P_h|/2} Q_{x\bar{x}} = 0, \quad (2.12)$$

Интерполяция в потоковую точку здесь проводится с помощью функции

$$\theta = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{|P_h|}{P_h} \right) - \frac{|P_h|/2}{1 + |P_h|/2P_h}$$

В этой схеме конвективный член аппроксимируется с помощью направленных разностей первого порядка, а коэффициент диффузии  $D$  заменяется на  $\tilde{D} = \frac{D}{1 + |P_h|/2}$ .  $\tilde{D} = D \left( 1 - \frac{|P_h|/2}{1 + |P_h|/2} \right)$ . Таким образом схема (2.12) содержит антидиффузию с коэффициентом, зависящим от сеточного числа Пекле [1].

Учитывая, что  $u^+Q_{\bar{x}} + u^-Q_x = uQ_x^\circ - \frac{|u|h}{2}Q_{x\bar{x}}$ , перепишем (2.12) в виде

$$uQ_x^\circ - DC_{x\bar{x}} - D \left( \frac{|P_h|^2/4}{1 + |P_h|/2} \right) Q_{x\bar{x}} = 0. \quad (2.13)$$

Последнее равенство позволяет интерпретировать схему (2.12) как схему с центральными разностями, в которую введен регуляризатор – дополнительный диффузионный член порядка  $O(h^2)$ , обеспечивающий монотонность. Схема имеет второй порядок точности.

Экспоненциальная схема. В этой схеме для вычисления потоков в полуцелых точках используется точное решение дифференциальной задачи (2.1).

Из (2.7) сразу следует, что на отрезке  $[x_i, x_{i+1}]$ , где  $u = u_{i+\frac{1}{2}} = \text{const}$ ,

$$Q(x) = Q_i + (Q_{i+1} - Q_i) \frac{\exp \left( P_{h,i+\frac{1}{2}} \frac{x - x_i}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right) - 1}{\exp(P_{h,i+\frac{1}{2}}) - 1} \quad (2.14)$$

Учитывая (2.14), поток в центре разностной ячейки вычисляется по формуле:

$$W_{i+\frac{1}{2}}^{tot} = u_{i+\frac{1}{2}} Q(x_{i+\frac{1}{2}}) - D \frac{dQ}{dx} \Big|_{x=x_{i+\frac{1}{2}}} = u_{i+\frac{1}{2}} Q_i + u_{i+\frac{1}{2}} (Q_{i+1} - Q_i) \frac{\exp(P_{h,i+\frac{1}{2}}/2) - 1}{\exp(P_{h,i+\frac{1}{2}}) - 1} - u_{i+\frac{1}{2}} (Q_{i+1} - Q_i) \frac{\exp(P_{h,i+\frac{1}{2}}/2)}{\exp(P_{h,i+\frac{1}{2}}) - 1} \quad (2.15)$$

Аналогично вычисляется  $W_{i-\frac{1}{2}}^{tot}$ . Подставляя  $W_{i+\frac{1}{2}}^{tot}$  и  $W_{i-\frac{1}{2}}^{tot}$  в (2.2), получим экспоненциальную разностную схему. Для наглядности выпишем её на равномерной сетке в случае  $u = const$ .

$$\frac{W_{i+\frac{1}{2}}^{tot} - W_{i-\frac{1}{2}}^{tot}}{h} = u Q_{\bar{x}} + uh \frac{e^{P_h/2} - 1}{e^{P_h} - 1} Q_{\bar{x}x} - uh \frac{e^{P_h/2}}{e^{P_h} - 1} Q_{\bar{x}x} = 0 \quad \text{или}$$

$$u Q_{\bar{x}} - D^* Q_{\bar{x}x} = 0, \quad \text{где } D^* = D \left( \frac{P_h e^{P_h} + 1}{2 e^{P_h} - 1} \right) = D \frac{P_h}{2} \coth \left( \frac{P_h}{2} \right) \quad (2.16)$$

Схема (2.16) монотонна и имеет второй порядок точности.

В экспоненциальной схеме, как и в схеме А.А.Самарского, монотонность обеспечивается присутствием дополнительной диффузии порядка  $O(h^2)$ .

Введем эффективное сеточное число Пекле  $P_h^* = \frac{uh}{D^*}$ , которое характеризует соотношение между интенсивностью конвективного и диффузионного переноса, реализующееся внутри разностной ячейки при использовании той или иной разностной схемы. На рис.4 изображена зависимость  $P^*$  от  $P_h$  для схем (2.12) и (2.16).

При малых значениях  $P_h$   $P_h^* \sim P_h$ , т.е. на масштабах длины порядка шага сетки значения числа Пекле разностной и дифференциальной задачи – близки. С ростом  $P_h$   $P_h^* \rightarrow 2$ . Это значит, что диффузионный перенос в дискретной среде осуществляется с коэффициентом  $D^* = uh/2$  и разностные схемы (2.12) и (2.16) превращаются в схемы с аппроксимацией конвективных членов направленными разностями.

## 2.2 Гибридные разностные схемы

Введение эффективного сеточного числа Пекле лежит в основе создания класса гибридных схем, в которых центральные разности применяются в областях, где сеточное число Пекле не превосходит некоторого значения  $\bar{P}_h$ , там же, где  $P_h > \bar{P}_h$ , реальная диффузия не учитывается и конвективные члены аппроксимируются с помощью направленных разностей. Простейшая схема из данного семейства предложена в [4].

Схема Д.Сполдинга (Hybrid Difference Scheme - HDS) [4] Эффективное сеточное число Пекле в этой схеме вводится следующим образом:

$$P_{h,i+\frac{1}{2}}^* = \begin{cases} P_{h,i+\frac{1}{2}}, & \text{если } P_{h,i+\frac{1}{2}} \leq 2; \\ 2, & \text{если } P_{h,i+\frac{1}{2}} > 2. \end{cases} \quad (2.17)$$

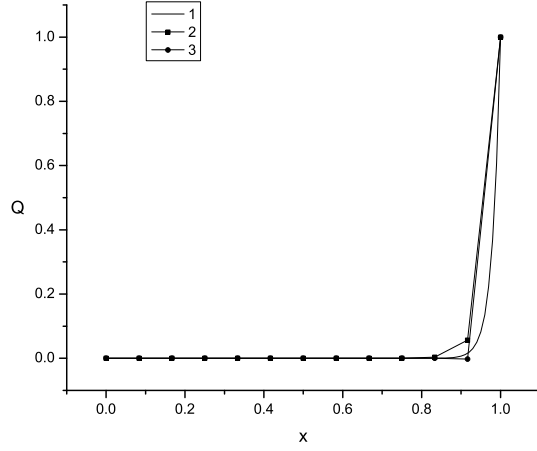


Рис. 3: Результаты расчетов по схемам (2.12) и (2.16) для  $P_h = 4$ ; 1 – точное решение, 2 – схема (2.12), 3 – схема (2.16)

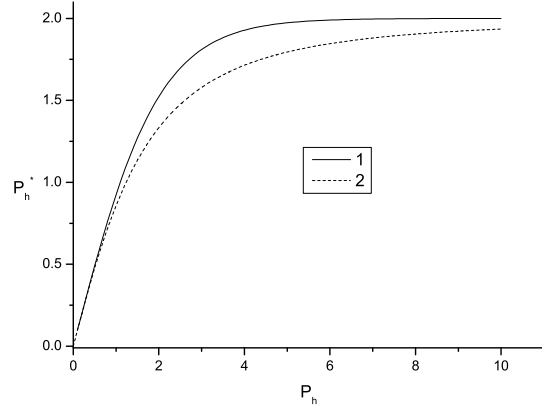


Рис. 4: Зависимость эффективного сеточного числа Пекле от  $P_h$ ; 1 – схема (2.16), 2 – схема (2.12).

Для интерполяции в полуцелую точку используется функция

$$\theta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{P_{h,i+\frac{1}{2}}} \left[ P_{h,i+\frac{1}{2}} - 1 + \max(-P_{h,i+\frac{1}{2}}, 1 - \frac{P_{h,i+\frac{1}{2}}}{2}, 0) \right] \quad (2.18)$$

Нетрудно проверить, что в области, где  $|P_{h,i+\frac{1}{2}}| < 2$ ,  $\theta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}$ ,  $W_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}} \frac{Q_i + Q_{i+1}}{2}$ , т.е. конвективные члены аппроксимируются центральными разностями. В точках, где  $P_{h,i+\frac{1}{2}} \geq 2$ ,  $\theta_{i+\frac{1}{2}} = 1 - \frac{1}{P_{h,i+\frac{1}{2}}}$ , если  $P_{h,i+\frac{1}{2}} \leq -2$ , то  $\theta_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{P_{h,i+\frac{1}{2}}}$ . Объединяя последние два случая, запишем интерполирующую функцию в области  $|P_{h,i+\frac{1}{2}}| \geq 2$  в виде

$$\theta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{|P_{h,i+\frac{1}{2}}|}{P_{h,i+\frac{1}{2}}} \right) - \frac{1}{P_{h,i+\frac{1}{2}}} \quad (2.19)$$

Тогда  $Q_{i+\frac{1}{2}} = \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{|P_{h,i+\frac{1}{2}}|}{P_{h,i+\frac{1}{2}}} \right) - \frac{1}{P_{h,i+\frac{1}{2}}} \right] Q_i + \left[ \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{|P_{h,i+\frac{1}{2}}|}{P_{h,i+\frac{1}{2}}} \right) + \frac{1}{P_{h,i+\frac{1}{2}}} \right] Q_{i+1}$  и

$$W_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}} Q_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}}^+ Q_i + u_{i+\frac{1}{2}}^- Q_{i+1} + DQ_x \quad (2.20)$$

После подстановки (2.20) в (2.3) диффузионные члены в разностной схеме пропадают и остаются только аппроксимированные направленными разностями конвективные члены. Таким образом, в областях, где  $|P_{h,i+\frac{1}{2}}| > 2$ , диффузионный перенос

осуществляется только за счет схемной диффузии с коэффициентом  $D_h = \frac{|u|h}{2}$ , обусловленным использованием направленных разностей и никак не связан с реальным диффузионным процессом.

Приведем еще один пример гибридной схемы.

Степенная схема С.Патанкара (Power-Law Scheme – PLS) [5]. Интерполяция в полущелую точку в этой схеме осуществляется с помощью функции

$$\theta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{P_{h,i+\frac{1}{2}}} \left[ P_{h,i+\frac{1}{2}} - 1 + \max(0, -P_{h,i+\frac{1}{2}}) + \max(0, (1 - 0.1|P_{h,i+\frac{1}{2}}|)^5) \right] \quad (2.21)$$

Переход от симметричной аппроксимации конвективного члена к схеме с направленными разностями и без вторых пространственных производных происходит при  $|P_{h,i+\frac{1}{2}}| \geq 10$ .

Рассмотрим несколько подробнее, что собой представляет схема PLS в области  $|P_{h,i+\frac{1}{2}}| < 10$ . Пусть, для наглядности,  $u = \text{const} > 0$  и сетка – равномерная. Тогда  $\theta_{i+\frac{1}{2}} = \theta = \text{const}$ ,  $|P_{h,i+\frac{1}{2}}| = P_h = \text{const}$  и  $\theta = \frac{1}{P_h} [P_h - 1 + (1 - 0.1P_h)^5]$ . Сеточное уравнение, аппроксимирующее (2.1), имеет вид

$$uQ_x - D^*C_{x\bar{x}} = 0, \quad \text{где } D^* = D \left[ \frac{P_h}{2} + (1 - 0.1P_h)^5 \right]. \quad (2.22)$$

Таким образом разностная схема С.Патанкара представляет собой схему с центральными разностями и эффективным сеточным числом Пекле

$$P_h^* = \frac{uh}{D^*} = \frac{2P_h}{P_h + 2(1 - 0.1P_h)^5}, \quad (2.23)$$

Выбор  $P_h^*$  в виде (2.23) продиктован стремлением избавиться от многократного вычисления экспонент, необходимого при использовании аппроксимации (2.16). Вместо  $P_h^* = 2 \tanh\left(\frac{P_h}{2}\right)$ , здесь используется соотношение (2.23), которое с хорошей точностью приближает эффективное число Пекле экспоненциальной схемы.

