Разностные схемы для уравнения конвективной диффузии

О.С.Мажорова

Сентябрь 2020 г.

Введение

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial (uQ)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial Q}{\partial x}\right), \quad t > 0, \quad x \in [-L, L] \qquad (1)$$

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.

$$\text{Число Пекле } Pe = \frac{uL}{D}$$

$Pe \ll 1$ почти уравнение теплопроводности

$Pe \gg 1$ почти уравнение переноса

Обозначения

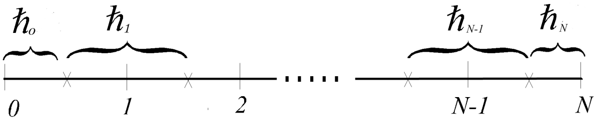
Рассмотрим одномерное стационарное уравнение конвективной диффузии

$$\frac{d(uQ)}{dx} - \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial Q}{\partial x}\right) = 0 \quad x \in [0,1], \qquad (2)$$

Разностная сетка $\Omega_h = \{x_i, i = 0, 1, \dots N, x_0 = 0, x_N = 1\}$.

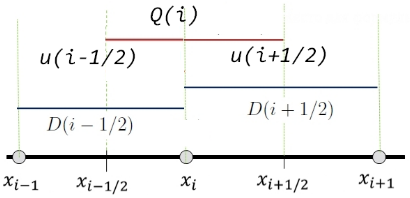
Потоковые точки $x_{i+\frac{1}{2}} = \dfrac{x_{i+1} + x_i}{2}$.

Шаги сетки $h_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+1} - x_i$, $\hbar_i = \dfrac{h_{i+\frac{1}{2}} + h_{i-\frac{1}{2}}}{2}$,



Обозначения

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



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: $Q_{\hat{x}} = \dfrac{Q_{i+\frac{1}{2}} - Q_{i-\frac{1}{2}}}{\hbar_i}$.

Построение разностной схемы

Проинтегрируем уравнение (2) по отрезку $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$.

$$\int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d}{dx}\left[uQ - D_{i+\frac{1}{2}}\frac{dQ}{dx}\right] dx = W^{tot}_{i+\frac{1}{2}} - W^{tot}_{i-\frac{1}{2}} = 0; \qquad (3)$$

$$W^{tot}_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}}Q_{i+\frac{1}{2}} + W^{D}_{i+\frac{1}{2}}$$

$u_{i+\frac{1}{2}}Q_{i+\frac{1}{2}} = W^{con}_{i+\frac{1}{2}} \sim W = uQ$ конвективный поток

$-D_{i+\frac{1}{2}}Q_x = W^{D}_{i+\frac{1}{2}} \sim W^D = -D_{i+\frac{1}{2}}\dfrac{dQ}{dx}$ диффузионный поток

Поделив (3) на $\hbar_i$, получим

$$\underline{\left(u_{i+\frac{1}{2}}Q_{i+\frac{1}{2}}\right)_{\hat{x}} - (DQ_x)_{\hat{x}} = 0} \qquad (4)$$

Интерполяция в потоковую точку

$$Q_{i+\frac{1}{2}} = \theta_{i+\frac{1}{2}} Q_i + (1 - \theta_{i+\frac{1}{2}}) Q_{i+1} \tag{5}$$

$$\theta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad W_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}} Q_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}} \frac{Q_{i+1} + Q_i}{2}$$

$$\left(u_{i+\frac{1}{2}} \frac{Q_{i+1} + Q_i}{2} \right)_{\hat{x}} - (DQ_x)_{\hat{x}} = 0 \tag{6}$$

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

$$uQ_{\overset{\circ}{x}} - DQ_{x\bar{x}} = 0 \tag{7}$$

Интерполяция в потоковую точку

$$\theta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{|u_{i+\frac{1}{2}}|}{u_{i+\frac{1}{2}}}\right) \quad \Rightarrow \quad W_{i+\frac{1}{2}} = (u^+_{i+\frac{1}{2}} Q_i + u^-_{i+\frac{1}{2}} Q_{i+1})$$

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

$$\left(u^+_{i+\frac{1}{2}} Q_i + u^-_{i+\frac{1}{2}} Q_{i+1}\right)_{\hat{x}} - DC_{x\hat{x}} = 0, \tag{8}$$

