

Задача без смешанной производной второго шага. Постановка граничных условий в околополюсных точках.

Рассматривается уравнение, решаемое на втором шаге расщепления, без учёта смешанной производной:

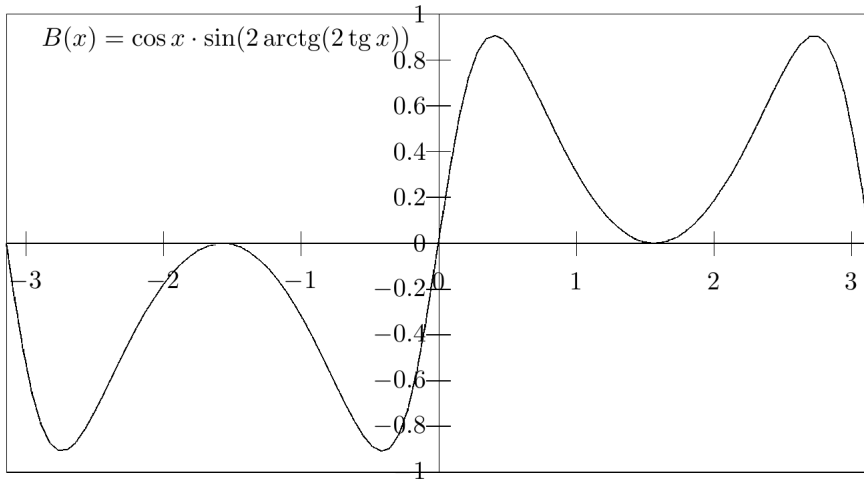
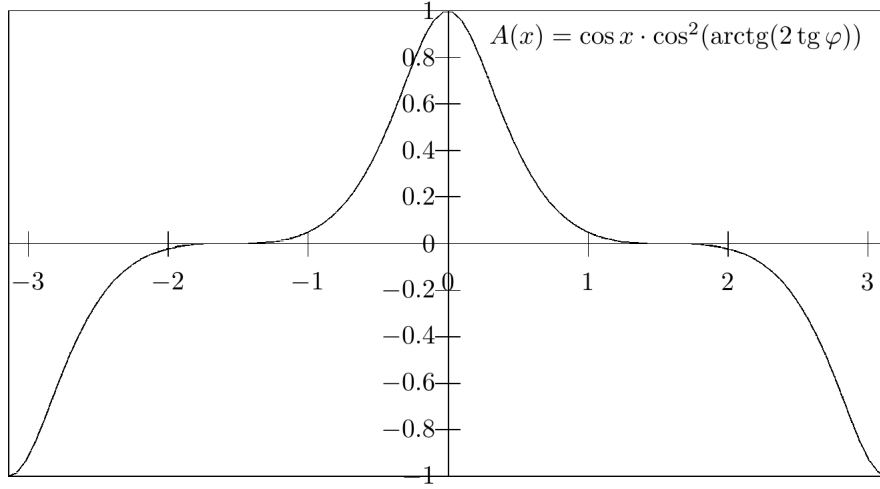
$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\frac{D}{a} \cdot (\cos^2 I \cos \varphi) \cdot \frac{\partial n}{\partial \varphi} - u \cdot (\sin I \cos I \cos \varphi) \cdot n \right] = \frac{1}{\cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\frac{D}{a^2} A(\varphi) \frac{\partial n}{\partial \varphi} - \frac{u}{2a} B(\varphi) n \right].$$

В этом уравнении $I = \arctg(2 \operatorname{tg} \varphi)$, а функции $A(\varphi)$ и $B(\varphi)$ определены выражениями:

$$A(\varphi) = \cos \varphi \cdot \cos^2(\arctg(2 \operatorname{tg} \varphi)) = \frac{\cos \varphi}{1 + 4 \operatorname{tg}^2 \varphi} \text{ и } B(\varphi) = \cos \varphi \cdot \sin(2 \arctg(2 \operatorname{tg} \varphi)) = \frac{4 \sin \varphi}{1 + 4 \operatorname{tg}^2 \varphi}.$$