Идея замены эффективного числа Пекле экспоненциальной схемы на какое-либо его приближение лежит в основе построения многих разностных схем. Например, в [6]  $P_h^*$  вычисляется по формуле

$$P_h^* = \left[ \frac{P_h^2}{2(5 + P_h^2)} + \frac{1 + 0.005P_h^2}{P_h(1 + 0.05P_h^2)} \right]^{-1},$$

а в [7] при малых  $P_h$  предлагается использовать соотношение  $P_h^* = \frac{P_h}{1 + P_h^2/12}$

В многомерном случае процедура построения разностных схем типа (2.16), (2.22) осуществляется по каждому направлению независимо.



Гибридные схемы просты в реализации, дают гладкие, без осцилляций, решения при любых значениях сеточного числа Пекле, итерационные процессы, используемые для решения соответствующих систем линейных уравнений, хорошо сходятся. Все это делает привлекательным их использование при моделировании конвективной диффузии, они включены в пакеты прикладных программ. Однако приемлемую точность гибридные схемы обеспечивают в случае, когда перенос в системе осуществляется преимущественно механизмом диффузии, а конвективные процессы – несущественны. В многомерных задачах с преобладающим влиянием конвекции необходимая точность достигается лишь на очень подробных сетках, использование которых в двумерных и, тем более, в трехмерных расчетах, как правило, невозможно. Теоретический анализ и тестовые расчеты показывают, что на реальных сетках в областях резкого изменения решения происходит его заметное сглаживание, обусловленное действием схемной диффузии, которая зависит от величины скорости и ее направления. [8], [9] [10].

В рассмотренных выше методах монотонизация осуществляется за счет введения в схему дополнительной диффузии на основе второй пространственной производной. Интерполяция искомой функции в центр разностной ячейки проводится по двум, соседним с потоковым, узлам сетки, т.е. схема записывается на трехточечном шаблоне.

Более точные алгоритмы строятся на расширенных шаблонах с монотонизаторами в виде старших производных.

## 2.3 Разностные схемы на расширенных шаблонах.

В этом разделе для наглядности разностные алгоритмы строятся на равномерной сетке, предполагается так же, что скорость  $u = \text{const} > 0$ .

Схема с направленными разностями второго порядка. (Second Order Upwind – SOU)  
Запишем интерполяцию искомой функции в полуцелую точку в виде

$$Q_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(Q_{i+1} + Q_i) - \eta(Q_{i+1} - 2Q_i + Q_{i-1}) \quad (2.24)$$

При  $\eta = \frac{1}{2}$  равенство (2.24) определяет аппроксимацию конвективных членов со вторым порядком точности:

$$u \frac{dQ}{dx} \sim uQ_{\bar{x}} + \frac{uh}{2}Q_{\bar{x}\bar{x}} = uQ_{\bar{x}}^{\circ} - \frac{uh}{2}(Q_{\bar{x}x} - Q_{\bar{x}\bar{x}}) \quad (2.25)$$

и разностная схема запишется следующим образом:

$$uQ_{\bar{x}}^{\circ} - DQ_{\bar{x}x} - uh^2\eta Q_{\bar{x}x\bar{x}} = 0, \quad \text{где } \eta = \frac{1}{2}, \quad (2.26)$$

или, в индексных обозначениях:

$$\eta P_h Q_{i-2} - (1 + \frac{P_h}{2} + 3\eta P_h)Q_{i-1} + (2 + 3\eta P_h)Q_i - (1 - \frac{P_h}{2} + \eta P_h)Q_{i+1} = 0 \quad (2.27)$$

Разностная схема (2.26) не является монотонной, однако она обладает важным свойством, смысл которого подробно обсуждается, например, в [11, т.2, гл.7], (см. также [12]): в сеточном уравнении коэффициенты при значениях искомой функции с соседних узлах имеют противоположные знаки. В частности это свойство гарантирует отсутствие у разностной задачи "пилообразных" решений вида  $(-1)^i |q_i|$  при любых значениях сеточного числа Пекле.

Семейство схем с третьей пространственной производной. Разностные схемы типа (2.26) широко используются в вычислительной практике. Они строятся, исходя из различных соображений, но, применительно к рассматриваемой модельной задаче, отличаются от (2.26) лишь значением коэффициента при направленной третьей разности. Некоторые из таких схем перечислены в таблице 1.

Таблица 1. Схемы с направленными третьими разностями

Метод	$\eta$
Направленные разности второго порядка (SOU)	$\frac{1}{2}$
Метод Фромма [13]	$\frac{1}{4}$
Схема с искусственной дисперсией [14]	$\frac{1}{6}$
Схема QUICK [15]	$\frac{1}{8}$

Аппроксимация дифференциальной задачи (2.1) с помощью схемы с искусственной дисперсией или схемы QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics*) непосредственно содержит направленные третьи разности в виде дополнительного слагаемого.

Метод Фромма основан на результатах анализа влияния разностного алгоритма на фазу бегущей волны. Идея метода состоит в использовании комбинации двух схем, одна из которых имеет опережающую фазовую ошибку, а вторая – запаздывающую. В результате получается, так называемая, схема с нулевой средней фазовой ошибкой [16, стр.158]. Аппроксимация пространственных производных в методе Фромма эквивалентна схеме с центральными разностями, к которой добавлена направленная разностная производная третьего порядка с коэффициентом  $\eta = \frac{1}{4}$ .

Примеры использования перечисленных выше схем для расчета задачи (2.1) приведены на рис. 5. В случае  $P_h = 4$  все четыре алгоритма дают неосциллирующие решения.

Наличие в разностном уравнении третьей производной позволяет компенсировать дисперсионное влияние главного члена в ошибке аппроксимации схемы с цен-

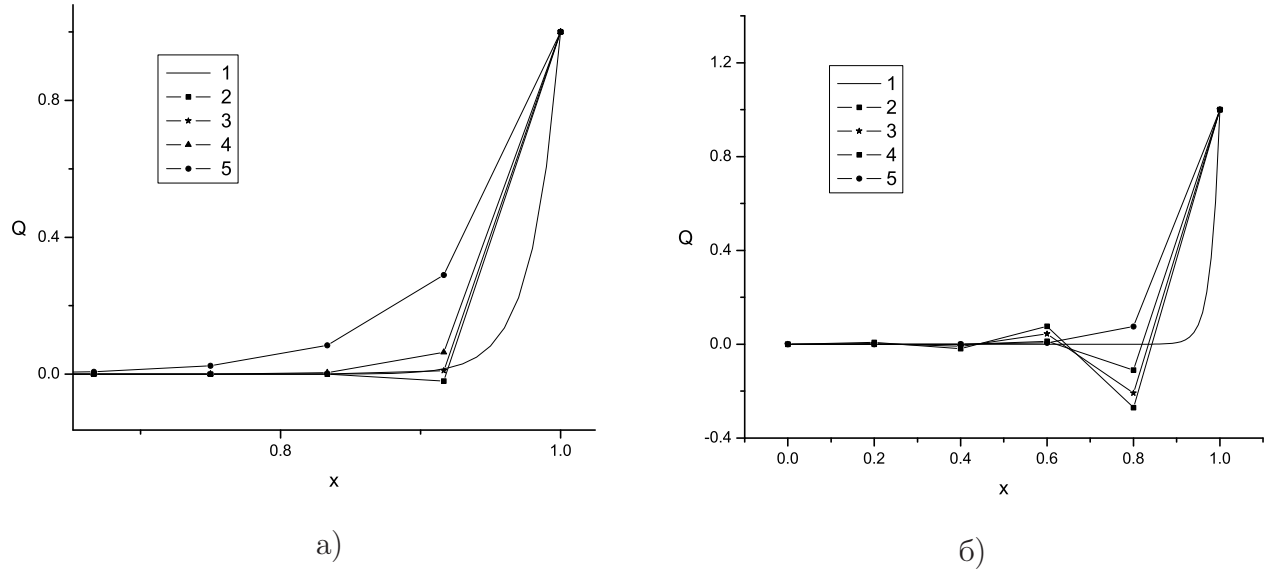


Рис. 5: Результаты расчетов по схемам с третьими пространственными производными, а) –  $P_h = 4$ , б) –  $P_h = 10$ , 1 – точное решение, 2 –  $\eta = \frac{1}{8}$ ; 3 –  $\eta = \frac{1}{6}$ ; 4 –  $\eta = \frac{1}{4}$ ; 5 –  $\eta = \frac{1}{2}$ .

тральными разностями. Вместе с тем, величина коэффициента  $\eta$  влияет на ширину пограничного слоя сеточного решения. Аналогично тому, как направленная производная первого порядка определяет диссипативные свойства схемы, связанные со второй производной в ошибке аппроксимации (см.(2.11)), так направленная третья производная влияет на диссипацию, связанную с производной четвертого порядка. Подробнее этот вопрос будет рассмотрен при анализе алгоритмов решения нестационарных задач.

Раскладывая искомую функцию в ряд Тейлора в точке  $x = x_i$ , получим, что схема (2.27) аппроксимирует с точностью до  $O(h^4)$  уравнение

$$u \frac{dQ}{dx} - D \frac{d^2Q}{dx^2} + \frac{uh^2}{6}(1 - 6\eta) \frac{d^3Q}{dx^3} + \frac{uh^3}{12}(6\eta - \frac{1}{P_h}) \frac{d^4Q}{dx^4} = 0 \quad (2.28)$$

Из (2.28) сразу следует, что схема с искусственной дисперсией ( $\eta = \frac{1}{6}$ ) имеет третий порядок аппроксимации, с ростом  $\eta$  увеличивается влияние четвертой производной.

При  $P_h = 10$  (рис.5, б)) все схемы, кроме SOU ( $\eta = \frac{1}{2}$ ), дают пилообразные решения.

Сравнение рис. 5 и рис. 1 показывает, что включение направленной третьей производной в разностную аппроксимацию позволяет существенно уменьшить амплитуду колебаний, однако полностью их подавить, сохраняя при этом ширину пограничного слоя, не удастся. Для того чтобы избежать возникновения нефизических колебаний,

используется процедура монотонизации, основанная на ограничении значений искомой функции в потоковой точке. Приведем описание одного из таких алгоритмов.

Метод ULTRA-QUICK [15], [17]. В этом методе коррекция значений искомой функции в потоковой точке осуществляется с помощью специальной процедуры: *Universal Limiter for Tight Resolution and Accuracy* (ULTRA), которая проводится на основе анализа нормализованной переменной (*normalized variable*):

$$Q_k = \frac{Q_k - Q_U}{Q_D - Q_U} \quad k = U, C, fc, D. \quad (2.29)$$

Здесь  $Q_U$  и  $Q_D$  – значения функции в соседних с точкой  $x_i = x_C$  узлах сетки  $x_U$  и  $x_D$ , расположенных соответственно вверх и вниз по потоку;  $Q_C = Q_i$ ,  $Q_{fc}$  – значение искомой функции в полущелой точке, лежащей между  $x_C$  и  $x_D$ . При  $u > 0$   $Q_U = Q_{i-1}$ ,  $Q_C = Q_i$ ,  $Q_{fc} = Q_{i+\frac{1}{2}}$ ,  $Q_D = Q_{i+1}$  (рис.6).

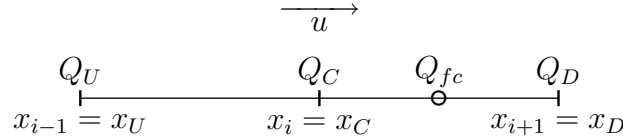


Рис.6: Обозначение узлов сетки и сеточных функций.

