

## ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ДЕЯКИХ РІЗНИЦЕВИХ СХЕМ ДЛЯ РІВНЯННЯ КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ

*Розглядаються два варіанти чисельного методу характеристик для розв'язання рівняння конвективної дифузії - лінійна та квадратична різницева схеми. За допомогою методу диференціальних наближень побудовані перші диференціальні наближення для обох схем, проведено їх порівняльний аналіз. Теоретичні дослідження перевірені на чисельному розв'язанні модельної тестової задачі. Результати розрахунків подано у вигляді зручних для аналізу графіків та таблиць.*

### 1. Вступ

У даній статті досліджується один з варіантів лагранжево-ейлерових чисельних методів розв'язання рівняння переносу (конвективної дифузії), запропонований деякими вченими [1,2], і який згодом в зарубіжній літературі отримав назву модифікованого методу характеристик (ММХ).

Чисельний розв'язок таких рівнянь пов'язаний з характерними математичними труднощами. Це так звана "схемна" дифузія та нефізичні сплески в результатах розрахунків. Одержання прийнятних для практики розв'язків за однією із звичайних скінченнорізницевої схем (наприклад, схема з центрально-різницевою апроксимацією конвективного члена, схема Самарського, схема Кранка-Ніколсона і т.д.) можливе тільки за умов достатньо детальної просторової та часової дискретизації. Але враховуючи такі специфічні риси задач переносу мігрантів, як великі лінійні розміри області фільтрації, необхідність проведення прогнозних розрахунків на тривалі відтинки часу, використання стандартних скінченнорізницевої апроксимації буде малоефективним.

Різницева схеми ММХ дозволяють, по-перше, збільшити на 1-2 порядки різницевий крок у часі (в порівнянні з стандартними скінченнорізницевої апроксимаціями конвективного члена), не втрачаючи при цьому точності обчислень; по-друге, отримати при розв'язанні двовимірних географічних задач системи лінійних алгебраїчних рівнянь із симетричними матриця-

ми, що значно знижує вимоги до необхідної оперативної пам'яті комп'ютера та полегшує їх розв'язання.

В статті досліджені питання точності різницевої схем, побудованих за ММХ. Аналіз дисипативних та дисперсійних властивостей різницевої схем проведено з використанням методу диференціального наближення, основні положення якого були висвітлені в працях М.М.Яненко, Ю.І.Шокіна та їх учнів [3] стосовно різницевої схем для гіперболічних рівнянь. При дослідженні різницевої схем для рівняння конвективної дифузії метод диференціального наближення з успіхом використовував Ное [4,5].

Пропонуємо розв'язання для одновимірного рівняння конвективної дифузії з постійними коефіцієнтами

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad (1)$$

яке описує зміну за часом  $t$  концентрації  $C(x, t)$  мігранта, розчиненого в рідині, що фільтрується зі швидкістю  $V$  при наявності дифузії, яка задається коефіцієнтом  $D$ .

Ідея методу характеристик полягає у введенні до рівняння субстанційної похідної (характеристичного напрямку), що виражає швидкість зміни концентрації в рухомій точці середовища. Далі проводиться розщеплення в процесі обчислень розрахунку конвекції і дифузії та розгляді кожного типу переносу окремо. Конвекція розраховується лагранжевим методом (методом

слідкування за частинкою), а дифузія – стандартним ейлеровим (на нерухомих сітках).

Апроксимація субстанційної похідної на локальній за часом лагранжевій сітці та апроксимація дифузійних членів на нерухомій ейлеровій сітці передбачає визначений спосіб узгодження вузлів ейлерової та лагранжевої сіток. Для отримання неявних різницевих схем запропоновано [1,2] узгоджувати сітки таким чином, щоб у шуканий момент часу їх вузли збігалися. При цьому лінії локальної лагранжевої сітки можна отримати інтегруванням траєкторій руху лагранжевих координат.

Відмітимо, що розрахунок конвекції на нерухомих ейлерових сітках виступає, як правило, обмежуючим фактором того чи іншого чисельного алгоритму. Застосування ж лагранжевого підходу для розрахунку конвекції дозволяє або повністю виключити ефекти “схемної” дифузії, або значно їх зменшити.

Запишемо рівняння (1) в лагранжевій формі:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad (2)$$

де  $\frac{\partial}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial t} + V \frac{\partial}{\partial x}$  – субстанційна похідна (характеристичний напрям), що виражає швидкість зміни концентрації мігранта в рухомій точці. Побудована згідно з методом характеристик різницева схема, що апроксимує рівняння (2) в момент часу  $t^n = (n-1)\tau$ ,  $n = 1, 2, \dots$  на просторовій сітці  $x_i = (i-1)h$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$  має вигляд:

$$\frac{U_i^n - U_i^{n-1}(P)}{\tau} = D \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{h^2}, \quad (3)$$

де  $U_i^{n-1}(P)$  – значення шуканої функції в момент часу  $t^{n-1}$  в такій точці простору  $P$ , яка в момент часу  $t^n$  потрапляє у вузол сітки  $X^i$ . У випадку постійних коефіцієнтів  $P = x_i - V\tau$ . Таким чином, умовно кажучи, у вузол сітки  $x_i$  заноситься частинка, яка відслідковується “назад” вздовж відповідної характеристики до попереднього часового шару  $t^{n-1}$ . Значення концентрації у “відслідкованій” точці  $U_i^{n-1}(P)$  визначається інтерполяцією по сусіднім вузлам сітки.