Необходимо аппроксимировать уравнение в околополюсных точках на сетке по переменной φ : узлы имеют номера от 1 до $N_\varphi = 180$, $j = 1$ соответствует $\varphi = -89,5^\circ$, а $j = N_\varphi$ соответствует $\varphi = +89,5^\circ$. Общая формула для узлов: $\varphi_j = -90^\circ + (j - 0,5) \cdot 1^\circ$.

Графики функций A и B приведены ниже:



Имеют место следующие разложения при $\varphi \rightarrow \frac{\pi}{2}$:

$$A(\varphi) = -\frac{1}{4} \cdot \left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right)^3 - \frac{1}{16} \cdot \left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right)^5 + o\left(\left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right)^6\right); B(\varphi) = 1 \cdot \left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right)^2 - \frac{1}{12} \cdot \left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right)^4 + o\left(\left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right)^5\right)$$

Соответственно, при $x \rightarrow -\frac{\pi}{2}$:

$$A(\varphi) = \frac{1}{4} \cdot \left(\varphi + \frac{\pi}{2}\right)^3 + \frac{1}{16} \cdot \left(\varphi + \frac{\pi}{2}\right)^5 + o\left(\left(\varphi + \frac{\pi}{2}\right)^6\right); B(\varphi) = -1 \cdot \left(\varphi + \frac{\pi}{2}\right)^2 + \frac{1}{12} \cdot \left(\varphi + \frac{\pi}{2}\right)^4 + o\left(\left(\varphi + \frac{\pi}{2}\right)^5\right)$$

Для уравнения используем следующую схему:

$$\frac{n_{i,j}^{t+1} - n_{i,j}^t}{\tau} = \frac{1}{\cos \varphi_j} \left[\frac{D}{a^2} \left(A(\varphi_{j+1/2}) \frac{n_{i,j+1}^{t+1} - n_{i,j}^{t+1}}{\Delta \varphi^2} - A(\varphi_{j-1/2}) \frac{n_{i,j}^{t+1} - n_{i,j-1}^{t+1}}{\Delta \varphi^2} \right) - \frac{u}{2a} \left(\frac{B(\varphi_{j+1})n_{i,j+1}^{t+1} - B(\varphi_{j-1})n_{i,j-1}^{t+1}}{2\Delta \varphi} \right) \right]$$

Рассмотрим границу $j = 1$, соответствующую южному полюсу и узлу $\varphi_j = -89,5^\circ$. В этой точке поставим следующее условие: полный поток в разностной схеме равен нулю. Это означает, что

$$\left[\frac{D}{a^2} \left(A(\varphi_{j-1/2}) \frac{n_{i,j}^{t+1} - n_{i,j-1}^{t+1}}{\Delta \varphi^2} \right) - \frac{u}{2a} \left(\frac{B(\varphi_{j-1})n_{i,j-1}^{t+1} + B(\varphi_j)n_{i,j}^{t+1}}{2\Delta \varphi} \right) \right] = 0$$