Монотонность функции  $Q(x)$  на отрезке  $[x_{i-1}, x_{i+1}]$  означает, что  $0 \leq Q_C \leq 1$ . В области локальной немонотонности  $Q_C < 0$  или  $Q_C > 1$ . В терминах нормализованных переменных интерполяция в потоковую точку определяется заданием функции  $Q_{fc} = f(Q_C)$ . Выпишем  $f(Q_C)$  для схем с аппроксимацией конвективных членов направленными разностями первого порядка (FOU), центральными разностями (CD), направленными разностями второго порядка (SOU) и схемы QUICK.

$$\begin{aligned} Q_{fc}^{FOU} &= Q_C \\ Q_{fc}^{CD} &= 1/2(1 + Q_C) \\ Q_{fc}^{SOU} &= 3/2Q_C \\ Q_{fc}^{QUICK} &= 3/8(1 + 2Q_C), \end{aligned} \quad (2.30)$$

Для сохранения локальной монотонности на отрезке  $[x_U, x_D]$  необходимо, чтобы нормализованное значение искомой функции в потоковом узле лежало между  $Q_C$  и  $Q_D$ . Дополняя это требование естественными из физических соображений условиями  $f(0) = 0$  и  $f(1) = 1$ , получаем ограничения на  $Q_{fc} = f(Q_C)$ :

$$\text{Для } 0 \leq Q_C \leq 1: \quad Q_C \leq Q_{fc} \leq 1, \quad f(0) = 0, \quad f(1) = 1. \quad (2.31)$$

Кроме FOU, ни одна из схем (2.3) условию (2.31) не удовлетворяет. Это ясно видно из рис.7, где изображены графики функции  $Q_{fc} = f(Q_C)$  и допустимая, с точки зрения монотонности, область их значений – треугольник ABC.

Модификация схемы QUICK с помощью процедуры ULTRA состоит в построении непрерывной функции  $f(Q_C)$ , которая в плоскости нормализованных переменных

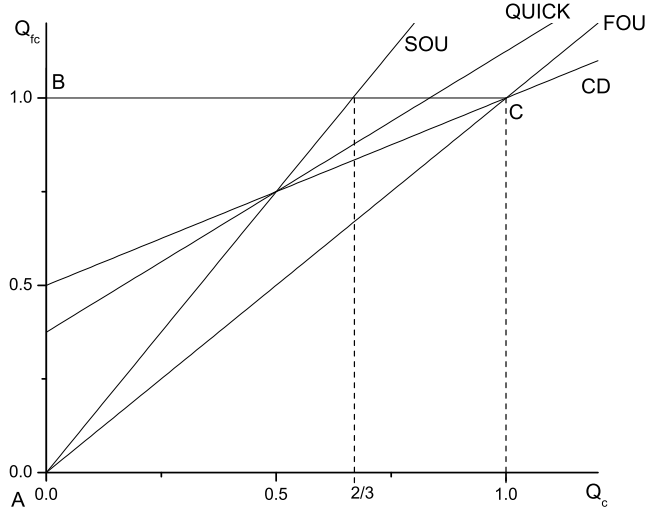


Рис. 7: Плоскость нормализованных переменных

проходит через точку  $(0, 0)$ , при  $0 \leq Q_C \leq 1$  совпадает с  $f^{QUICK}$  там, где  $f^{QUICK} \leq 1$  и не превосходит единицы там, где  $f^{QUICK} > 1$ . В области, где решение немонотонно:  $Q_C < 0$ ,  $Q_C > 1$ ,  $f(Q_C)$  продолжается таким образом, чтобы выполнялось естественное условие  $df/dQ_C > 0$  и полученная функция была непрерывна в точках  $Q_C = 0$ ,  $Q_C = 1$ .

В схеме ULTRA-QUICK [15] и в совпадающей с ней по существу схеме SMART (*Sharp Monotonic Algorithm for Realistic Transport* [18]), интерполяция в потоковую точку осуществляется по формулам:

$$Q_{fc}^{U-QUICK} = \begin{cases} Q_C & \text{если } Q_C < 0; \\ 10Q_C & \text{если } 0 \leq Q_C < 3/74; \\ 3/8(1 + 2Q_C) & \text{если } 3/74 \leq Q_C < 5/6; \\ 1 & \text{если } 5/6 \leq Q_C \leq 1; \\ Q_C & \text{если } Q_C > 1. \end{cases} \quad (2.32)$$

В (2.32) в областях  $Q_C < 0$ ,  $Q_C > 1$  используется простейшая интерполяция, отвечающая аппроксимации конвективных членов с помощью направленных разностей первого порядка. Применяются и другие способы, например  $Q_{fc} = Q_{fc}^{SOU}$  для  $Q_C < 0$ , и  $Q_{fc} = Q_{fc}^{CD}$  для  $Q_C > 1$  [10].

Алгоритм решения нестационарных задач, основанный на использовании схемы ULTRA-QUICK, строится следующим образом. На текущем временном слое с помощью интерполяции, соответствующей схеме QUICK, находится  $Q_{i+\frac{1}{2}}$  – значение искомой функции в центре каждой расчетной ячейки; затем вычисляются нормализованные переменные  $Q_{i+\frac{1}{2}}$  и  $Q_i$ . Если точка  $P = (Q_i, Q_{i+\frac{1}{2}})$  попадает в треугольник

$ABC$  (рис.7), то найденное  $Q_{i+\frac{1}{2}}$  используется для вычисления конвективного потока; в противном случае в качестве нормализованного значения в потоковой точке берется ордината точки пересечения прямой  $Q_C = Q_i$  с ближайшей к точке  $P$  границей треугольника. Для того, чтобы избежать неединственности вблизи  $Q_C = 0$ , в дополнение к (2.31) вводится ограничение  $Q_{fc} \leq \alpha Q_C$ , где  $\alpha \sim 10 \div 100$ .

Дальнейшее развитие идей, используемых при построении схемы ULTRA-QUICK, привело к созданию семейства алгоритмов ULTRA-SHARP (*Simple High-Accuracy Resolution Program*) [19], [10]. Эти алгоритмы строятся на основе схемы QUICK, которая используется в областях, где градиенты решения невелики; в областях резкого изменения решения конвективные члены аппроксимируются на расширенном шаблоне с помощью направленных разностей пятого или седьмого порядка. Монотонность схемы обеспечивается применением процедуры ULTRA. В реальных расчетах переход к схемам высокого порядка происходит в сравнительно небольшом числе узлов и не приводит к существенному увеличению объема вычислений, однако значительно повышает точность расчетов в целом.

При численной реализации схем на расширенных шаблонах специальное внимание необходимо уделять методам решения возникающих при этом систем линейных уравнений [17]. Вообще говоря, включение в схему направленных разностей высокого порядка не сказывается отрицательно на устойчивости разностной схемы [20]. Однако неудачный выбор итерационной процедуры может привести к значительному снижению скорости сходимости по сравнению со схемами более низкого порядка точности. В нестационарных задачах важную роль играет распределение дополнительных слагаемых по временным слоям [10], [21].

Приведенная выше геометрическая интерпретация свойств схем в терминах нормализованных переменных широко используется для построения алгоритмов, позволяющих получать неосциллирующие решения. В дополнение к схеме ULTRA-QUICK опишем еще несколько схем из этого класса.

Схема BSOU (Bounded Second-Order Upwind) [22] строится на основе аппроксимации конвективных членов направленными разностями второго порядка.

$$Q_{fc}^{BSOU} = \begin{cases} Q_C & \text{если } Q_C < 0; \\ 3/2 Q_C & \text{если } 0 \leq Q_C < 2/3; \\ 1 & \text{если } 2/3 \leq Q_C < 1; \\ Q_C & \text{если } Q_C > 1. \end{cases} \quad (2.33)$$

Схема VONOS (Variable-Order Non-Oscillatory Scheme) [23] представляет собой ком-

бинацию схем QUICK и SOU.

$$Q_{fc}^{VONOS} = \begin{cases} Q_C & \text{если } Q_C < 0; \\ 10Q_C & \text{если } 0 \leq Q_C < 3/74; \\ 3/8(1 + 2Q_C) & \text{если } 3/74 \leq Q_C < 1/2; \\ 3/2Q_C & \text{если } 1/2 \leq Q_C < 2/3; \\ 1 & \text{если } 2/3 \leq Q_C \leq 1; \\ Q_C & \text{если } Q_C > 1. \end{cases} \quad (2.34)$$

Перечень схем, аналогичных (2.32)-(2.34), можно продолжать. Однако уже приведенные примеры показывают, что существуют практически неограниченные возможности построения кусочно-линейной непрерывной функции  $Q_{fc} = f(Q_C)$ , определяющей разностную схему. Используются также алгоритмы с нелинейной интерполяцией в потоковую точку [24]. Сравнивая функции  $f(Q_C)$  для различных схем, можно на качественном уровне оценить свойства вычислительного алгоритма. Ясно, что чем ближе график функции  $Q_{fc} = f(Q_C)$  расположен к прямой  $Q_{fc} = Q_C$ , соответствующей направленным разностям первого порядка, тем больше соответствующая схема "размазывает" решение в областях его резкого изменения; точки на прямой  $Q_{fc} = 1$  соответствуют введению антидиффузии. Как правило, аппроксимация конвективных членов разностными соотношениями типа (2.32)-(2.34) и анализ разностных алгоритмов в терминах нормализованных переменных применяются при решении стационарных задач. В нестационарном случае более наглядную физическую интерпретацию свойств разностных схем, дает метод Фурье и метод дифференциального приближения.

### 3 Нестационарная модельная задача

Пусть задано уравнение

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial(uQ)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2}. \quad (3.1)$$

Предположим, что  $u = \text{const} > 0$ ; и число Пекле  $Pe = \frac{uL}{D} \gg 1$ . В области  $\Omega = \{t \geq 0, x \in [-L, L]\}$  введём сетку  $\Omega_{\tau h} = \Omega_\tau \times \Omega_h$ ,  $\Omega_\tau = \{t_0 = 0, t_{k+1} = t_k + \tau\}$ ,  $\Omega_h = \{x_i, i = -N_1, -N_1 + 1 \dots, N_2 - 1, N_2, x_{-N_1} = -L, x_{N_2} = L\}$  с шагами  $h_i$  – по пространству и  $\tau$  – по времени. Потоковые узлы, шаги сетки  $h_{i+\frac{1}{2}}$  и  $h_i$  определяются так же, как и раньше.

Проинтегрируем уравнение (3.1) по ячейке сетки  $[t_{k+1}, t_k] \times [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$  и запишем полученную в результате разностную схему в виде

$$Q_t + \frac{W_{i+\frac{1}{2}}^{(\sigma)} - W_{i-\frac{1}{2}}^{(\sigma)}}{h_i} = DQ_{x\hat{x}}^{(\sigma)} \quad (3.2)$$

Здесь  $Q_t = \frac{Q_i^{k+1} - Q_i^k}{\tau}$ ; параметр  $\sigma$  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.

Проиллюстрируем особенности поведения в нестационарном случае схем с аппроксимацией конвективных членов направленными и центральными разностями на примере численного решения уравнения (3.1) с начальными условиями

$$Q_0(x) = \begin{cases} 1, & x \leq 0 \\ 0, & x > 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

Точное решение задачи Коши для уравнения (3.1) с начальными данными (3.3) даётся формулой [25]

$$\overline{Q}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \int_0^{\frac{x-ut}{2\sqrt{Dt}}} e^{-z^2} dz \right\} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left( \frac{x-ut}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (3.4)$$

Численно решалась первая краевая задача. На границе, в точках  $x_{-N_1} = -L$ ,  $x_{N_2} = L$ ,  $Q_{-N_1} = \overline{Q}(-L, t)$ ,  $Q_{N_2} = \overline{Q}(L, t)$ .

На рис.8 изображено точное решение задачи в момент времени  $t = 1$  и результаты расчетов по схеме с направленными разностями. Расчеты проводились для следующих значений параметров  $D = 0.02$ ,  $u = 10$ ,  $h = 0.05$ ,  $\tau = 0.003$ . таким образом сеточное число Пекле  $P_h = 25$

Как и в стационарном случае, схемная диффузия приводит к существенному сглаживанию решения в области его резкого изменения. Однако в нестационарных задачах эффективный коэффициент диффузии  $D^*$  зависит не только от пространственной аппроксимации уравнения, но и от выбора аппроксимации по времени. Чисто неявная разностная схема ( $\sigma = 1$ ) увеличивает схемную диссипацию. В схеме второго порядка точности по времени ( $\sigma = 0.5$ ) схемная диссипация определяется только аппроксимацией по пространству. Использование явной схемы ( $\sigma = 0$ ) позволяет несколько уменьшить схемную диффузию по сравнению со стационарным случаем.