Розглянемо дві процедури інтерполяції: лінійну та квадратичну. При використанні лінійної інтерполяції для обчислення значення  $U_i^{n-1}(P)$  маємо співвідношення:

$$U_i^{n-1}(P) = \alpha U_{i-m}^{n-1} + (1-\alpha)U_{i-m}^{n-1},$$

$$m = [Cu], \quad Cu = \frac{V\tau}{h}, \quad \alpha = Cu - m, \quad 0 \leq \alpha \leq 1,$$

де  $Cu$  – сіткове число Куранта; квадратні дужки використовуються для позначення цілої частини записаного в них дійсного числа. Відповідний метод будемо в подальшому називати лінійним модифікованим методом характеристик (лінійний ММХ).

При використанні квадратичної інтерполяції  $U_i^{n-1}(P) \approx \frac{1}{2}(\alpha^2 + \alpha)U_{i-m-1}^{n-1} + (1-\alpha^2)U_{i-m}^{n-1} + \frac{1}{2}(\alpha^2 + \alpha)U_{i-m+1}^{n-1}$

$$m = \begin{cases} [Cu], & \text{если } Cu - [Cu] < [Cu] + 1 - Cu, \\ [Cu] + 1, & \text{если } Cu - [Cu] \geq [Cu] + 1 - Cu, \end{cases}$$

$$Cu = \alpha + m, \quad -0.5 \leq \alpha \leq 0.5,$$

де  $m$  – найближче ціле до числа Куранта. Цей метод будемо в подальшому називати квадратичним модифікованим методом характеристик (квадратичний ММХ).

## 2. Дисипативні та дисперсивні похибки

Рівняння (1) має розв'язки спеціального вигляду [6]:

$$U(x, t) = \exp(-D\omega^2 t) \exp(i\omega(x - Vt)), \quad (4)$$

де  $i$  – уявна одиниця,  $\omega$  – хвильове число ( $\omega = \frac{2\pi}{\lambda}$ ,  $\lambda$  – довжина хвилі,  $f = \frac{\omega}{2\pi}$  – частота). Просторовий профіль функції (4) являє собою монохроматичну хвилю. Переміщення хвилі (зміна фази) описується другим множником правої частини виразу (4): хвиля зміщується у додатньому напрямку осі  $x$  із швидкістю  $V$ , що не залежить від довжини хвилі. Зміна амплітуди у часі визначається першим множником правої частини виразу (4): амплітуда експоненціально спадає, причому швидкість спадання сильно зростає при збільшенні частоти. Має місце співвідношення:

$$U(x, t + \tau) = \lambda(\omega)U(x, t), \quad (5)$$

$$\lambda(\omega) = \exp(-\omega^2 D\tau) \exp(-i\omega V\tau), \quad (6)$$

де перший множник правої частини виразу (6) визначає амплітудні зміни, другий множник – фазові зміни за час  $\tau$ .

Розв'язки вигляду, аналогічного (4), мають також лінійні однорідні сіткові рівняння з постійними коефіцієнтами:

$$y_k^n = \rho_\lambda^n \exp(i\omega_\lambda kh), \quad y_k^{n+1} = \rho_\lambda y_k^n,$$

де  $\rho_\lambda$  – множник переходу для гармоніки з довжиною хвилі  $\lambda = N_\lambda h$ ,  $\omega_\lambda = \frac{2\pi}{\lambda}$ , який залежить від вигляду конкретної різницевої схеми, і у випадку різницевої схеми для рівняння конвективної дифузії – від параметрів  $N_\lambda, Cu, Pe = \frac{Vh}{D}$ . Тут  $Pe$  – сіткове число Пекле.

За аналогією з виразом (4) запишемо  $\rho_\lambda$  у вигляді

$$\rho_\lambda = \exp(-DF_1\omega_\lambda^2\tau) \exp(-iV_1\omega_\lambda\tau),$$

$$F_1 = \frac{-\ln|\rho_\lambda|}{D\omega_\lambda^2\tau}, \quad F_2 = \frac{\arg(\rho_\lambda)}{V\omega_\lambda\tau}.$$

Коефіцієнт  $F_1 = F_1(N_\lambda, Cu, Pe)$  (назвемо його “коефіцієнтом відносної схемної дифузії”) характеризує амплітудні (дисипативні) похибки різницевої схеми. При  $F_1 < 1$  має місце неадекватне підсилення, при  $F_1 > 1$  – демпфірування амплітуди відповідної гармоніки. Коефіцієнт  $F_2 = F_2(N_\lambda, Cu, Pe)$  (“коефіцієнт відносної схемної конвекції”) характеризує фазові (дисперсійні) похибки різницевої схеми. Значення  $F_2 < 1$  вказує на відставання,  $F_2 > 1$  – на випередження сіткової гармоніки в порівнянні з точним розв'язком диференціального рівняння. Підкреслимо, що значення коефіцієнта  $F_2$  залежить від частоти гармоніки.

### 3. Метод диференціального наближення

Для дослідження різницевої схеми (3), що апроксимують рівняння конвективної дифузії (1), побудуємо їх перші диференціальні наближення (ПДН) [3] (в працях [4,5] замість ПДН використовується термін “modified partial differential equation”). Ці ПДН можна отримати шляхом розкладання в ряд Тейлора значень шуканої функції, що входять у різницеве рівняння, в околі точки  $(x_j, t^n)$  з подальшим виключенням змішаних просторово-часових похідних за допомогою диференціювання та алгебраїчних перетворень.