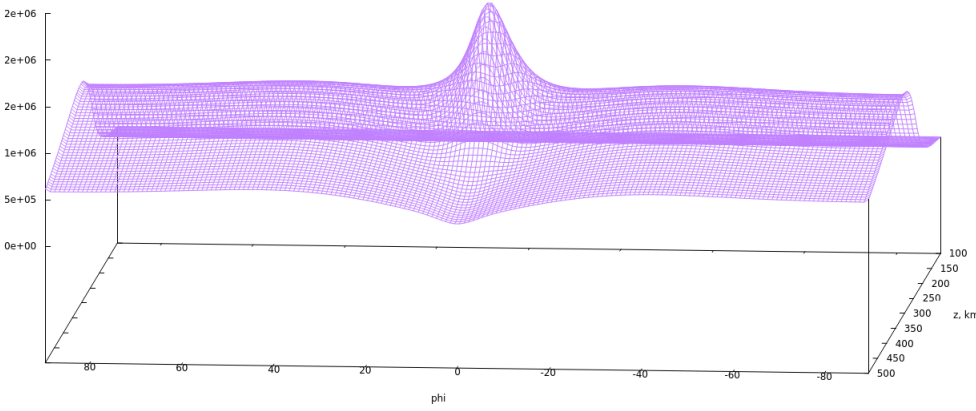
В этом случае решается уравнение

$$\frac{n_{i,j}^{t+1} - n_{i,j}^t}{\tau} = \frac{1}{\cos \varphi_j} \left[\frac{D}{a^2} \left(A(\varphi_{j+1/2}) \frac{n_{i,j+1}^{t+1} - n_{i,j}^{t+1}}{\Delta \varphi^2} \right) - \frac{u}{2a} \left(\frac{B(\varphi_{j+1})n_{i,j+1}^{t+1} + B(\varphi_j)n_{i,j}^{t+1}}{2\Delta \varphi} \right) \right]$$

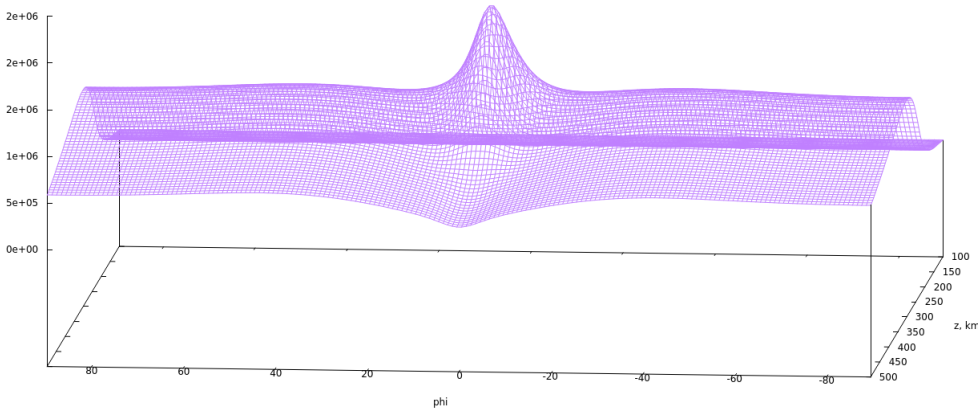
Заметим, что в отличие от значения функции A в полуполном узле, выражение $\frac{B(\varphi_{j-1})n_{i,j-1}^{t+1} + B(\varphi_j)n_{i,j}^{t+1}}{2\Delta \varphi}$ не равно нулю в точности: подстановка значений B с учётом приведенной выше асимптотики даёт

$$\frac{B(\varphi_{j-1})n_{i,j-1}^{t+1} + B(\varphi_j)n_{i,j}^{t+1}}{2\Delta \varphi \cos \varphi} \approx \frac{n}{2\Delta \varphi^2} \left[\left(\frac{\pi}{2} + \frac{\Delta \varphi}{2} - \frac{\pi}{2} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\Delta \varphi}{2} - \frac{\pi}{2} \right)^2 \right] \approx \frac{n}{4}$$

Эта константа не зависит от $\Delta \varphi$, что приводит к «скачкам» в околуполусных точках, что иллюстрируется следующим графиком:



Заменим граничное условие: по-прежнему зануляем $A(\varphi_{j-1/2})$, но вместо обнуления компоненты потока, связанной с дивергентным членом, заметим, что точки $-89,5^\circ$ и $-90,5^\circ$ симметричны, поэтому можно положить требуемое $B(\varphi_{j-1})n_{j-1}$ равным $B(\varphi_j)n_j$. После такой замены получим следующую картину:



Аппроксимации смешанной производной и граничные условия.