Результаты расчетов задачи (3.1), (3.3) по схеме с центральными разностями при тех же значениях параметров приведены на рис. 9

Здесь также четко прослеживается влияние аппроксимации по времени на диссипативные свойства алгоритма. При  $\sigma = 1$  схемная диффузия разглаживает решение, а при  $\sigma = 0.5$  оно приобретает типичный для схем с центральными разностями колебательный характер.

Более подробный анализ результатов расчетов позволяет провести метод дифференциального приближения, развитый в работах Ю.И.Шокина и Н.Н.Яненко [26], [27]. Этот метод широко используется в настоящее время для исследования свойств дискретных моделей и при конструировании вычислительных алгоритмов.



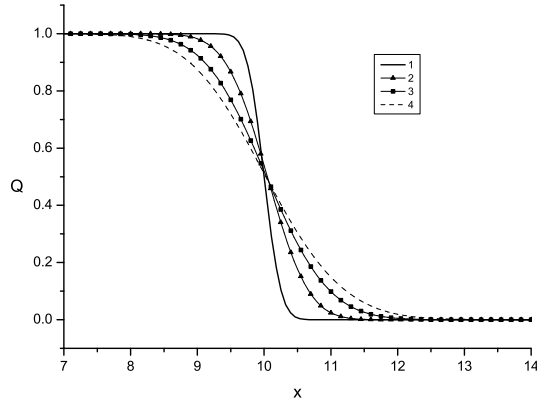


Рис. 8: Результаты расчетов по схеме с направленными разностями (3.7) 1 – точное решение, 2 –  $\sigma = 0$ , 3 –  $\sigma = 0.5$ , 4 –  $\sigma = 1$ .

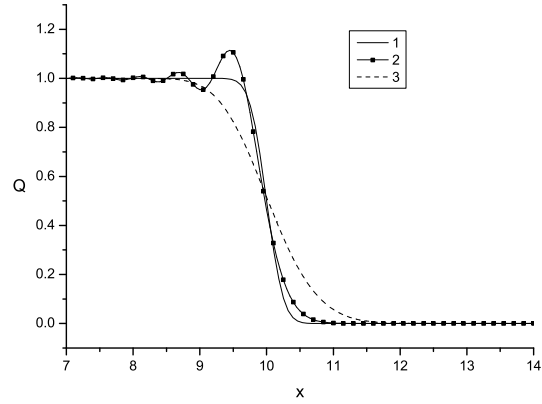


Рис. 9: Результаты расчетов по схеме с центральными разностями (3.18) 1 – точное решение, 2 –  $\sigma = 0.5$ , 3 –  $\sigma = 1$ .

### 3.1 Метод дифференциального приближения. Схемная диффузия и дисперсия

Процедура применения метода дифференциального приближения для анализа свойств разностных алгоритмов заключается в следующем.

Пусть  $\mathcal{L}(Q) = 0$  – дифференциальное уравнение, а  $\mathcal{L}_h^\tau(Q) = 0$  – его разностная аппроксимация. Здесь, как это обычно делается в теоретических исследованиях [1], разностный оператор  $\mathcal{L}_h^\tau(Q) = 0$  рассматривается на том же классе функций, что и исходное дифференциальное уравнение, т.е. предполагается, что разностным уравнениям удовлетворяют функции непрерывного аргумента. Пусть эти функции бесконечно дифференцируемы. Используя разложение в ряд Тейлора, уравнение  $\mathcal{L}_h^\tau(Q) = 0$  можно записать в виде

$$\mathcal{L}_h^\tau(Q) = \mathcal{L}(Q) + \mathcal{E}(Q, \tau, h) = 0, \quad (3.5)$$

где  $\mathcal{E}(Q, \tau, h)$  – ошибка аппроксимации.

Соотношение (3.5) 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 (3.5), продифференцированного необходимое число раз. В результате получается дифференциальное уравнение с бесконечным числом членов, которое называется дифференциальным представлением разностной схемы.

$$\mathcal{L}_h^\tau(Q) = \mathcal{L}(Q) + \sum_{l=n}^{\infty} a_l \frac{\partial Q^l}{\partial x^l} = 0 \quad (3.6)$$

$n$  – порядок исходного дифференциального уравнения. В случае сходимости соответствующих рядов, (3.6) содержит в себе полную информацию о разностной схеме [27]. Дифференциальное представление разностной схемы, как правило, не используется для анализа её свойств. Обычно рассматривается конечное число членов в представлении (3.6) и строится, в зависимости от числа слагаемых, сохраняемых в  $\mathcal{E}(Q, \tau, h)$ , соответственно первое, второе и т.д. дифференциальное приближение. Дифференциальные уравнения с конечным числом членов хотя и не могут дать исчерпывающей информации о решении разностной задачи, однако оказываются весьма полезными при анализе его поведения. Наиболее естественно в рамках метода дифференциального приближения интерпретируются диссипативные и дисперсионные свойства разностных схем, которые обусловлены соответственно слагаемыми с четными и нечетными производными, сохраненными в  $\mathcal{E}(Q, \tau, h)$  [27]. В зарубежной литературе описанная процедура называется методом модифицированного уравнения [28], [3], [11]. В качестве примера построим дифференциальное приближение для схемы с весами (3.2) и аппроксимацией конвективного члена с помощью направленных разностей первого порядка (схема WFOU - *Weighted First Order Upwind*)

Дифференциальное приближение для схемы WFOU. Пусть скорость  $u = \text{const} > 0$ . Запишем рассматриваемую разностную схему на равномерной разностной сетке.

$$Q_t + uQ_{\bar{x}}^{(\sigma)} - DQ_{\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)} = 0 \quad (3.7)$$

С помощью соотношения  $Q^{(\sigma)} = Q^{(0.5)} + (\sigma - 0.5)\tau Q_t$ , перепишем (3.7) следующим образом

$$Q_t + uQ_{\bar{x}}^{(0.5)} - DQ_{\bar{x}\bar{x}}^{(0.5)} + u(\sigma - 0.5)\tau Q_{t\bar{x}} - D(\sigma - 0.5)\tau Q_{t\bar{x}\bar{x}} = 0. \quad (3.8)$$

Используя разложение функции  $Q$  в ряд Тейлора в окрестности точки  $(t_k + \tau/2, x_i)$ , не представляет труда получить представление для разностных операторов, входящих в (3.8). Например,

$$\begin{aligned} Q_t &= \frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + \frac{\tau^2}{24} \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t^3} + \dots \\ Q^{(0.5)} &= \bar{Q} + \frac{\tau^2}{8} \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial t^2} + \dots \\ Q_{\bar{x}}^{(0.5)} &= \frac{\partial \bar{Q}}{\partial x} - \frac{h}{2} \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} + \frac{h^2}{6} \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial x^3} + \frac{\tau^2}{8} \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t^2 \partial x} + \dots \quad \text{и т.д.} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Здесь  $\bar{Q} = Q(t_k + \tau/2, x_i)$ . Подставим (3.9) и аналогичные выражения для  $Q_{t\bar{x}}$  и  $Q_{\bar{x}\bar{x}}$  в (3.8):

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{Q}}{\partial x} - D \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} - \frac{uh}{2} \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} + u(\sigma - 0.5)\tau \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial t \partial x} + \frac{uh^2}{6} \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial x^3} \\ &+ \frac{\tau^2}{24} \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t^3} - (\sigma - 0.5)(u \frac{\tau h}{2} + D\tau) \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t \partial x^2} + \frac{u\tau^2}{8} \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t^2 \partial x} + \dots = 0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

Для исключения члена  $u(\sigma - 0.5)\tau \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial t \partial x}$  подействуем оператором  $-u(\sigma - 0.5)\tau \frac{\partial}{\partial x}$  на уравнение (3.10) и найденное уравнение прибавим к (3.10). В результате получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{Q}}{\partial x} - D \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} - \left( \frac{uh}{2} + u^2 \tau (\sigma - 0.5) \right) \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} + \\ & \left( \frac{uh^2}{6} + u^2 \frac{\tau h}{2} (\sigma - 0.5) + u D \tau (\sigma - 0.5) \right) \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial x^3} + \frac{\tau^2}{24} \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t^3} \\ & - (\sigma - 0.5) \left( u \frac{\tau h}{2} + u^2 \tau^2 (\sigma - 0.5) + D \tau \right) \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t \partial x^2} + \frac{u \tau^2}{8} \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t^2 \partial x} + \dots = 0 \end{aligned} \quad (3.11)$$

Аналогично исключим член  $\frac{\tau^2}{24} \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t^3}$ , подействовав на (3.11) оператором  $-\frac{\tau^2}{24} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$  и сложив полученное уравнение с (3.11).

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{Q}}{\partial x} - D \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} - \left( \frac{uh}{2} + u^2 \tau (\sigma - 0.5) \right) \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} + \\ & \left( \frac{uh^2}{6} + u^2 \frac{\tau h}{2} (\sigma - 0.5) + u D \tau (\sigma - 0.5) \right) \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial x^3} \\ & - (\sigma - 0.5) \left( u \frac{\tau h}{2} + u^2 \tau^2 (\sigma - 0.5) + D \tau \right) \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t \partial x^2} + \frac{u \tau^2}{12} \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t^2 \partial x} + \dots = 0 \end{aligned} \quad (3.12)$$

Продифференцировав (3.12) соответствующим образом, не представляет труда получить равенства, которые позволят исключить из дифференциального представления смешанные производные:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t \partial x^2} + u \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial x^3} + \dots = 0 \\ & \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial t^2 \partial x} - u^2 \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial x^3} + \dots = 0, \end{aligned}$$

Отбрасывая члены, содержащие производные порядка выше третьего, результат проведенных вычислений можно представить в виде

$$\frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{Q}}{\partial x} - D \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} \underbrace{- uh \eta_2(\mathcal{C}) \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} + uh^2 \eta_3(\mathcal{C}, \mathcal{S}) \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial x^3}}_{\text{старшие члены в ошибке аппроксимации}} = 0. \quad (3.13)$$

С точностью до  $O(h^3)$  уравнение (3.13) является дифференциальным приближением схемы (3.7). Здесь  $\mathcal{C} = \frac{u\tau}{h}$  – число Куранта и  $\mathcal{S} = \frac{D\tau}{h^2}$  – диффузионное число Куранта.

$$\begin{aligned} \eta_2 &= \eta_2^{WFOU} = \frac{1}{2} + \mathcal{C}(\sigma - 0.5) \\ \eta_3 &= \eta_3^{WFOU} = \frac{1}{6} + \frac{\mathcal{C}^2}{12} + (\sigma - 0.5)(\mathcal{C} + \mathcal{C}^2(\sigma - 0.5) + 2\mathcal{S}) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Для того чтобы пояснить смысл использования дифференциального приближения при анализе свойств разностной схемы, рассмотрим решение уравнения (3.13), описывающее бегущую волну с единичной начальной амплитудой:

$$Q(t, x) = e^{-p(m)t} e^{im[x-q(m)t]}, \quad (3.15)$$

где  $m$  – волновое число,  $p(m)$  определяет скорость затухания амплитуды,  $q(m)$  – скорость распространения волны. Подставляя (3.15) в (3.13), нетрудно убедиться, что

$$p(m) = Dm^2(1 + P_h\eta_2), \quad q(m) = u(1 - h^2m^2\eta_3) \quad (3.16)$$

В исходном уравнении затухание амплитуды определяется коэффициентом диффузии:  $p(m) = Dm^2$ , скорость распространения волны постоянна:  $q(m) = u$  ( $\eta_2 = \eta_3 = 0$ ). У бегущей волны, удовлетворяющей уравнению (3.13), амплитуда зависит от сеточного числа Пекле, а волны разной длины распространяются с различной скоростью. Таким образом, дифференциальное приближение схемы позволяет интерпретировать свойства разностного алгоритма в терминах "физических" свойств дискретной среды: схемной диффузии и дисперсии. Рассматривая младшие производные четного и нечетного порядка в дифференциальном представлении разностной схемы, можно судить соответственно о диссипативных и дисперсионных свойствах разностного алгоритма.