У загальному вигляді ПДН різницевої схеми для рівняння (1) може бути записано таким чином:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial x} - \left( D - \frac{Vh}{2} \eta_2(Cu, Pe) \right) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \sum_{q=3}^{\infty} \frac{Vh^{q-1}}{q!} \eta_q(Cu, Pe) \frac{\partial^q C}{\partial x^q} = 0 \quad (7)$$

Відповідно до визначення, наведеного в праці [4], різницева схема має  $p$ -й порядок точності, якщо  $\eta_q = 0$ ,  $q = 1, \dots, p$ , але  $\eta_{q+1} \neq 0$ . Якщо  $\eta_2 \neq 0$  (тобто схема має перший порядок точності), то кажуть, що метод має схемну дифузю.

Використовуючи результати дослідження [4], можна показати, що мають місце співвідношення:

$$F_1(Cu, Pe, N_\lambda) = 1 - \eta_2 \frac{Pe}{2} + \sum_{p=4(2)}^{\infty} \frac{(-1)^{\frac{p}{2}}}{p!} \left( \frac{2\pi}{N_\lambda} \right)^p \eta_p, \quad (8)$$

$$F_2(Cu, Pe, N_\lambda) = 1 + \sum_{q=3(2)}^{\infty} \frac{(-1)^{\frac{q-1}{2}}}{q!} \left( \frac{2\pi}{N_\lambda} \right)^{q-1} \eta_p.$$

Вирази (8) демонструють зв'язок між дисипативними (дисперсійними) похибками та ПДН різницевої схеми, а саме: фазові (дисперсійні) похибки пов'язані з непарними похідними у ПДН, а амплітудні (дисипативні) – з парними.

### 4. Аналіз точності лінійних та квадратичних схем ММХ

Як було зазначено раніше, дисипативні та дисперсивні характеристики різницевої схеми можуть бути виведені з аналізу їх ПДН. Для лінійного ММХ його ПДН має вигляд:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial x} - D \left( 1 + \frac{Pe\alpha(1-\alpha)}{2Cu} \right) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{Vh^2}{6} \frac{\alpha(1-\alpha)(1-2\alpha)}{Cu} \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} - \frac{Vh^3}{24} \left( 12 \frac{Cu}{Pe^2} + \frac{2}{Pe} + \frac{\alpha(1-\alpha)(6\alpha^2 - 6\alpha + 1)}{Cu} \right) \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} + \dots = 0. \quad (9)$$

Аналіз співвідношення (9) показує, що лінійний ММХ має схемну дифузю, тобто має перший порядок точності. Домінують амплітудні похибки. Схемна дифузю із збільшенням числа Куранта асимптотично наближається до нуля. При цілих значеннях числа  $Cu$  схемна дифузю відсутня, і метод має третій порядок точності.

ПДН квадратичного ММХ записується у вигляді:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial x} - D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{Vh^2}{2} \frac{\alpha(1-\alpha)(1+\alpha)}{Cu} \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} - \frac{Vh^3}{24} \left( 12 \frac{Cu}{Pe^2} + \frac{2}{Pe} - \frac{3\alpha(1-\alpha)(1+\alpha)}{Cu} \right) \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} + \dots = 0. \quad (10)$$

Очевидно, що у квадратичного ММХ схемна дифузія відсутня. Метод має другий порядок точності. Домінують (при малих числах  $Cu$ ) фазові похибки. Для обох ММХ фазові похибки залежать тільки від числа Куранта, і при збільшенні  $Cu$  вони асимптотично наближаються до нуля. При цілих значеннях  $Cu$  фазові похибки відсутні і метод має третій порядок точності. Лінійний ММХ вільний від фазових похибок також при  $a = 0,5$ . Висока точність методу при цілих числах  $Cu$  пояснюється тим, що в цьому випадку необхідність в інтерполяції зникає, тому що  $P = x_1 - Cu$ . Можна показати, що для квадратичного ММХ характерні більші фазові похибки, аніж для лінійного ММХ.

Аналізуючи вирази (9,10) для ПДН лінійного та квадратичного ММХ, підкреслимо найбільш цікаву та практично важливу рису цих методів: при обраному числі Пекле (тобто при фіксованій просторовій дискретизації) точність методів зростає із збільшенням числа Куранта (тобто із збільшенням кроку часової дискретизації). Таке покращення точності триває доти, доки не починає виявлятися вплив множника при коефіцієнті  $\frac{\partial^4 C}{\partial x^4}$ , який визначає дисипативні властивості різницевої схеми. Це свідчить про те, що із збільшенням часового різницевого кроку похибки апроксимації дифузійної частини починають переважати над похибками, які вносить інтерполяція при обчисленні субстанційної похідної.

З метою ілюстрації теоретичних результатів було проведено порівняльний аналіз точності розглянутих вище різницевих схем на модельній задачі. Рівняння конвективної дифузії (1) розв'язувалось в області  $0 \leq x \leq 1$ ,  $0 \leq t \leq 1$ . Початкова та крайові умови задавались згідно з точним розв'язком:

$$C(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4t+1}} \exp\left\{\frac{-(x-0.2-Vt)^2}{D(4t+1)}\right\}. \quad (11)$$

З використанням лінійного та квадратичного ММХ були отримані чисельні розв'язки в момент часу та виконано їх порівняння з точним розв'язком (11). Були використані такі значення

розрахункових параметрів:  $h=0.01$ ,  $V=0.6$ ,  $D=0.006$ ,  $0.0015$  та  $0.0006$ , таким чином сіткове число Пекле набувало значень  $Pe=1$ ,  $4$  та  $10$  відповідно. Сіткове число Куранта (крок у часі) в розрахунках змінювалось в межах  $0.2 \leq Cu \leq 20.2$ .