Рассмотрим различные аппроксимации для смешанной производной, а также граничные условия в околополюсных точках в уравнении

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\frac{D}{a} \cdot (\cos^2 I \cos \varphi) \cdot \frac{\partial n}{\partial \varphi} - D \cdot (\sin I \cos I \cos \varphi) \cdot \frac{\partial n}{\partial z} - u \cdot (\sin I \cos I \cos \varphi) \cdot n \right] = \\ &= \frac{1}{\cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\frac{D}{a^2} A(\varphi) \frac{\partial n}{\partial \varphi} - \frac{D}{2a} B(\varphi) \frac{\partial n}{\partial z} - \frac{u}{2a} B(\varphi) n \right].\end{aligned}$$

I. Нелинейная схема. Вводим эффективную скорость $u_z = B(\varphi) \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial z} = B(\varphi) \frac{\partial \ln n}{\partial z}$. При численном моделировании полагаем

$$u_{z(i,j)} \approx B(\varphi) \frac{2}{n_{i+1,j}^t + n_{i-1,j}^t} \begin{cases} \frac{n_{i+1,j}^t - n_{i,j}^t}{h}, B(\varphi) \geq 0 \\ \frac{n_{i,j}^t - n_{i-1,j}^t}{h}, B(\varphi) \leq 0. \end{cases}$$

После вычисления $u_{z(i,j)}$ в узле (i,j) по значениям n^t с предыдущего временного шага t в зависимости от знака $u_{z(i,j)}$ аппроксимируется смешанная производная:

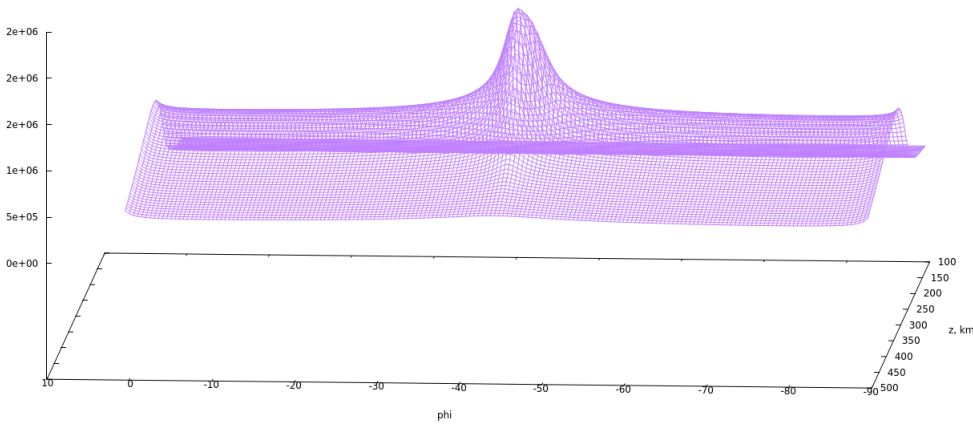
$$-\frac{D}{2a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} [u_z n] \approx \begin{cases} -\frac{D}{2a \cos \varphi_j} \frac{u_{z(i,j+1)} n_{i,j+1}^{t+1} - u_{z(i,j)} n_{i,j}^{t+1}}{\Delta \varphi}, u_{z(i,j)} \geq 0 \\ -\frac{D}{2a \cos \varphi_j} \frac{u_{z(i,j)} n_{i,j}^{t+1} - u_{z(i,j-1)} n_{i,j-1}^{t+1}}{\Delta \varphi}, u_{z(i,j)} \leq 0. \end{cases}$$

В околополюсных точках $j = 1$ и $j = N_\varphi$ для исключения требуемых в расчете значений вне сетки используем свойства функций A и B :