Уравнение (3.13) показывает, что разностная схема с направленными разностями фактически описывает процесс конвективной диффузии в среде с коэффициентом диффузии  $D^* = D + D_h$ . Схемная диффузия  $D_h = uh\eta_2^{WFOU}$  зависит от выбора аппроксимации по времени и по пространству. Использование направленных разностей первого порядка всегда приводит к увеличению схемной диссипации, при этом явные схемы ( $\sigma = 0$ ) ослабляют сеточную диффузию, а неявные ( $\sigma > 0.5$ ) – ее усиливают. При  $\sigma = 0.5$  диссипативные свойства схемы определяются только выбором аппроксимации по пространству. (см. рис.8 точное решение, направленные разности,  $\sigma = 0, 0.5, 1$  .)

Диссипативные и дисперсионные свойства разностного алгоритма можно оценить, сравнив изменение за время  $\tau$  амплитуды и фазы бегущих волн, поведение которых описывается дифференциальным приближением схемы и исходным дифференциальным уравнением. За один шаг по времени амплитуда решения уравнения (3.14) изменится в  $a = e^{-Dm^2\tau(1+P_h\eta_2)}$  раз.

$$a \approx 1 - Dm^2\tau(1 + P_h\eta_2) = 1 - (mh)^2(\mathcal{S} + \mathcal{C}\eta_2). \quad (3.17)$$

Для исходной задачи  $a_d \approx 1 - mh^2\mathcal{S}$ . Изменение фазы  $m$ -ой гармоники для задач (3.14) и (3.1) составляет соответственно  $\phi = -mh\mathcal{C}(1 - (mh)^2\eta_3)$  и  $\phi_d = -mh\mathcal{C}$ .

Дифференциальное приближение используется также для предварительного анализа устойчивости разностной схемы. Амплитуда бегущей волны убывает, если  $p(m) = Dm^2(1 + P_h\eta_2) > 0$ . Откуда следует необходимое условие устойчивости. Для явной

схемы оно имеет вид  $2\mathcal{S} + \mathcal{C} - \mathcal{C}^2 > 0$ , что эквивалентно неравенству  $\tau < \frac{h^2(2 + P_h)}{DP_h^2}$ .

Это более слабое ограничение, чем условие  $2\mathcal{S} + \mathcal{C} \leq 1$ , т.е.  $\tau < \frac{h^2}{D(2 + P_h)}$ , которое возникает в результате исследования устойчивости явной схемы с направленными первыми разностями с помощью метода Неймана. [3, т.1, стр.389]. Такой результат является вполне естественным. В методе Неймана рассматривается весь спектр сеточной задачи, а дифференциальное приближение, полученное с помощью разложения в ряд Тейлора при  $h \rightarrow 0$ ,  $\tau \rightarrow 0$ , содержит информацию только о длинноволновой части спектра, т.е. о тех гармониках, у которых  $mh$  – мало. Более подробно об использовании дифференциального приближения при исследовании устойчивости см. в [27].

В качестве еще одного примера выпишем дифференциальное приближение для схемы с весами и симметричной аппроксимацией конвективных членов (схема WCD – *Weighted Central Differences*).

Дифференциальное приближение для схемы WCD. На равномерной сетке при постоянной скорости эта схема имеет вид

$$Q_t + uQ_{\circ x}^{(\sigma)} - DQ_{\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)} = 0. \quad (3.18)$$

С помощью описанной выше процедуры не представляет труда получить дифференциальное приближение для (3.18). Выпишем его с точностью до членов порядка  $h^4$ .

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{Q}}{\partial x} - D \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} \\ & \underbrace{- uh\eta_2^{WCD}(\mathcal{C}) \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial x^2} + uh^2\eta_3^{WCD}(\mathcal{C}, \mathcal{S}) \frac{\partial^3 \bar{Q}}{\partial x^3} + uh^3\eta_4^{WCD}(\mathcal{C}, \mathcal{S}) \frac{\partial^4 \bar{Q}}{\partial x^4}}_{\text{старшие члены в ошибке аппроксимации}} = 0. \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\eta_2^{WCD} = \mathcal{C}(\sigma - 0.5), \quad \eta_3^{WCD} = \frac{1}{6} + \frac{\mathcal{C}^2}{12} + (\sigma - 0.5)(\mathcal{C}^2(\sigma - 0.5) + 2\mathcal{S}) \quad (3.20)$$

Чтобы не загромождать изложение дополнительными деталями, коэффициент при четвертой производной приведем для случая  $\sigma = 0.5$  (схема Кранка-Николсона [3, т. I, стр.388].) Это тем более оправдано, что в схемах второго порядка точности по времени и аппроксимацией конвективных членов центральными разностями дополнительная диссипация, связанная со вторыми пространственными производными, отсутствует:  $\eta_2^{CN} = 0$ . (Верхний индекс CN соответствует схеме Кранка-Николсона.) Старшим членом в ошибке аппроксимации становится дисперсионный член. Определяющую роль в формировании диссипативных свойств алгоритма приобретает четвертая производная.

$$\eta_4^{CN} = - \left( \frac{1}{4}\mathcal{C}\mathcal{S} + \frac{1}{12}\frac{\mathcal{S}}{\mathcal{C}} \right). \quad (3.21)$$

Подставив бегущую волну (3.15) в (3.19), получим, что убывание амплитуды зависит от величины  $p(m) = Dm^2(1 + P_h\eta_2^{WCD} + P_h h^2 m^2 \eta_4^{WCD})$ . т.е четвертая производная оказывает дополнительное сглаживающее влияние на решение, если  $\eta_4^{WCD} > 0$ , в противном случае она играет роль антидиффузии. Схема Кранка-Николсона как раз обладает такой антидиффузией, связанной с производной четвертого порядка:  $\eta_4^{CN} < 0$ . Влияние схемной дисперсии и диффузии (антидиффузии) на качество решения демонстрирует рис. 9

Схемы с искусственной дисперсией ATD ( Artificial Dispersion ) . Из анализа дифференциального приближения (3.19) сразу следует, что управлять дисперсионными свойствами разностного алгоритма можно за счет введения в него членов с третьей пространственной производной, при этом желательно получить схему с положительной диффузией четвертого порядка. Рассмотрим с этой точки зрения следующую аппроксимацию уравнения (3.1).

$$\begin{aligned} Q_t + uQ_{\circ x}^{(0.5)} - DQ_{x\bar{x}}^{(0.5)} - h^2 u \eta_3^{ATD} [\varkappa Q_{x\bar{x}\bar{x}}^{(0.5)} + (1 - \varkappa) Q_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(0.5)}] &= 0 \\ C_{x\bar{x}\bar{x}} &= \frac{C_{i+2} - 3C_{i+1} + 3C_i - C_{i-1}}{h^3} \\ C_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}} &= \frac{C_{i+1} - 3C_i + 3C_{i-1} - C_{i-2}}{h^3} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Параметр  $\varkappa$  определяет аппроксимацию третьей производной:  $\varkappa = 0.5$  – симметричную,  $\varkappa = 0$  – третью "разность назад";  $\varkappa = 1$  – третью "разность вперед". Выбирая  $\eta_3^{ATD} = \eta_3^{CN}$ , можно уничтожить дисперсионное слагаемое в дифференциальном приближении (3.19); коэффициент при четвертой производной станет равным  $\eta_4^{ATD} = \eta_4^{CN} + \frac{\eta_3^{CN}}{2}(1 - 2\varkappa)$ . Как видно из этой формулы, симметричная аппроксимация третьей производной не влияет на диссипативные свойства алгоритма: четвертая производная по-прежнему будет действовать как антидиффузия. Использование направленных третьих разностей ( $\varkappa = 0$  при  $u > 0$ ) позволяет ослабить действие отрицательной схемной диффузии четвертого порядка. При достаточно больших значениях сеточного числа Пекле  $P_h = \frac{C}{S}$  четвертая производная будет оказывать на решение сглаживающее влияние:  $\eta_4^{ATD} = \left[ \frac{1}{3} \left( 1 - \frac{S}{C} \right) + C^2 \left( \frac{1}{6} - \frac{S}{C} \right) \right] \frac{1}{4}$ . Результаты расчетов, полученные с помощью схемы с искусственной дисперсией, приведены на рис. 10 ( $D = 0.02$ ,  $u = 10$ ,  $h = 0.02$ ,  $\tau = 0.003$  ).

Направленные третьи разности позволяют существенно повысить качество решения: подавить "нефизические колебания" и сохранить крутизну фронта. Незначительная немонотонность решения перед движущимся фронтом и за ним довольно быстро сглаживается. Она может быть устранена с помощью той или иной процедуры ограничения потоков [10] или просто использованием несколько более подробных сеток по пространству.

Изменение параметра  $\eta_3^{ATD}$  в схеме (3.22) позволяет управлять дисперсионными и диссипативными свойствами алгоритма. При  $\eta_3^{ATD} = 1/2$ , например, ( в стационарном случае это соответствует схеме SOU ), благодаря диссипации четвертого

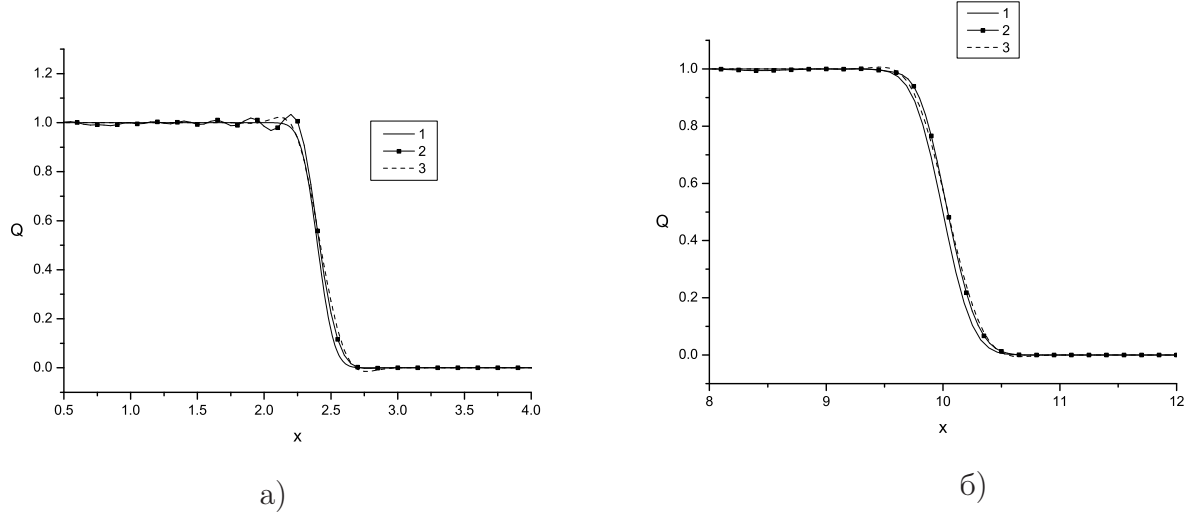


Рис. 10: Результаты расчетов по схеме (3.22) 1 – точное решение, 2–  $\kappa = 0.5$ , 3–  $\kappa = 0$   
а)  $t = 0.24$ , б)  $t = 1.0$ .

порядка, осцилляции в решении полностью пропадают, но вместе с тем увеличивается и ширина фронта.

В многомерном случае на неравномерных сетках при переменной скорости процедура построения дифференциального приближения становится чрезвычайно громоздкой, производные высоких порядков теряют свой наглядный физический смысл, появляются различные возможности их представления, поэтому в реальных расчетах искусственная дисперсия вводится, как правило, независимо по каждому направлению с коэффициентами  $\eta_3^{ATD} = 1/6, 1/8, 1/6 + \mathcal{C}^2/12$ .

Дополнительную информацию о свойствах разностных схем можно получить на основе Фурье-анализа.