Результати розрахунків показані на рис.1-6. Додатково точність чисельного розв'язку оцінювалась за величиною середньоквадратичної похибки  $Z$ , вираженої в процентах:

$$Z = \frac{100}{\sqrt{I}} \sqrt{\sum_{i=1}^{N-1} h(C(x_i, T) - U_i^{(k+1)})^2}. \quad (12)$$

Таблиця 1 містить значення  $Z$  для лінійного та квадратичного ММХ, таблиця 2 – значення  $Z$  при цілих числах Куранта (в цьому випадку необхідність в інтерполяції зникає і лінійний та квадратичний ММХ збігаються).

Отримані результати в цілому підтверджують попередні теоретичні висновки, що були зроблені на основі аналізу відповідних диференціальних наближень. Найбільші похибки притаманні схемам ММХ при великих числах Пекле та малих числах Куранта. При достатньо великих числах Куранта і лінійний, і квадратичний ММХ демонструють високу точність, маючи явні переваги в порівнянні із загальновідомими різницевиими схемами для рівняння переносу.

*Виконані дослідження дозволяють зробити наступні висновки.*

1. Лінійний ММХ має схемну дифузію. Квадратичний ММХ вільний від схемної дифузії, але має відносно більші фазові похибки. Методи мають відповідно перший та другий порядок точності. При цілих числах Куранта обидві схеми ММХ мають третій порядок точності.

2. Квадратичний ММХ показує задовільну точність в більш широкому, ніж лінійний ММХ діапазоні чисел Пекле та Куранта.

3. Схемна дифузія та фазові похибки схем ММХ, обумовлені інтерполяцією, зменшуються із збільшенням кроку часової дискретизації.

4. Обчислювальний експеримент демонструє, що оптимальним, з точки зору точності, є таке співвідношення між кроками просторової та часової сіток, коли  $Pe \approx Cu$ . Тоді досягається компроміс між похибками, обумовленими інтерполяцією та похибками, обумовленими апроксимацією дифузійної частини рівняння.

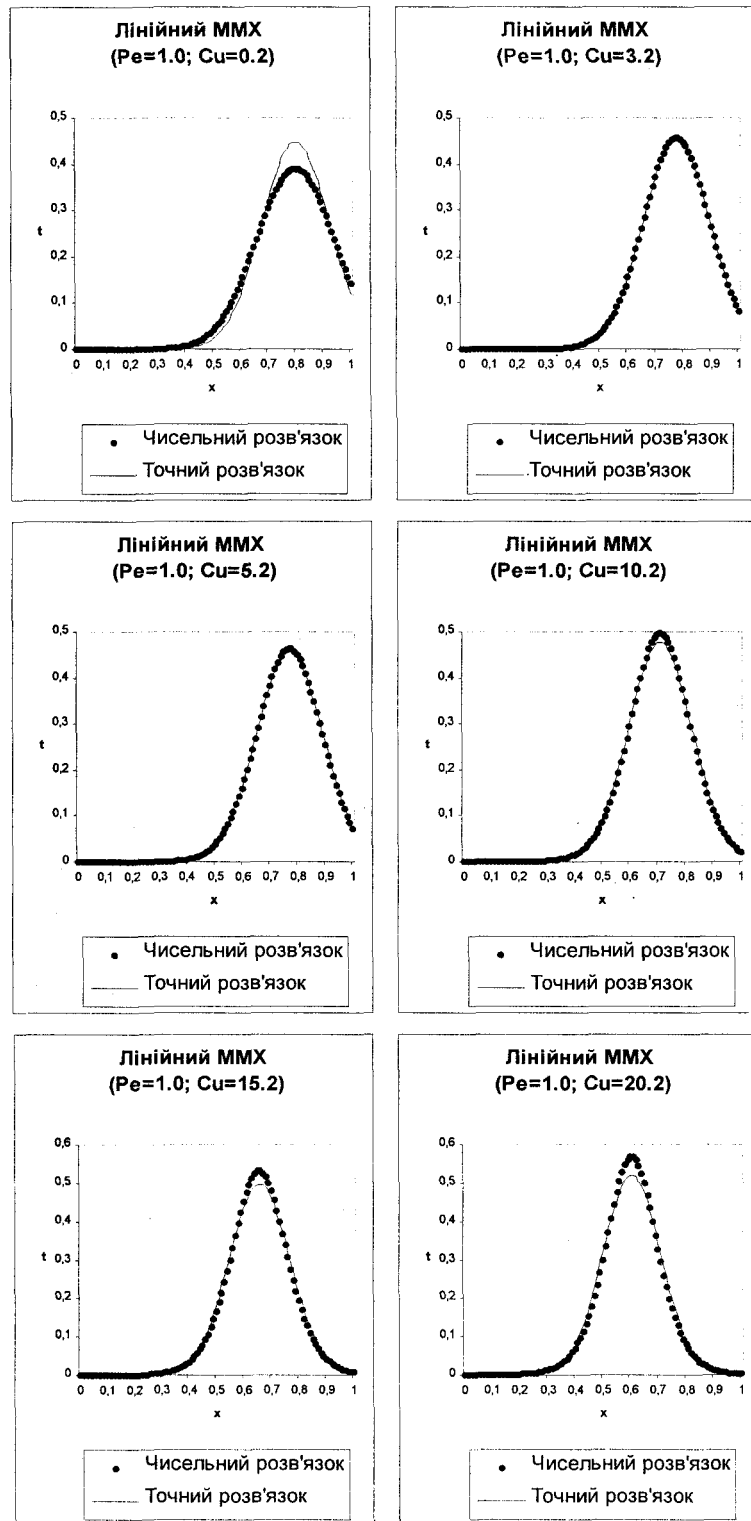


Рис. 1. Результати розрахунків за допомогою лінійного MMX ( $Pe=1$ )

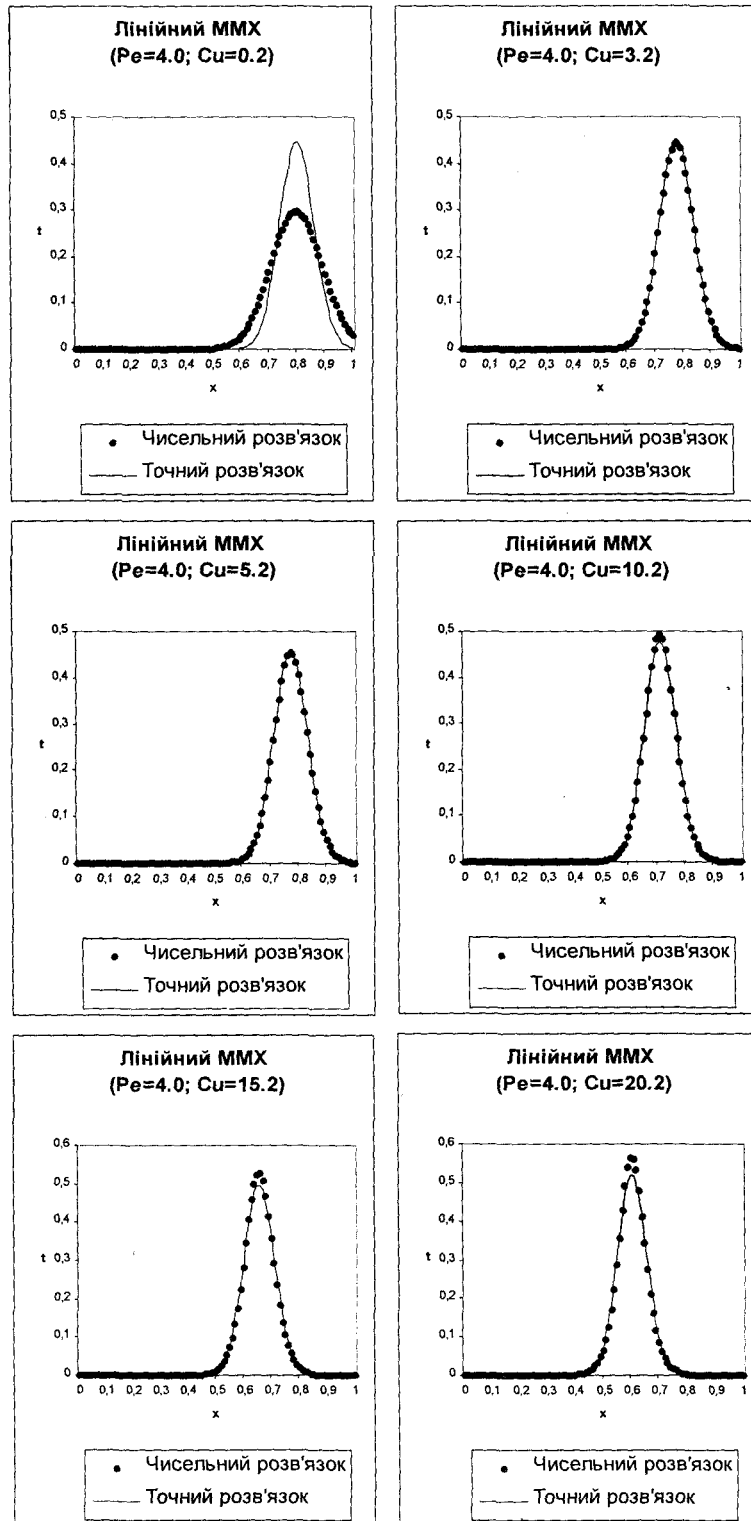


Рис.2. Результати розрахунків за допомогою лінійного MMX ( $Pe=4$ )

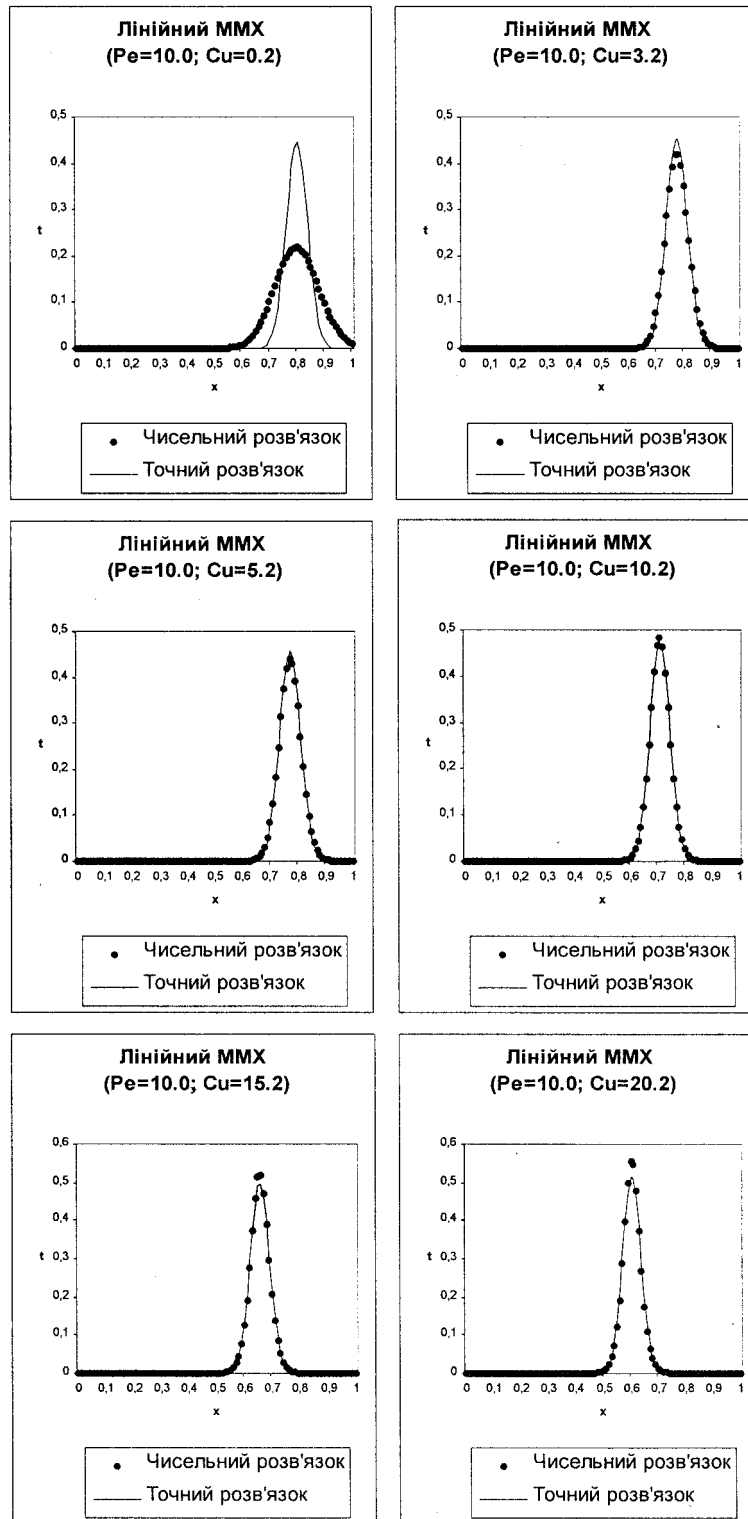


Рис.3. Результати розрахунків за допомогою лінійного MMX ( $Pe=10$ )

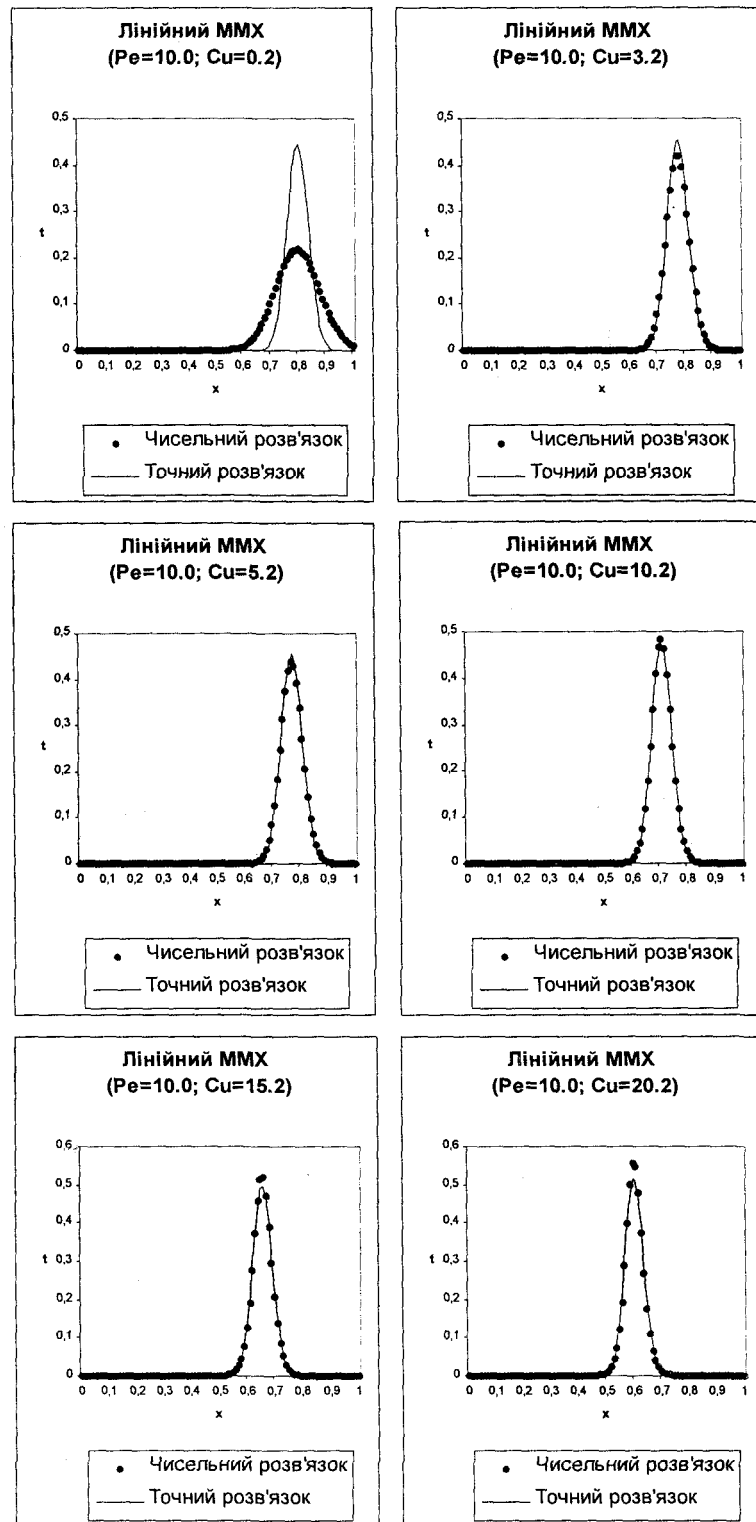


Рис.4. Результати розрахунків за допомогою квадратичного MMX ( $Pe=1$ )



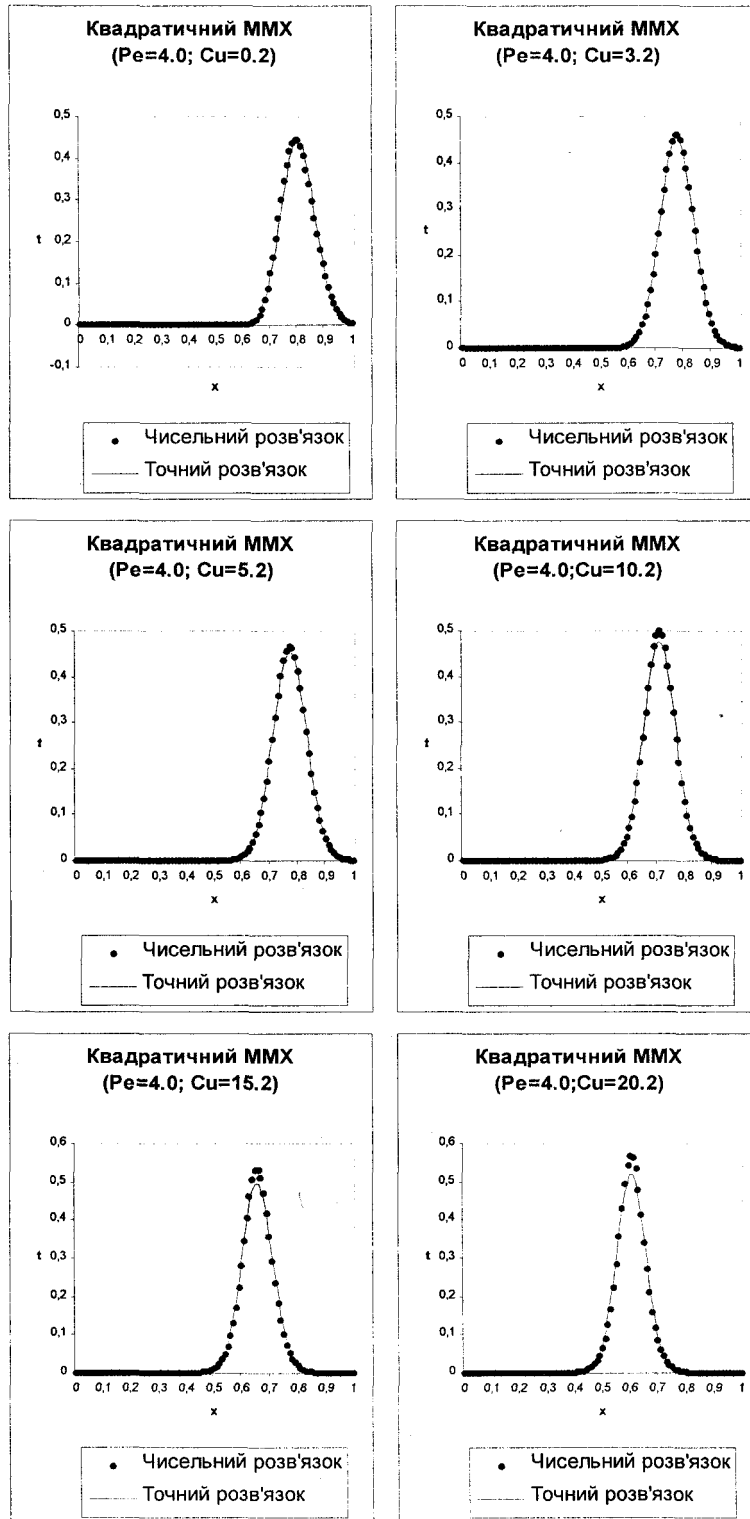


Рис.5. Результата розрахунків за допомогою квадратичного ММХ ( $Pe=4$ )

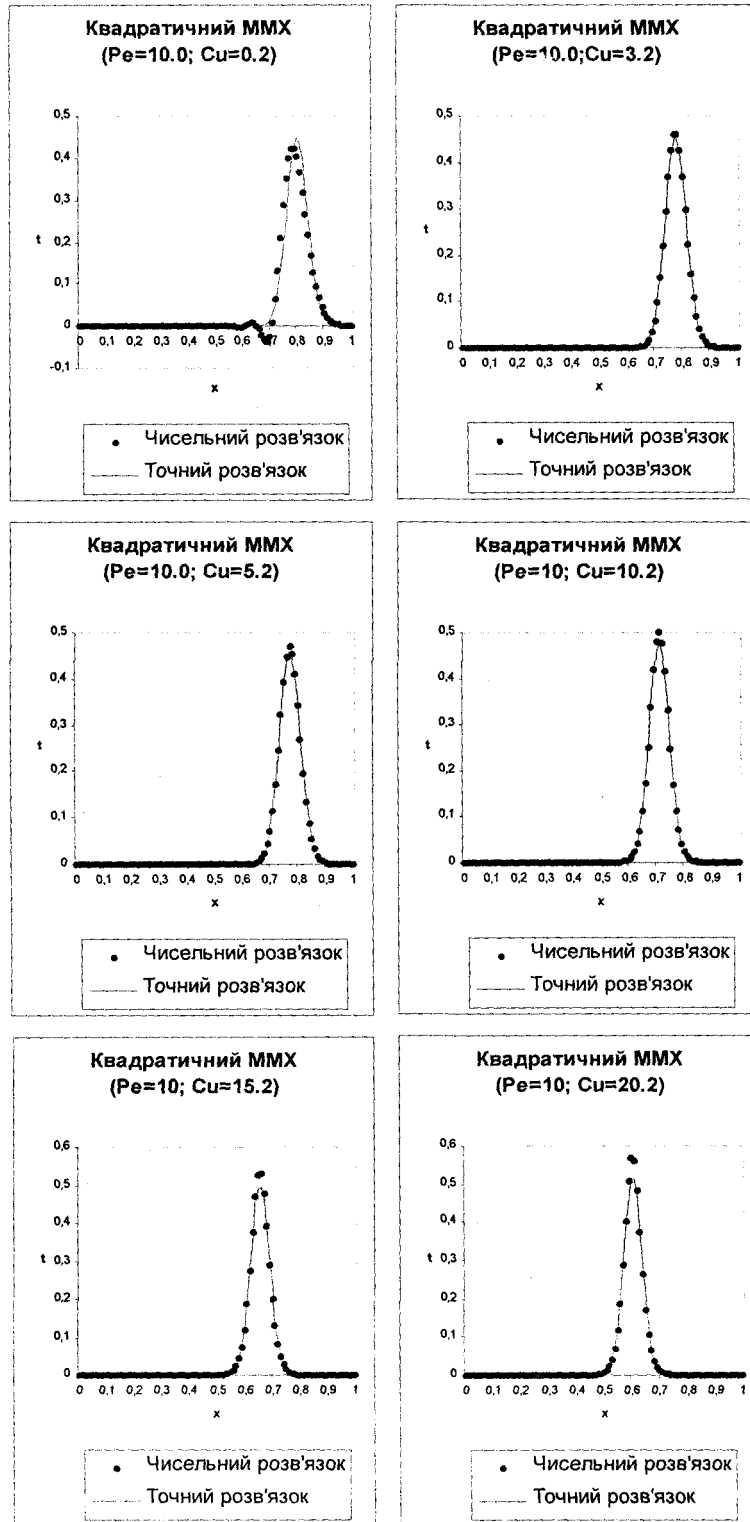


Рис.6. Результати розрахунків за допомогою квадратичного MMX ( $Pe=10$ )

Таблиця 1. Порівняння середньоквадратичної похибки (%):зверху - лінійний ММХ, знизу - квадратичний ММХ

	Pe=1.0	Pe=4.0	Pe=10.0
<b>Cu=0.2</b>	2.233	4.643	5.831
	0.148	0.832	2.372
<b>Cu=1.2</b>	0.364	1.150	2.012
	0.026	0.142	0.440
<b>Cu=2.2</b>	0.132	0.598	1.180
	0.016	0.082	0.246
<b>Cu=3.2</b>	0.118	0.354	0.794
	0.012	0.061	0.177
<b>Cu=5.2</b>	0.286	0.162	0.412
	0.007	0.042	0.118
<b>Cu=8.2</b>	0.519	0.275	0.202
	0.018	0.027	0.083
<b>Cu=10.2</b>	0.741	0.437	0.254
	0.040	0.023	0.072
<b>Cu=12.2</b>	0.920	0.576	0.361
	0.068	0.031	0.061
<b>Cu=15.2</b>	1.192	0.782	0.537

Таблиця 2. Середньоквадратична похибка (%) для схем ММХ при цілих числах Cu

	Pe=1.0	Pe=4.0	Pe=10.0
<b>Cu=1.0</b>	0.079	0.084	0.108
<b>Cu=2.0</b>	0.147	0.134	0.148
<b>Cu=3.0</b>	0.213	0.183	0.187
<b>Cu=5.0</b>	0.344	0.281	0.265
<b>Cu=8.0</b>	0.590	0.448	0.400
<b>Cu=10.0</b>	0.662	0.519	0.455
<b>Cu=12.0</b>	0.785	0.611	0.529
<b>Cu=15.0</b>	0.968	0.747	0.637
<b>Cu=20.0</b>	1.263	0.967	0.812

1. Douglas J.Jr., Russel T.F. Numerical methods for convection dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedures // SIAM J. Numcr. Anal. - 1982.-№ 5. - P. 871-885.

2. Демченко В.Ф. Разностные схемы для уравнения конвективной диффузии // Тр. Международн. Совещания "Моделирование в ядерной энергетике". - Варна, 1982.- Ч. 1. - С. 24-49.

3. Шокин Ю.И., Яненко Н.Н. Метод дифференциального приближения. - Новосибирск: Наука, 1985. - 366 с.

4. Noye J. Finite-difference methods for solving the one-dimensional transport equation. Numerical Modelling: Applications to Marine Systems. - Elsevier Science Publishers B.V. (North-Holland), 1987. - P.231-256.

5. Noye J., Hayman K. Accurate finite difference methods for solving the advection-diffusion equation. Computational Techniques & Applications: CTAC-85. - Elsevier Science Publishers B.V. (North-Holland). 1986. - P. 137-146.

6. Шокин Ю.И. К анализу диссипации и дисперсии разностных схем // Численные методы механики сплошных сред. - 1976.- Т. 7. - № 7. - С. 131-141.

O.S. TRIGUB

## THE COMPARATIVE ANALYSIS OF SOME DIFFERENTIAL SCHEMES FOR CONVECTIVE - DIFFUSION EQUATIONS

*Two versions of numerical method of characteristics for convective—diffusion equations solving are regarded, those are linear and quadratic differential schemes. Using modified partial differential equations, differential approximations are built and their comparison is carried out. The theoretical investigations are confirmed by means of the numerical simulation experiment. The results of calculations are presented in the convenient form of charts and tables.*