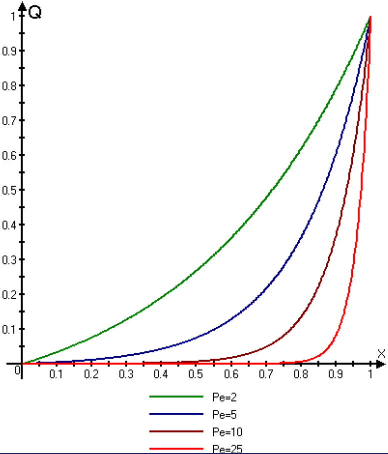
(8) – схема с направленными разностями
Пусть $u = const > 0, \quad h = const$, тогда

$$uQ_{\bar{x}} - DQ_{\bar{x}x} = 0$$

Решение дифференциальной задачи

Дифференциальная задача

$$\frac{d(uQ)}{dx} - D\frac{d^2Q}{dx^2} = 0, \;\; Q(0) = 0, \;\; Q(1) = 1, \;\; u = const > 0. \quad (9)$$



Решение задачи

$$Q(x) = \frac{(1 - e^{ux/D})}{(1 - e^{u/D})}$$

Решение разностной задачи. Центральные разности (CEND).

Рассмотрим разностную аппроксимацию уравнения (9) на равномерной сетке $\{x_i = ih, i = 0, \dots N, h = 1/N\}$.
Схема с центральными разностями:

$$u\frac{Q_{i+1} - Q_{i-1}}{2h} - D\frac{Q_{i+1} - 2Q_i + Q_{i-1}}{h^2} \quad i = 1, \dots, N-1$$

$$Q_0 = 0; \quad Q_N = 1$$

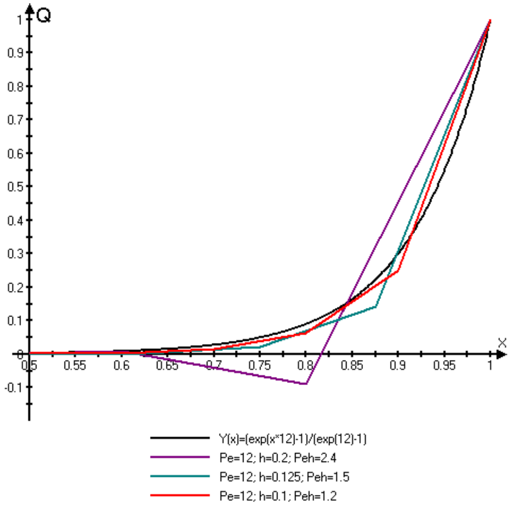
Ищем решение в виде $Q = a + bq^i$.
После несложных вычислений (*проведите их, пожалуйста*) получим

$$Q(i) = \frac{1 - q^i}{1 - q^N}, \ i = 0, \dots, N, \quad \text{где } q = \frac{1 + P_h/2}{1 - P_h/2} \tag{10}$$

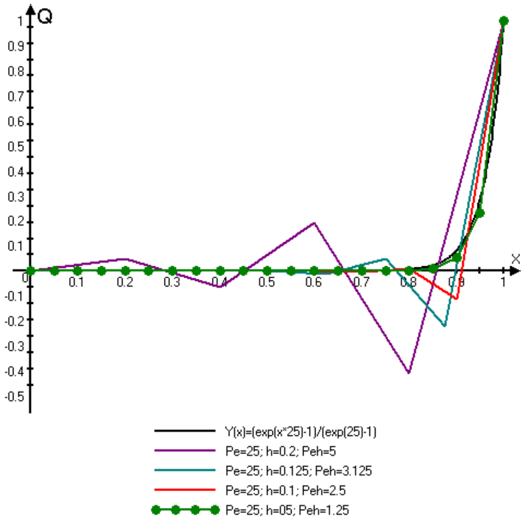
Сеточное число Рекле

$$P_h = \frac{uh}{D}$$

Результаты расчетов $Pe = 12$. Центральные разности



Результаты расчетов $Pe = 25$. Центральные разности.