$j = 1$. В этом случае $A\left(\varphi - \frac{\Delta \varphi}{2}\right) = 0$ в точности. Заметим далее, что значение $B(\varphi - \Delta \varphi) n_{i,j-1}$ совпадает с $B(\varphi) n_{i,j}$, эти точки симметричны относительно вертикальной оси. Такое замечание справедливо, когда рассматривается стационарная задача, отвечающая дневному значению фотоионизации и рекомбинации. Для смешанной производной используем тот же приём: в тех случаях, когда требуется вычислить $u_{z(i,j-1)} n_{i,j-1}$, это значение заменяется на равное ему $u_{z(i,j)} n_{i,j}$.

$j = N_\varphi$. Аналогично, $A\left(\varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}\right) = 0$, а $B(\varphi + \Delta \varphi) n_{i,j+1}$ и $u_{z(i,j+1)} n_{i,j+1}$ заменяются соответственно на $B(\varphi) n_{i,j}$ и $u_{z(i,j)} n_{i,j}$.

Результаты расчетов показывают, что имеет место несогласованность такой аппроксимации: возникают ложные источники на границах, похожие на наблюдаемые в схеме без смешанной производной при попытке аппроксимировать полный поток в околополюсной точке нулём.



II. Линейные схемы первого порядка. Для смешанной производной $-\frac{D}{2a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(B(\varphi) \frac{\partial n}{\partial z} \right)$ можно рассмотреть следующие четыре аппроксимации (здесь $B_j \equiv B(\varphi_j)$):

$$-\frac{D}{2a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(B(\varphi) \frac{\partial n}{\partial z} \right) \approx -\frac{D}{2ah\Delta\varphi \cos \varphi_j} \begin{cases} B_{j+1}n_{i,j+1}^{t+1} - B_jn_{i,j}^{t+1} - B_{j+1}n_{i-1,j+1}^t + B_jn_{i-1,j}^t, & \text{справедливо при } B(\varphi_j) < 0, \text{ схема (1);} \\ B_{j+1}n_{i+1,j+1}^t - B_jn_{i+1,j}^t - B_{j+1}n_{i,j+1}^{t+1} + B_jn_{i,j}^{t+1}, & \text{справедливо при } B(\varphi_j) > 0, \text{ схема (2);} \\ B_jn_{i,j}^{t+1} - B_{j-1}n_{i,j-1}^{t+1} - B_jn_{i-1,j}^t + B_{j-1}n_{i-1,j-1}^t, & \text{справедливо при } B(\varphi_j) > 0, \text{ схема (3);} \\ B_{j+1}n_{i+1,j+1}^t - B_jn_{i+1,j}^t - B_{j+1}n_{i,j+1}^{t+1} + B_jn_{i,j}^{t+1}, & \text{справедливо при } B(\varphi_j) < 0, \text{ схема (4).} \end{cases}$$

Первый вариант схемы первого порядка: при $B(\varphi) \geq 0$ (т. е. в верхнем полушарии) вычисление ведется по формуле (3), а в нижнем полушарии, при $B(\varphi) \leq 0$, соответственно, по формуле (1).