## 3.2 Метод Неймана.

Пусть бегущая волна (3.15) удовлетворяет уравнению (3.1). Рассмотрим проекцию этого решения на разностную сетку  $\Omega_{\tau h}$ .

$$Q_i^k = Q(t_k, x_i) = e^{-pt_k} e^{im[x_i - qt_k]} = e^{-\tau k[p + imq]} e^{imhi} = \mathbf{a}_k e^{i\theta_i}, \quad (3.23)$$

Здесь  $\mathbf{a}_k = |\mathbf{a}_k| e^{i\phi_k}$  – комплексная амплитуда,  $\theta = mh$  – фазовый угол.

Для уравнения конвективной диффузии (3.1)  $p = Dm^2$ ,  $q = u$ . Таким образом решение в момент времени  $t + \tau$  получается из решения в момент времени  $t$  умножением на комплексное число  $\mathbf{a} = e^{\tau(Dm^2 + imu)}$ ; т.е. амплитуда бегущей волны с волновым числом  $m$  изменяется в  $|\mathbf{a}| = e^{-\tau Dm^2}$  раз, сдвиг по фазе равен  $\phi = -\tau imu = -\mathcal{C}\theta$ .

Будем искать решение разностной задачи, аппроксимирующей уравнение (3.1) в виде сеточной бегущей волны (3.23). В дискретном случае ее параметры  $p$  и  $q$  и, тем самым, множитель перехода со слоя на слой, зависят от разностной схемы и сетки.

Выпишем множитель перехода для явной схемы с аппроксимацией конвективных членов направленными разностями первого порядка. Запишем схему в виде

$$Q_i^{k+1} = Q_i^k - \mathcal{C}(Q_i^k - Q_{i-1}^k) + \mathcal{S}(Q_{i-1}^k - 2Q_i^k + Q_{i+1}^k) \quad (3.24)$$

Подставляя (3.23) в (3.24), получим

$$\mathbf{a}_{k+1}e^{i\theta i} = \mathbf{a}_k e^{i\theta i} - \mathcal{C}\mathbf{a}_k(e^{i\theta i} - e^{i\theta(i-1)}) + \mathcal{S}\mathbf{a}_k(e^{i\theta(i-1)} - 2e^{i\theta i} + e^{i\theta(i+1)}),$$

или, после деления на  $e^{i\theta i}$ ,  $\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k G$ , где  $G$  – множитель перехода со слоя  $t_k$  на слой  $t_{k+1}$ :

$$G = 1 - \mathcal{C}(1 - e^{-i\theta}) + \mathcal{S}(e^{i\theta} - 2 + e^{-i\theta}) = 1 - (\mathcal{C} + 2\mathcal{S})(1 - \cos \theta) - i\mathcal{C} \sin \theta \quad (3.25)$$

Равенство (3.25) позволяет проанализировать устойчивость разностной схемы, оценить ее диссипативные и дисперсионные свойства. Начнем с анализа устойчивости.

В соответствии со спектральным признаком Неймана [29], [30], [16] необходимым условием устойчивости разностной схемы является выполнение неравенства  $|G| \leq 1$  для всех значений  $\theta = mh$ . В дифференциальном случае длина волны  $\lambda = 2\pi/m$  может быть сколь угодно малой. Минимальная длина волны, существующая в дискретном случае,  $\lambda_{min} = 2h$ , поэтому фазовый угол  $\theta = mh$  изменяется в диапазоне  $[0, \pi]$ .

С помощью элементарных преобразований нетрудно получить, что

$$|G|^2 = 1 - 4(\mathcal{C} + 2\mathcal{S}) \sin^2 \theta/2 + 4(\mathcal{C} + 2\mathcal{S})^2 \sin^4 \theta/2 + 4\mathcal{C}^2 \sin^2 \theta/2 \cos^2 \theta/2 \leq 1.$$

Из этого неравенства следует условие

$$(\mathcal{C} + 2\mathcal{S})[(\mathcal{C} + 2\mathcal{S}) - 1] \sin^2 \theta/2 + [\mathcal{C}^2 - (\mathcal{C} + 2\mathcal{S})] \cos^2 \theta/2 \leq 0,$$

которое должно выполняться для всех  $\theta \in [0, \pi]$ . Откуда получаем необходимое условие устойчивости явной разностной схемы с направленными разностями первого порядка:

$$\mathcal{C} + 2\mathcal{S} \leq 1 \quad (3.26)$$

Заметим, что полученное в п. 3.1 с помощью дифференциального приближения условие  $\mathcal{C}^2 - (\mathcal{C} + 2\mathcal{S}) < 0$  является более слабым, так как относится лишь к длинноволновой части спектра:  $\theta = mh \rightarrow 0$ .

Скорость убывания амплитуды сеточного решения определяется модулем коэффициента перехода. Сравнивая  $|G|$  с изменением за время  $\tau$  амплитуды решения дифференциальной задачи ( $a = e^{-\tau D m^2}$ ), можно оценить диссипативные свойства схемы. При малых волновых числах  $|G| \approx 1 - (mh)^2(\mathcal{S} + 1/2\mathcal{C}(1 - \mathcal{C}))$ , что, как и следовало ожидать, в точности совпадает с полученной методом дифференциального приближения оценкой (3.17).

Не представляет труда найти множитель перехода и условие устойчивости по Нейману для других рассмотренных выше разностных схем. Результаты вычислений приведены в следующей таблице.



Таблица 2

Схема	Коэффициент перехода $G$	Скорость затухания длинных волн ( $ G $ при $\theta \rightarrow 0$ )	Условие устойчивости
<i>WFOU</i>			
$\sigma = 0$	$1 - (\mathcal{C} + 2\mathcal{S})(1 - \cos \theta) - \mathbf{i}\mathcal{C} \sin \theta$	$1 - (mh)^2(\mathcal{S} + 1/2\mathcal{C}(1 - \mathcal{C}))$	$\mathcal{C} + 2\mathcal{S} \leq 1$
$\sigma = 0.5$	$\frac{1 - \frac{1}{2}(\mathcal{C} + 2\mathcal{S})(1 - \cos \theta) - \frac{1}{2}\mathbf{i}\mathcal{C} \sin \theta}{1 + \frac{1}{2}(\mathcal{C} + 2\mathcal{S})(1 - \cos \theta) + \frac{1}{2}\mathbf{i}\mathcal{C} \sin \theta}$	$1 - (mh)^2(\mathcal{S} + 1/2\mathcal{C})$	Безусловно устойчива
$\sigma = 1$	$\frac{1}{1 + (\mathcal{C} + 2\mathcal{S})(1 - \cos \theta) + \mathbf{i}\mathcal{C} \sin \theta}$	$1 - (mh)^2(\mathcal{S} + 1/2\mathcal{C}(1 + \mathcal{C}))$	Безусловно устойчива
<i>WCD</i>			
$\sigma = 0$	$1 - 2\mathcal{S}(1 - \cos \theta) - \mathbf{i}\mathcal{C} \sin \theta$	$1 - (mh)^2(\mathcal{S} - 1/2\mathcal{C}^2)$	$\mathcal{C}^2 \leq 2\mathcal{S} \leq 1$
$\sigma = 0.5$	$\frac{1 - \mathcal{S}(1 - \cos \theta) - \frac{1}{2}\mathbf{i}\mathcal{C} \sin \theta}{1 + \mathcal{S}(1 - \cos \theta) + \frac{1}{2}\mathbf{i}\mathcal{C} \sin \theta}$	$1 - (mh)^2\mathcal{S}$	Безусловно устойчива
$\sigma = 1$	$\frac{1}{1 + 2\mathcal{S}(1 - \cos \theta) + \mathbf{i}\mathcal{C} \sin \theta}$	$1 - (mh)^2(\mathcal{S} + 1/2\mathcal{C}^2)$	Безусловно устойчива

Метод Фурье дает возможность оценить фазовую ошибку разностной схемы. Для точного решения изменение фазы  $m$ -ой волны за один временной шаг равно  $\phi_e = -\mathcal{C}\theta$ , в разностном алгоритме изменение фазы  $\phi_m = \arctan \frac{Im(G)}{Re(G)}$ , поэтому дисперсионные свойства схемы можно характеризовать величиной  $\frac{\phi_m}{\phi_e}$  [11], [3], [16]. Например, относительная фазовая ошибка явной схемы с направленными разностями равна

$$\frac{\phi_m}{\phi_e} = \frac{1}{-\mathcal{C}\theta} = \arctan \frac{-\mathcal{C} \sin \theta}{1 - (\mathcal{C} + 2\mathcal{S})(1 - \cos \theta)} \quad (3.27)$$

При малых волновых числах  $\frac{\phi_m}{\phi_e} \approx 1 - \frac{1}{6}[1 - 3(\mathcal{C} + 2\mathcal{S}) + 2\mathcal{C}^2]\theta^2$ .

Влияние разностного алгоритма на амплитуду и фазу бегущей волны иллюстрируют рис. 11 а),б). На них изображена зависимость модуля коэффициента перехода и относительной погрешности определения фазы от волнового числа в схеме (3.7) и (3.18). Расчеты проводились при следующих значениях параметров:  $D = 0.02$ ,  $u = 3$ ,  $h = 0.02$ ,  $\tau = 0.003$ , что соответствует  $\mathcal{C} = 0.45$ ,  $\mathcal{S} = 0.15$ ,  $P_h = 3$ . Графики построены для длинноволновой части спектра:  $m \leq 20$ ,  $m_{max} = 157$ .

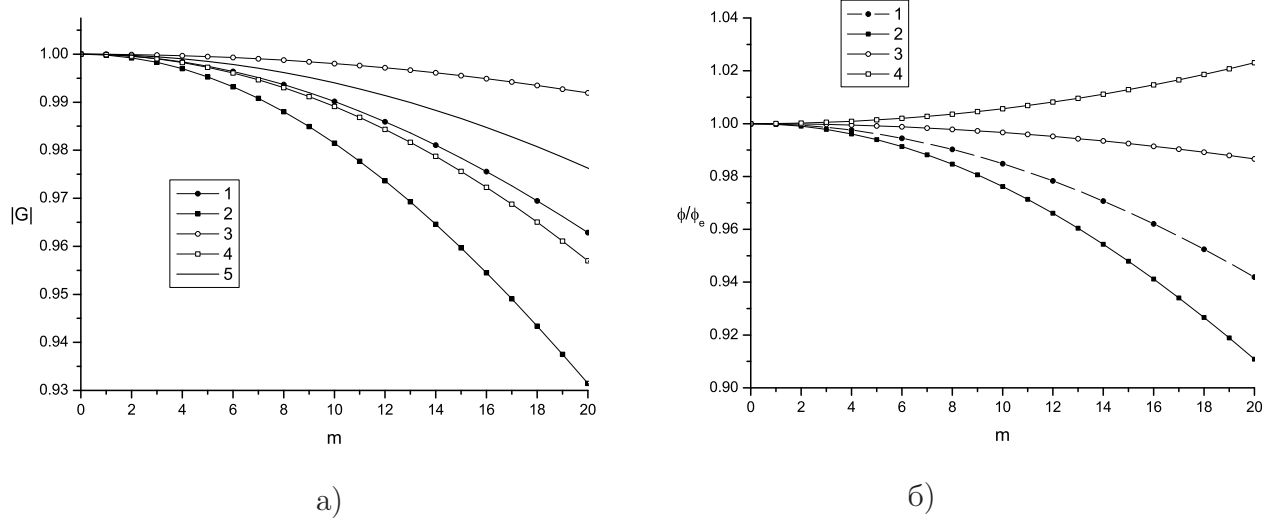


Рис. 11: Зависимость амплитуды и фазовой погрешности от волнового числа. 1 – схема *WCD*,  $\sigma = 1$ ; 2 – схема *WFOU*,  $\sigma = 1$ ; 3 – схема *WCD*,  $\sigma = 0$ ; 4 – схема *WFOU*,  $\sigma = 0$ ; 5 – дифференциальная задача.

Рис. 11 а) еще раз показывает, что аппроксимация конвективного потока с помощью направленных разностей первого порядка приводит к более быстрому, чем в дифференциальной задаче, убыванию амплитуды бегущей волны (линии 2 и 4). Использование чисто неявных схем вносит дополнительную диссипацию, явные схемы обладают антидиффузией (см. (3.14), (3.20)). При аппроксимации конвективного члена центральными разностями амплитуда решения, полученного по явной схеме (кривая 3), убывает медленнее, чем амплитуда точного решения, в чисто неявном случае (кривая 1) – быстрее.

Для чисто неявных разностных схем характерно отставание по фазе сеточного решения от точного (кривые 1 и 2, рис. 11 б). Явные схемы дают меньшую фазовую ошибку, причем направленные и центральные разности имеют противоположные дисперсионные ошибки: схема *WFOU* дает решение, опережающее по фазе точное (кривая 4), а схема *WCD*,  $\sigma = 0$  наоборот, запаздывающее (кривая 3).

Совместное действие антидиффузии, присутствующей в явных схемах, и фазовой погрешности на решение сеточной задачи иллюстрирует рис. 12. Расчеты проводились по явной схеме с аппроксимацией конвективных членов центральными разностями (3.18) и по схеме с искусственной дисперсией (3.22) ( $\sigma = 0$ ,  $\kappa = 0$ ,  $\eta_3 = 1/6$ ). Параметры расчетов такие же, как и в предыдущем случае.

Прямой расчет коэффициента перехода с одного временного слоя на другой показывает, что в длинноволновой части спектра сеточные бегущие волны, удовлетворяющие уравнениям (3.18) и (3.22), убывают с одинаковой скоростью 13 а). Тот же результат, разумеется, дает и анализ дифференциального приближения. Для рассматриваемых схем коэффициент при второй пространственной производной, величина

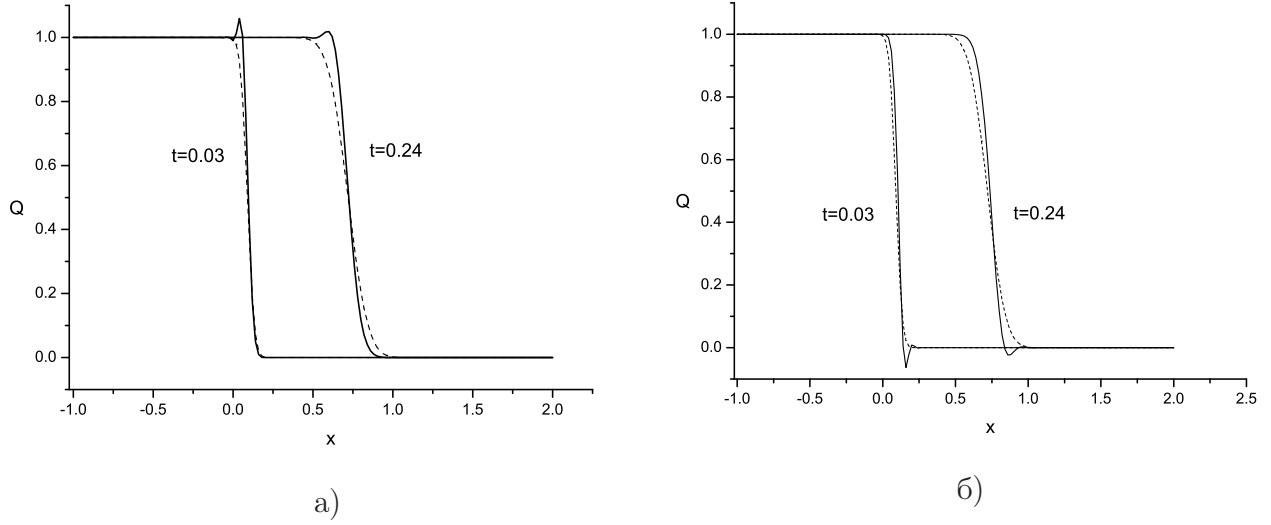


Рис. 12: Результаты расчетов по схемам (3.18) (а)) и (3.22) (б)) на моменты времени  $t = 0.03$   $t = 0.24$ . - - - - точное решение.

которого определяет диссипативные свойства алгоритма, равен  $D^* = D - 1/2uhC < D$ , поэтому разностное решение имеет более крутой фронт, чем точное.

С ростом волнового числа постепенно увеличивается разница между модулем коэффициента перехода в схеме (3.18) и (3.22). По-прежнему сеточные бегущие волны, удовлетворяющие обеим схемам, убывают медленнее, чем в дифференциальном случае, однако  $|G|$  схемы с искусственной дисперсией приближается к точному решению. Напомним, что метод дифференциального приближения не позволяет проанализировать решение в коротковолновой части спектра.

Фазовые ошибки схем (3.18) и (3.22) – противоположны (рис. 13 б)). Все сеточные бегущие волны, удовлетворяющие явной схеме с центральными разностями, отстают по фазе от соответствующего решения дифференциальной задачи (рис. 13 б), линия 1). Введение в схему направленных третьих разностей приводит к тому, что скорость движения сеточных бегущих волн становится больше, чем в дифференциальном случае. Различие в дисперсионных свойствах рассматриваемых схем проявляется в том, что в результате запаздывания по фазе ( $\frac{\phi_m}{\phi_e} < 1$ ), медленно затухающие коротковолновые колебания возникают за фронтом (12, а)), при опережении ( $\frac{\phi_m}{\phi_e} > 1$ ) – перед ним (12, б)).

Рассмотрим теперь схемы (3.18) и (3.22) второго порядка точности по времени ( $\sigma = 0.5$ ). На рис. Модуль множителя перехода и фазовая погрешность для  $D = 0.02$ ,  $u = 10$ ,  $h = 0.02$ ,  $\tau = 0.003$ , изображены на рис. 14.

Сеточные бегущие волны, удовлетворяющие разностной схеме (3.18), убывает

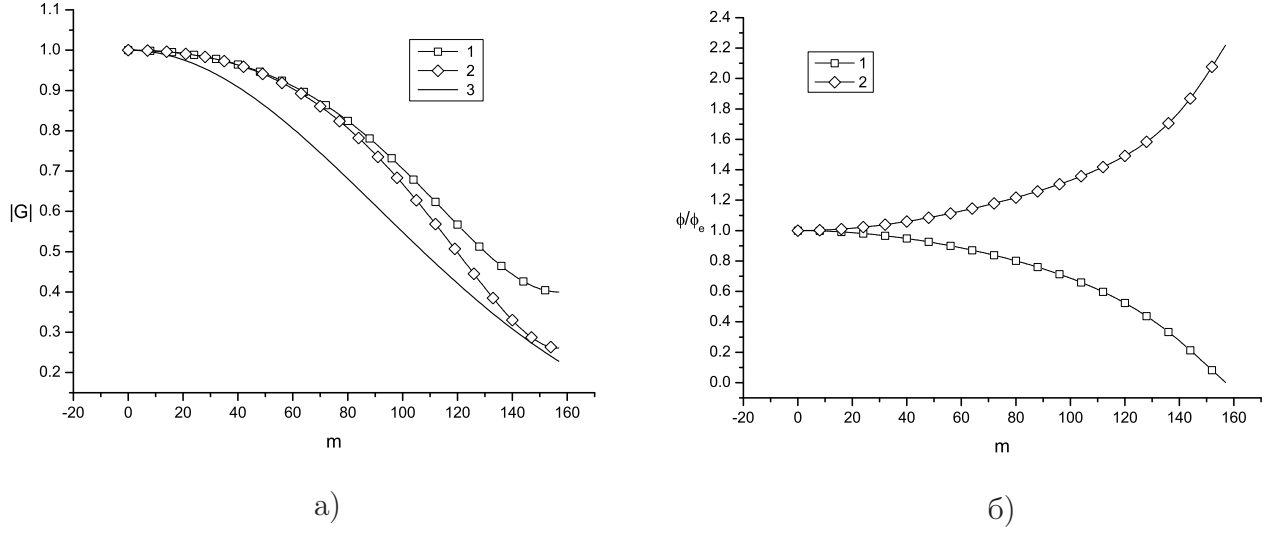


Рис. 13: Зависимость амплитуды и фазовой погрешности от волнового числа. 1 – схема  $WCD$  (3.18),  $\sigma = 1$ ; 2 – схема  $WFOU$  (3.7),  $\sigma = 1$ ; 3 – схема  $WCD$  (3.18),  $\sigma = 0$ ; 4 – схема  $WFOU$  (3.7),  $\sigma = 0$ ; 5 – точное решение.

медленнее, чем соответствующие решения дифференциальной задачи и отстают от них по фазе. Именно с этими свойствами разностного алгоритма связано возникновение "нефизических" осцилляций вслед за областью резкого изменения в решении, график которого представлен на рис.9. Включение в схему третьей направленной разности позволяет существенно улучшить диссипативные и дисперсионные свойства алгоритма. В области длинных и средних волн скорость убывания сеточного решения близка к дифференциальному случаю (линия 2 рис. 14.) Только в коротковолновой части спектра модуль множителя перехода превосходит модуль перехода точного решения, оставаясь все-таки меньше, чем у схемы (3.18). Разностная схема (3.22) ( $\sigma = 0.5$ ) обладает также хорошими дисперсионными свойствами. Заметное отставание по фазе испытывают только короткие бегущие волны (линия 2, рис. 14 б)).

На модельных примерах анализ разностных схем с помощью метода дифференциального приближения и метода Неймана позволяет выявить основные качественные характеристики вычислительного алгоритма и механизмы влияния старших членов в ошибке аппроксимации на его свойства, что играет существенную роль при выборе метода решения реальных прикладных задач.

## 4 Регуляризация разностных схем

Большинство используемых в настоящее время методов решения уравнений конвективной диффузии строятся на основе схем с центрально - разностной аппроксима-

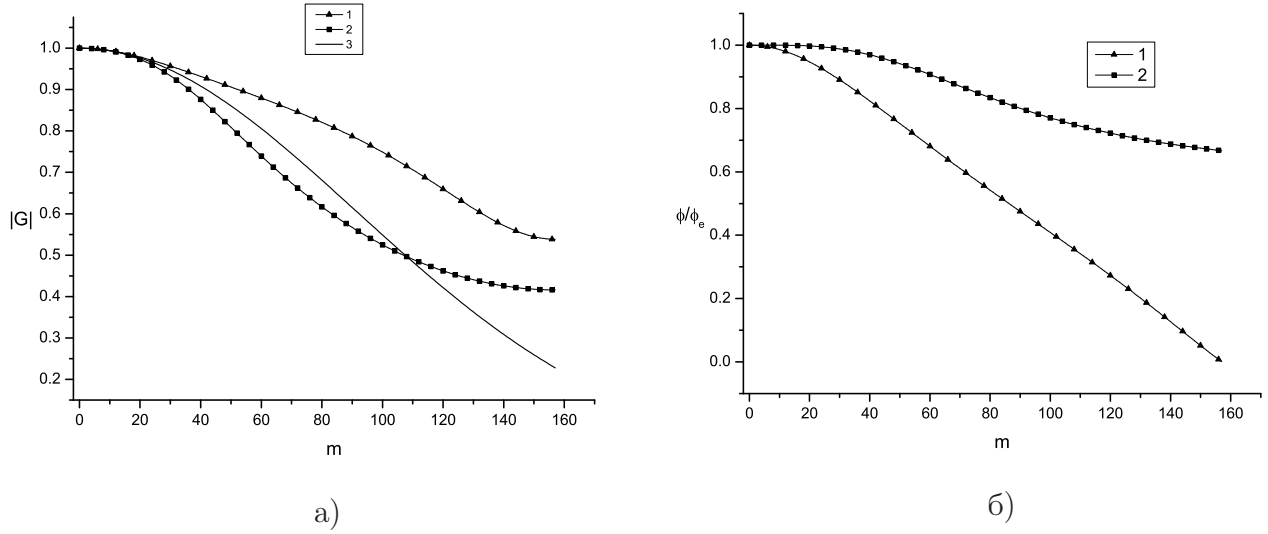


Рис. 14: Зависимость амплитуды и фазовой погрешности от волнового числа. 1 – схема  $WCD$  (3.18),  $\sigma = 0.5$ ; 2 – схема  $ATD$  (3.22),  $\sigma = 0.5$ ; 3 – точное решение.

цией конвективных членов, в которые введены дополнительные слагаемые – регуляризаторы, позволяющие управлять дисперсионными и диссипативными свойствами алгоритмов и влиять на их устойчивость.

Общие принципы регуляризации разностных схем разработаны А.А.Самарским (см., например, [1, стр.345], [31, т.1, стр.280]). В конкретных случаях построение регуляризатора проводится на основе различных идей и подходов. Отбор и оценка полученных алгоритмов также осуществляются с помощью различных критериев: выполнение принципа максимума для соответствующего сеточного оператора [32], порядок аппроксимации схемы и её шаблон [1, стр.147], [33], [34], [35], поведение корней характеристического уравнения [36] или поведение Фурье – компонент приближённого решения [13], [3, т.1 стр.373, 406], свойств матрицы разностного оператора и т.д.

Широкое распространение получили алгоритмы, в которых регуляризатор конструируется, исходя из непосредственного анализа локальных свойств решения и внутри расчетной области, в зависимости от поведения решения, происходит переключение с одной схемы на другую [15], [17], [19], [10], [18], [23], [37].

Обширный цикл исследований, посвященный регуляризации разностных схем для решения уравнений динамики вязкой несжимаемой жидкости, выполнен И.В.Фрязиновым с соавторами [38], [39], [40], [41], [42], [12]. В этих работах регуляризаторы строятся на основе третьих или четвёртых пространственных производных, имеют порядок  $O(h^2)$  или  $O(h^3)$ . Они являются знакоопределёнными операторами и обеспечивают безусловную устойчивость схем в норме  $L_2$ . Приведем примеры таких регуляризаторов.

В двумерном случае при регуляризации с помощью третьей производной к кон-

вективному потоку  $W_{i+\frac{1}{2}j} = u_{i+\frac{1}{2}j} Q_{i+\frac{1}{2}j}$  ( $i$  – номер узла сетки по координате  $x$ ,  $j$  – номер узла по второму направлению) добавляется величина

$$W_{i+\frac{1}{2}j}^{(x)} = \frac{1}{6} \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}} h_j} \{ \zeta_{i+\frac{1}{2}}^- h_{i+1} [(\zeta^- Q_x)_{i+1}]_{\hat{x}} - \zeta_{i+\frac{1}{2}}^- h_i [(\zeta^+ Q_x)_i]_{\hat{x}}, \} \quad (4.1)$$

где  $\zeta_{i+\frac{1}{2}}^\pm = h_{i+\frac{1}{2}} \sqrt{|u_{i+\frac{1}{2}}^\pm| h_j}$ . Аналогично вводится поправка к потоку по второму направлению  $W_{ij+\frac{1}{2}}^{(y)}$ .

Регуляризатор  $\mathcal{R}_{ij}^{(3)} = W_{\hat{x}}^{(x)} + W_{\hat{y}}^{(y)}$ , который возникает в результате введения поправки (4.1), имеет порядок  $O(h^2)$  и является знакоопределенным оператором, что в нестационарных задачах приводит к дополнительному затуханию решения. На равномерной сетке и при постоянной скорости схема с таким регуляризатором превращается в схему (3.22) с направленными третьими разностями, свойства которой обсуждались в п.п. 3.1, 3.2.

Ослабить высокочастотные колебания, характерные для схем с центральными разностями, можно и с помощью регуляризатора на основе четвертой пространственной производной. Он также вводится по каждому направлению независимо

$$\mathcal{R}_{ij}^{(4)} = \alpha [(\zeta_{i+\frac{1}{2}} (\hbar_i (\zeta_{i+\frac{1}{2}} Q_x)_{\hat{x}})_x)_{\hat{x}} + (\zeta_{j+\frac{1}{2}} (\hbar_j (\zeta_{j+\frac{1}{2}} Q_y)_{\hat{y}})_y)_{\hat{y}}], \quad (4.2)$$

где  $\alpha = const$ ,  $\zeta_{i+\frac{1}{2}} = h_{i+\frac{1}{2}} \sqrt{|u_{i+\frac{1}{2}}|}$ , аналогично  $\zeta_{j+\frac{1}{2}}$ .

Разностные схемы с регуляризаторами на основе третьих и четвертых пространственных производных хорошо зарекомендовали себя при решении широкого круга задач. Они обладают высокой надежностью и обеспечивают необходимую точность при естественных ограничениях на величину шагов разностной сетки по пространству. В вычислительной практике используются и другие способы монотонизации разностных схем [7], [10], [43], [44], [45]. В целом, проблема выбора регуляризатора должна решаться, исходя из специфики рассматриваемой задачи.

## Список литературы

- [1] Самарский А.А. *Теория разностных схем*. М.: Наука, 1989.
- [2] Калиткин Н.Н. *Численные методы*. М.: Наука, 1998.
- [3] Флетчер К. *Вычислительные методы в динамике жидкости*. М.: Мир, 1991. т.1. 502 с., т.2. 552 с.
- [4] Spalding D.B. A Novel Finite - Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivatives. *Int.J.Numerical Methods Eng.*, 4, 551, 1972.

- [5] Patankar S.V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1981.
- [6] G.D.Raithby, G.E.Schneider. *Handbook of Numerical Heat Transfer*, Статья: Elliptic systems: Finite-difference method II.
- [7] Самарский А.А., Вабищевич П.Н. *Вычислительная теплопередача*. УРСС, 2003.
- [8] Leonard B.P. *Computational Techniques in Transient and Turbulent Flow, Vol.2*.
- [9] Huang P.G., Launder B.E., Leschziner M.A. Discretization of non-linear convection processes: A broad-range comparison of four schemes. *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, 48, 1, 1985.
- [10] Leonard B.P., Drumond J.E. Why you should not use Hybrid, Power-Law or Related Exponential schemes for convective modelling – there are much better alternatives. *Int.J.Numerical Methods Fluids.*, 20, 421 – 442, 1995.
- [11] Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. *Вычислительная термомеханика и теплообмен*, Том 1,2. М.: Мир, 1990.
- [12] Мажорова О.С., Марченко М.П., Фрязинов И.В. Монотонизирующие регуляризаторы и матричный метод решения уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости. *Матем. моделирование.*, 6(12), 97–116, 1994.
- [13] Fromm J.E. A method for reduction dispersion in convective difference schemes. *J. Comput. Phys.*, 3, 176, 1968.
- [14] Мажорова О.С., Попов Ю.П., Похилко В.И. *Разностная схема с искусственной дисперсией для уравнений параболического типа*, препринт Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, – Москва., 1986, № 142, 19 стр.
- [15] Leonard B.P. Simple high-accuracy resolution program for convective modeling of discontinuities. *Int.J.Numerical Methods Fluids.*, 8, 901–927, 1988.
- [16] Роуч П. *Вычислительная гидродинамика*. М.: Мир, 1980.
- [17] Leonard B.P., Mokhtari S. Beyond First-order Upwinding: the ultra-sharp alternative for non-oscillatory steady-state simulation of the convection. *Int.J.Numerical Methods Eng.*, 30, 729 – 766, 1990.
- [18] Gaskell P.H., Lau A.K.C. Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm. *Int.J.Numerical Methods Fluids.*, 8, 617–641, 1988.
- [19] Leonard B.P., Niknafs H.S. Sharp monotonic resolution of discontinuities without clipping of narrow extrema. *Computers & Fluids*, 1, 141 – 154, 1991.

- [20] Ермаков С.В., Мажорова О.С., Попов Ю.П. Математическое моделирование задач электрофоретического разделения биосмесей. *Ч.І. Дифференц. уравн.*, 28, 1810 – 1821, 1992.
- [21] Hayase T., Humphrey J.A., Greif R. A consistently formulated QUICK scheme for fast and stable convergence using finite-volume iterative calculation procedures. *J. Comput. Phys.*, 98, 108 – 118, 1992.
- [22] Papadakis G., Bergeles G. A locally modified second order upwind scheme for convection term discretized. *Int.J.Numer.Methods Heat Fluid Flow*, 5, 49 – 62, 1995.
- [23] Varonos A., Bergeles G. Developoment and Assessment of Variable-Order Non-Oscilatory Scheme for Convection Term Discretization. *Int.J.Numerical Methods Fluids.*, 26, 1 – 16, 1998.
- [24] Pascau A., Perez C. A well-behaved scheme to model strong convection in general transport equations. *Numer.Methods Lam.Turb.Flows*, 8, 608 – 617, 1992.
- [25] Тихонов А.Н., Самарский А.А. *Уравнения математической физики*. М.: Наука, 1972. 735.
- [26] Шокин Ю.И., Яненко Н.Н. О корректности первых дифференциальных приближений разностных схем. *ДАН СССР*, 182, 776–778, 1968.
- [27] Шокин Ю.И., Яненко Н.Н. *Метод дифференциального приближения. Применение к газовой динамике*. М.: Наука, 1985. 364.
- [28] Warming R.F., Hyett B.J. The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite – difference methods. *J. Comput. Phys.*, 14, 159–179, 1974.
- [29] Самарский А.А., Гулин А.В. *Теория устойчивости разностных схем*. М.: Наука, 19?? 4??
- [30] Годунов С.К., Рябенкий В.С. *Разностные схемы*. М.: Наука, 1973. 400.
- [31] Samarskii A.A., Vabishchevich P.N. *Computational Heat Transfer. Vol.1., Vol.2. Mathematical Modelling*. J.Wiley Sons, 1995.
- [32] Вабищевич П.Н. Монотонные разностные схемы для задач конвекции/диффузии. *Дифференц. уравн.*, 30(3), 503–514, 1994.
- [33] Leonard B.P. *Handbook of Numerical Heat Transfer*, , Статья: Elliptic systems: Finite difference methods IV, стр. 347–378. Wiley New York, 1988.
- [34] MacKinnon R.J., Carey G.F. Analysis of Material interface discontinuities and superconvergent fluxes in finite difference theory. *J. Comput. Phys.*, 75(1), 151–167, 1988.



- [35] Dennis S.C.R., Hudson J.D. Compact  $h^4$  finite – difference approximation to operators of Navier – Stokes type. *J. Comput. Phys.*, 85(2), 390–417, 1989.
- [36] Дегтярев Л.М., Дроздов В.В., Иванова Т.С. Метод адаптивных к решению сеток в сингулярно – возмущённых одномерных краевых задачах. *Дифференц. уравн.*, 23(7), 1160 – 1168, 1987.
- [37] Sabau A.S., Raad P.E. Comparison of compact and classical finite difference solution of stiff problems on nonuniform grids. *Computers & Fluids*, 28, 361 – 384, 1999.
- [38] Гончаров А.Л., Фрязинов И.В. *О построении монотонных разностных схем для уравнений Навье – Стокса на девятиточечных шаблонах*, препринт Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, – Москва., 1986, № 93. 14 с.
- [39] Гончаров А.Л., Фрязинов И.В. Сеточный метод решения трёхмерных уравнений Навье – Стокса в параллелепипеде. *Дифференц. уравн.*, 27(7), 1137–1144, 1991.
- [40] Гончаров А.Л., Фрязинов И.В. *Разностные схемы на девятиточечных шаблонах крест для уравнений Навье-Стокса в переменных скорость-давление*, препринт Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, – Москва., 1986, № 53.
- [41] Гончаров А.Л., Фрязинов И.В. Разностные схемы на девятиточечном шаблоне „крест“ для решения уравнений Навье-Стокса. *Ж. Вычисл. Матем и мат. физики*, 28, 867–878, 1988.
- [42] Гончаров А.Л., Фрязинов И.В. Об одном сеточном методе решения уравнений Навье – Стокса в переменных вихрь – функция тока. *Дифференц. уравн.*, 21(7), 1269–1272, 1985.
- [43] Rubin S.G., Khosla P.K. Navier – Stokes calculation with a coupled strongly implicit method. *Computers & Fluids*, 9, 163–180, 1981.
- [44] Бакирова М.И., Старшинова И.В., Фрязинов И.В. Консервативные монотонные разностные схемы для уравнений Навье – Стокса. *Дифференц. уравн.*, 18(7), 1144–1150, 1982.
- [45] Гончаров А.Л., Фрязинов И.В. *Сеточный метод решения уравнений с локальной искусственной вязкостью*, препринт Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, – Москва., 1986, № 46. 23 с.