Сеточное число Пекле P_h

Учитывая, что $x = hi$, решение дифференциальной задачи можно записать в виде

$$Q(x) = \frac{(1 - e^{ux/D})}{(1 - e^{u/D})} = \frac{1 - e^{P_h i}}{1 - e^{P_h N}} = \frac{1 - \bar{q}^i}{1 - \bar{q}^N},$$

где $\bar{q} = e^{P_h} = 1 + P_h + \dfrac{P_h^2}{2} + \dots$

В разностном случае $q = \dfrac{1 + P_h/2}{1 - P_h/2} =$

$$= (1 + P_h/2)(1 + \frac{1}{2}P_h + \frac{1}{4}P_h^2 \dots) = 1 + P_h + \frac{P_h^2}{2} + \dots$$

Разложение справедливо, если

$$P_h < 2$$

Решение разностной задачи. Направленные разности (UPWD).

Схема с направленными разностями:

$$u\frac{Q_i - Q_{i-1}}{h} - D\frac{Q_{i+1} - 2Q_i + Q_{i-1}}{h^2} = 0 \quad i = 1, \ldots, N-1$$

$$Q_0 = 0; \quad Q_N = 1$$

Решение

$$Q(i) = \frac{1-q^i}{1-q^N}, \ i = 0, \ldots, N, \quad \text{где } q = 1 + P_h$$

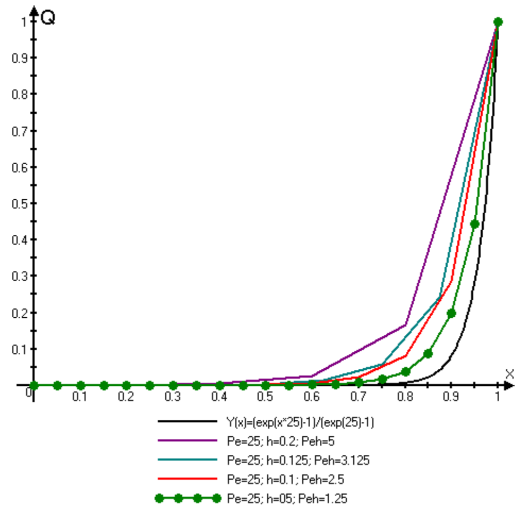
Центральные разности. Диагональное преобладание при $P_h < 2$.

$$-(1 + \frac{1}{2}P_h)Q_{i-1} + 2Q_i - (1 - \frac{1}{2}P_h)Q_{i+1} = 0,$$

Направленные разности. Диагональное преобладание при любых P_h. Для точности должно быть $P_h \ll 2$.

$$-(1 + P_h)Q_{i-1} + (2 + P_h)Q_i - Q_{i+1} = 0,$$

Результаты расчетов $Pe = 25$. Направленные разности.



Схемная диффузия

Схема с направленными разностями имеет первый порядок аппроксимации. С точностью до $O(h^2)$ она аппроксимирует уравнение

$$u\frac{dQ}{dx} - D(1 + \frac{1}{2}P_h)\frac{d^2Q}{dx^2} = 0, \tag{11}$$

которое описывает процесс конвективной диффузии в среде с коэффициентом диффузии $D^* = D(1 + \dfrac{1}{2}P_h)$. Для получения приемлемой точности необходимо, чтобы $P_h \ll 2$. Это ограничение еще более жесткое, чем условие отсутствия осцилляций в схеме с центральными разностями. Для достижения одинаковой точности схема UPWD требует использования примерно в 10 раз более мелкого шага, чем схема CEND.

Схема А.А.Самарского

$$u^+ Q_{\bar{x}} + u^- Q_x - \frac{D}{1 + |P_h|/2}\, Q_{x\bar{x}} = 0, \qquad (12)$$

В этой схеме конвективный член аппроксимируется с помощью направленных разностей первого порядка, а коэффициент диффузии D заменяется на $\widetilde{D} = D\left(1 - \dfrac{|P_h|/2}{1 + |P_h|/2}\right)$. Таким образом схема (12) содержит антидиффузию с коэффициентом, зависящим от сеточного числа Пекле.

Задачи.

1. Доказать, что схема (12) имеет второй порядок точности.
2. Как в схеме (12) осуществляется интерполяция в потоковую точку?
3. Доказать монотонность схемы (12).

Эффективное число Пекле

Учитывая, что $u^+Q_{\bar{x}} + u^-Q_x = uQ_{\overset{\circ}{x}} - \frac{|u|h}{2}Q_{x\bar{x}}$, перепишем (12) в виде

$$uQ_{\overset{\circ}{x}} - \underbrace{D\left(1 + \frac{|P_h|^2/4}{1+|P_h|/2}\right)}_{D^\star} Q_{x\bar{x}} = 0. \qquad (13)$$

Схема (12)– это схема с центральными разностями, в которую введен регуляризатор – дополнительный диффузионный член порядка $O(h^2)$, обеспечивающий монотонность.

Эффективное сеточное число Пекле

$$P_h^\star = \frac{uh}{D^\star}$$

Эффективное число Пекле в схеме А.А.Самарского

$$\lim_{P_h \to \infty} P_h^{\star} = \lim_{P_h \to \infty} \frac{P_h(1 + P_h/2)}{1 + P_h/2 + P_h^2/4} = 2$$

Задача

Сравнить эффективное число Пекле в схеме А.А.Самарского и в схеме с направленными разностями. Какая схема лучше при больших значениях P_h?

Экспоненциальная схема

Для вычисления потоков в полуцелых точках используется точное решение дифференциальной задачи (2).
На отрезке $[x_i, x_{i+1}]$, где $u = u_{i+\frac{1}{2}} = const$,

$$Q(x) = Q_i + (Q_{i+1} - Q_i)\frac{\exp\left(P_{h,i+\frac{1}{2}}\dfrac{x - x_i}{h_{i+\frac{1}{2}}}\right) - 1}{\exp\left(P_{h,i+\frac{1}{2}}\right) - 1} \qquad (14)$$

Поток в центре разностной ячейки:

$$W^{tot}_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}} Q(x_{i+\frac{1}{2}}) - D\frac{dQ}{dx}\bigg|_{x=x_{i+\frac{1}{2}}} = u_{i+\frac{1}{2}} Q_i +$$

$$u_{i+\frac{1}{2}}(Q_{i+1} - Q_i)\frac{e^{(P_{h,i+\frac{1}{2}}/2)} - 1}{e^{(P_{h,i+\frac{1}{2}})} - 1} - u_{i+\frac{1}{2}}(Q_{i+1} - Q_i)\frac{e^{(P_{h,i+\frac{1}{2}}/2)}}{e^{(P_{h,i+\frac{1}{2}})} - 1}$$

Экспоненциальная схема на равномерной сетке

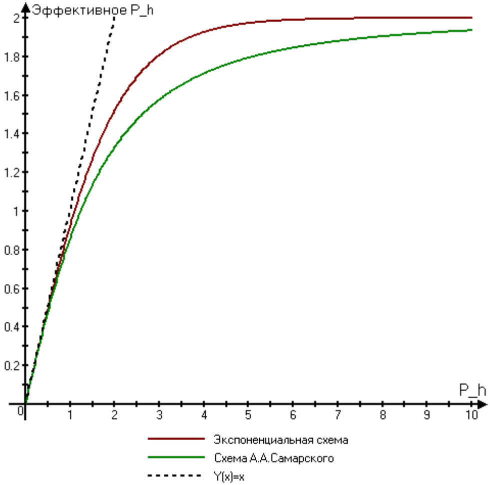
Запишем экспоненциальную схему на равномерной сетке для $u = const$.

$$\frac{W^{tot}_{i+\frac{1}{2}} - W^{tot}_{i-\frac{1}{2}}}{h} = uQ_{\bar{x}} + \underbrace{\left(uh\frac{e^{P_h/2}-1}{e^{P_h}-1} - uh\frac{e^{P_h/2}}{e^{P_h}-1} \right)}_{D\frac{P_h}{e^{P_h}-1}} Q_{\bar{x}x} = 0 \quad \text{или}$$

$$uQ_{\overset{\circ}{x}} - D^* Q_{\bar{x}x} = 0, \text{ где } D^* = D\left(\frac{P_h}{2}\frac{e^{P_h}+1}{e^{P_h}-1}\right) = D\frac{P_h}{2}\coth\left(\frac{P_h}{2}\right) \tag{15}$$

Задача

Доказать, что экспоненциальная схема монотонна и имеет второй порядок точности.



При малых P_h

$P_h^* \sim P_h, \Rightarrow D^\star = D$

При больших P_h

$P_h^* \to 2 \Rightarrow D^\star = uh/2$

При $P_h > 2$ схемы (12) и (15) превращаются в схемы с аппроксимацией конвективных членов направленными разностями.