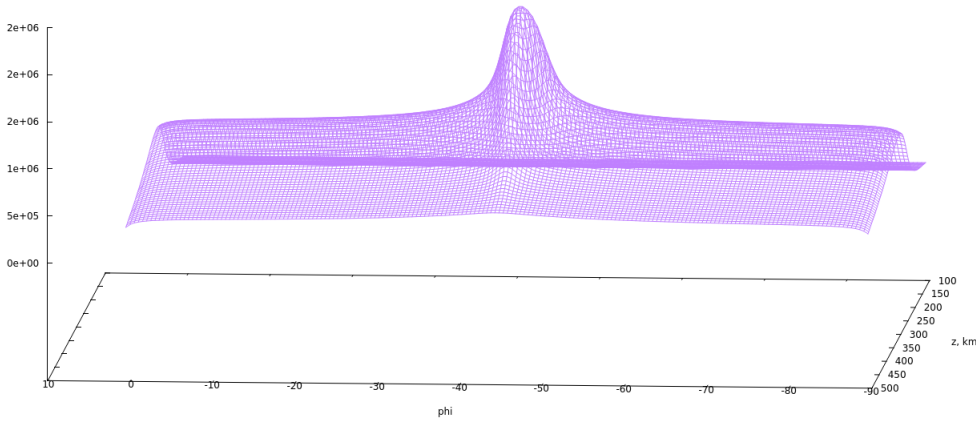
При этом оказывается, что на полюсах разности направлены так, что для вычисления следующего временного слоя не требуется информации о точках вне расчетной области на предыдущем шаге. Поэтому граничные условия в околополюсных точках достаточно применить для слагаемых, отвечающих диффузии и переносу: используются те же условия, что и в предыдущей схеме: на южном полюсе $A\left(\varphi - \frac{\Delta\varphi}{2}\right) = 0$, а $B(\varphi - \Delta\varphi)n_{i,j-1}$ заменяется на $B(\varphi)n_{i,j}$. На северном полюсе условия аналогичны.

Второй вариант схемы первого порядка: при $B(\varphi) \geq 0$ (т. е. в верхнем полушарии) вычисление ведется по формуле (2), а в нижнем полушарии, при $B(\varphi) \leq 0$, соответственно, по формуле (4).

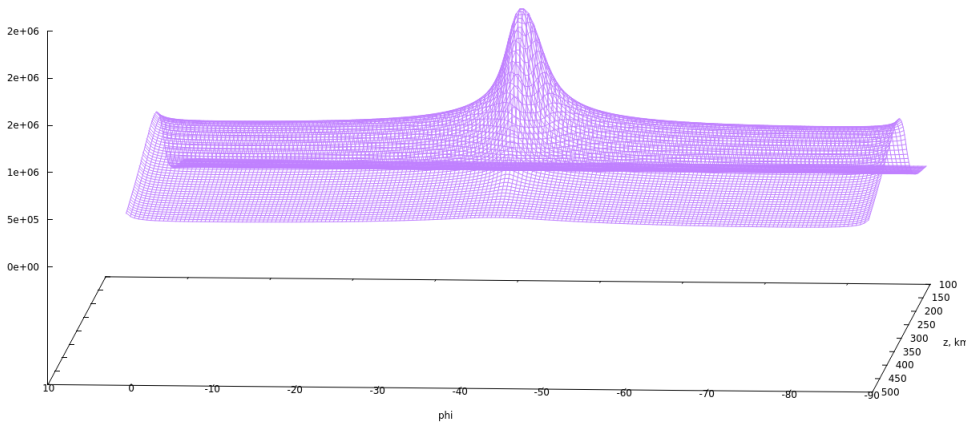
Граничные условия в околополюсных точках для слагаемых, отвечающих диффузии и переносу те же условия, что и в предыдущей схеме. В этой схеме требуются также и значения вне расчетной области для вычисления смешанных производных. Применяем тот же метод: при необходимости вычислить $B_{j+1}n_{i,j+1}$ на северном полюсе заменяем это слагаемое на $B_jn_{i,j}$.

Оба варианта вновь показывают несогласованную аппроксимацию вблизи полюсов:

Результаты расчета по первому варианту схемы:



Результаты расчета по второму варианту схемы:



III. Линейная схема второго порядка. Для получения такой схемы используем аппроксимации, рассмотренные в предыдущем пункте: если $B(\varphi) \geq 0$, то аппроксимируем смешанную производную полусуммой аппроксимаций (2) и (3), иначе — полусуммой (1) и (4). Для вычисления в околополюсных точках вновь отождествляем необходимые точки вне расчетной области с симметричными им относительно полюсов. На этот раз такая аппроксимация согласована:

