

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ХАРАКТЕРИСТИК ДО РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧ ПІДЗЕМНОГО МАСОПЕРЕНОСУ

Розглядаються різницеві схеми для рівняння підземного масопереносу, побудовані за методом характеристик. Запропоновані дві нові різницеві схеми, які дозволяють збільшувати різницевий крок за часом на 1–2 порядки без втрати точності обчислень. За допомогою методу диференціальних наближень побудовані перші диференціальні наближення різницевих схем, проведено їх порівнювальний аналіз. Теоретичні дослідження перевірені на чисельному розв'язанні модельної тестової задачі. Результати розрахунків подано у вигляді зручних для аналізу графіків і таблиць.

Викладення проводиться 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, що задається коефіцієнтом D .

Для розв'язання рівняння (1) в даній роботі використовується один із варіантів чисельного методу характеристик, основні положення якого викладені в роботах [1, 2]. В подальшому викладі будемо називати цей метод ММХ (модифікований метод характеристик).

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).

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 напрямок), що виражає швидкість зміни концентрації мігранта в рухомій точці. Побудована у відповідності 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

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

де $U^{n-1}(P)$ — 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 ви-

падку 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 поперед-

нього часового шару t^{n-1} . Значення концентрації у “відслідкованій” точці $U^{n-1}(P)$ визначається інтерполяцією по сусідніх вузлах сітки.

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

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

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

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

При використанні квадратичної інтерполяції

$$U^{n-1}(P) \approx \frac{1}{2}(\alpha^2 + \alpha)U_{i-m-1}^{n-1} + (1-\alpha^2)U_{i-m}^{n-1} + \frac{1}{2}(\alpha^2 + \alpha)U_{i-m+1}^{n-1},$$

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

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

де m — найближче ціле до числа Куранта. Цей метод надалі будемо називати квадратичним модифікованим методом характеристик (квадратичний ММХ).

Для дослідження точності різницевої схем (3), що апроксимують рівняння конвективної дифузії (1), побудуємо їх перші диференціальні наближення (ПДН) [3] (в роботах [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_i, t^n) з дальшим виключенням змішаних просторово-часових похідних за допомогою диференціювання та алгебраїчних перетворень. Зауважимо, що основні положення методу диференціального наближення були висвітлені в роботах М. М. Яненко, Ю. І. Шокіна та їхніх учнів [3] стосовно різницевої схем для гіперболічних рівнянь. При дослідженні різницевої схем для рівняння конвективної дифузії метод диференціального наближення з успіхом використовувався в роботах Ное [4, 5].

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

$$\frac{\partial}{\partial t} U + \frac{\partial}{\partial x} U = \frac{\partial^2}{\partial x^2} U + \dots + \frac{Vh^{q-1}}{q!} \eta_q(Cu, Pe) \frac{\partial^q C}{\partial x^q} = 0. \quad (4)$$

Відповідно до визначення в роботі [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 дифузію.

Для лінійного ММХ його ПДН має вигляд:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial x} - D \left(1 + \frac{Pe\alpha(1-\alpha)}{2Cu} \right) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{Vh^2}{6} \frac{\alpha(1-\alpha)(1-2\alpha)}{Cu} \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} - \frac{Vh^3}{24} \left(12 \frac{Cu}{Pe^2} + \frac{2}{Pe} + \frac{\alpha(1-\alpha)(6\alpha^2 - 6\alpha + 1)}{Cu} \right) \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} + \dots = 0. \quad (5)$$

Аналіз співвідношення (5) показує, що лінійний ММХ має схемну дифузію, тобто має перший порядок точності. Схемна дифузія із збільшенням числа Куранта асимптотично наближається до нуля. При цілих значеннях числа Cu схемна дифузія відсутня і метод має третій порядок точності.

ПДН квадратичного ММХ записується у вигляді:

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

Очевидно, що у квадратичного ММХ схемна дифузія відсутня. Метод має другий порядок точності. Висока точність методу при цілих числах Cu пояснюється тим, що в цьому випадку необхідність в інтерполяції зникає, тому що

$$P = x_i - Cu.$$

Аналізуючи вирази (5, 6) для ПДН лінійного та квадратичного ММХ підкреслимо найцікавішу 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 продовжується аж поки не починає виявлятися вплив множника η_4 при кое-

фіцієнті $\frac{\partial^4 C}{\partial x^4}$. До складу η_4 входить доданок,

пропорційний різницевому числу Cu , наявність якого і пояснює відносно погіршення точності ММХ при збільшенні кроку часової дискретизації. Розглянемо різницеві схеми ММХ, які не містять цього доданку, а саме:

$$\frac{U_i^n - U_i^{n-1}(P)}{\tau} = \frac{D}{2} (U_{xx}^n + U_{xx}^{n-1}(P)), \quad (7)$$

$$\text{де } U_{xx}^{n-1}(P) = \frac{U_{i+1}^{n-1}(P) - 2U_i^{n-1}(P) + U_{i-1}^{n-1}(P)}{h^2}.$$

Для обчислення значення $U_i^{n-1}(P)$ використовуються, як і раніше, процедури лінійної (лінійний ММХ1) та квадратичної (квадратичний ММХ1) інтерполяції.

Дослідимо точність запропонованих схем. ПДН лінійного ММХ1 має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial t} - D \left(1 + \frac{Pe\alpha(1-\alpha)}{2Cu} \right) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \\ + \frac{Vh^2}{6} \frac{\alpha(1-\alpha)(1-2\alpha)}{Cu} \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} - \frac{Vh^3}{24} \left(\frac{2}{Pe} + \right. \\ \left. + \frac{\alpha(1-\alpha)(6\alpha^2 - 6\alpha + 1)}{Cu} \right) \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} + \dots = 0. \quad (8) \end{aligned}$$

Для ПДН квадратичного ММХ1 справедливе співвідношення

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

Порівняння виразів (5, 6) із співвідношеннями (8, 9) показує, що останні не містять у мно-

нику η_4 при коефіцієнті $\frac{\partial^4 C}{\partial x^4}$ доданку, пропор-

ційного числа Куранта. В решті ж коефіцієнти при головних членах співпадають. Це дає підставу сподіватися на те, що при збереженні всіх позитивних рис ММХ запропоновані різницеві схеми ММХ1 демонструватимуть ще вищу точність (особливо при великих числах Куранта).

З метою ілюстрації теоретичних результатів було проведено порівнювальний аналіз точності розглянутих вище різницевоїх 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 у відповідності з точним розв'язком

$$C(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4t+1}} \exp \left\{ \frac{-(x-0.2-Vt)^2}{D(4t+1)} \right\}. \quad (10)$$

З використанням лінійного та квадратичного ММХ були отримані чисельні розв'язки в

момент часу $t=1$ та виконано їх порівняння з точним розв'язком (10). Були використані такі значення розрахункових параметрів: $h=0.01$, $V=0.6$, $D=0.006$, 0.0015 та 0.0006 , так що сіткове

число Пекле приймало значення $Pe=1, 4$ та 10 відповідно. Сіткове число Куранта (крок у часі) в розрахунках змінювалось в границях

$$0.2 \leq Cu \leq 20.2.$$

Результати розрахунків показані на рис.1, 2

($Pe=10$). Додатково точність чисельного розв'язку оцінювалась за величиною середньоквадратичної похибки Z , вираженої в процентах

$$Z = \sqrt{\sum_{i=1}^{N-1} h(C(x_i, T) - U_i^{(k+1)})^2} \cdot 100. \quad (11)$$

Таблиця 1 містить значення Z для лінійних ММХ та ММХ1, таблиця 2 — значення Z для квадратичних ММХ та ММХ1.

Отримані результати в цілому підтверджують попередні теоретичні висновки, зроблені на основі аналізу відповідних диференціальних наближень схем ММХ1: обидві схеми мають відчутну перевагу за точністю чисельного розв'язку в порівнянні зі схемами ММХ. Аналогічно до схем ММХ, найбільші похибки притаманні схемам ММХ1 при великих числах Пекле та малих числах Куранта. При великих числах Куранта (що важливо при проведенні практичних розрахунків) обидві схеми ММХ1 показують високу точність, демонструючи явну перевагу над схемами ММХ.

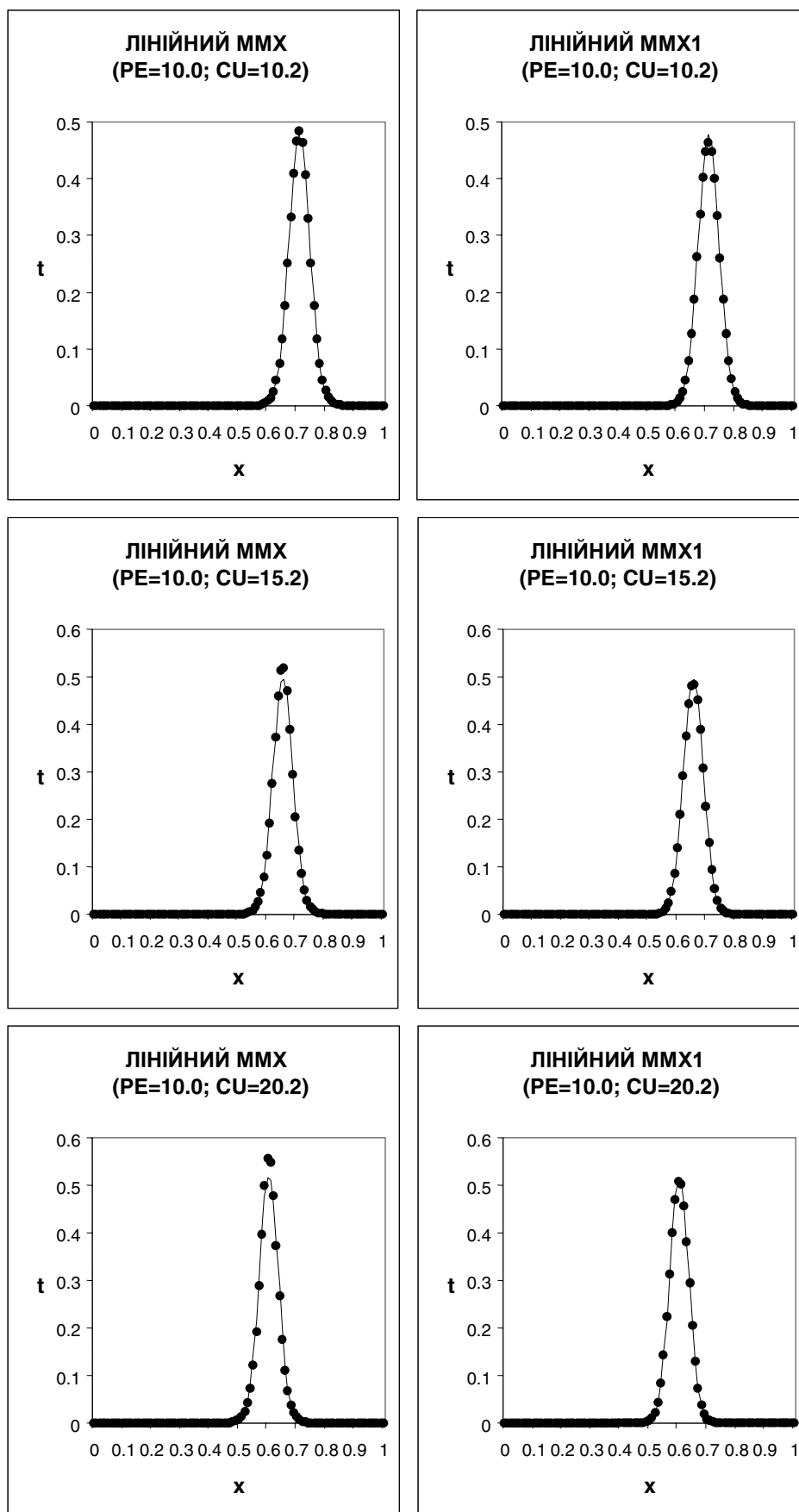
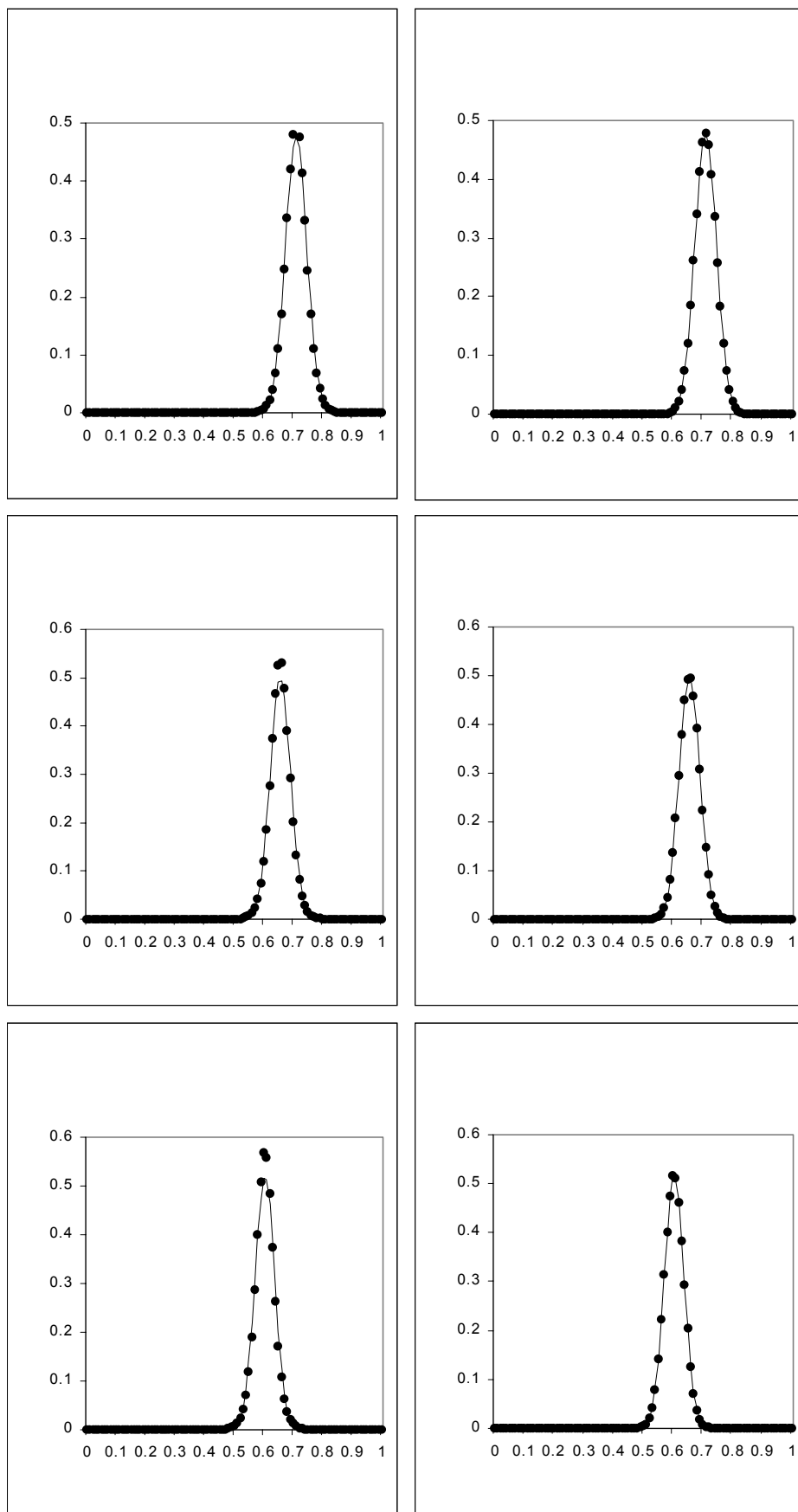


Рис. 1. Результати розрахунків за лінійними MMX та MMX1 ($Pe=10$).

Рис. 2. Результати розрахунків за квадратичними MMX та MMX1 ($Pe=10$).

Таблиця 1. Порівняння середньоквадратичної похибки (%):
зверху — лінійний MMX, знизу — лінійний MMX1.

	Pe=1.0	Pe=4.0	Pe=10.0
Cu=0.2	2.233	4.643	5.831
	2.241	4.645	5.831
Cu=1.2	0.364	1.150	2.012
	0.427	1.184	2.028
Cu=2.2	0.132	0.598	1.180
	0.233	0.670	1.222
Cu=3.2	0.118	0.354	0.794
	0.162	0.463	0.867
Cu=5.2	0.286	0.162	0.412
	0.101	0.282	0.538
Cu=8.2	0.519	0.275	0.202
	0.075	0.178	0.336
Cu=10.2	0.741	0.437	0.254
	0.082	0.147	0.265
Cu=12.2	0.920	0.576	0.361
	0.100	0.134	0.221
Cu=15.2	1.192	0.782	0.537
	0.149	0.139	0.185
Cu=20.2	1.651	1.123	0.830
	0.331	0.228	0.194

Таблиця 2. Порівняння середньоквадратичної похибки (%):
зверху — квадратичний MMX, знизу — квадратичний MMX1.

	Pe=1.0	Pe=4.0	Pe=10.0
Cu=0.2	0.148	0.834	2.376
	0.146	0.832	2.372
Cu=1.2	0.095	0.167	0.452
	0.026	0.142	0.440
Cu=2.2	0.163	0.161	0.283
	0.016	0.082	0.246
Cu=3.2	0.240	0.204	0.256
	0.012	0.061	0.177
Cu=5.2	0.383	0.302	0.300
	0.007	0.042	0.118
Cu=8.2	0.586	0.449	0.401
	0.018	0.027	0.083
Cu=10.2	0.800	0.592	0.516
	0.040	0.023	0.072
Cu=12.2	0.971	0.714	0.613
	0.068	0.031	0.061
Cu=15.2	1.235	0.901	0.764
	0.128	0.065	0.050
Cu=20.2	1.687	1.221	1.020
	0.321	0.192	0.108

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. Numer. 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.

Trigub O. S.

APPLICATION OF THE METHOD OF CHARACTERISTICS TO THE SOLUTION OF THE UNDERGROUND TRANSPORT PROBLEMS

Are considered difference schemes for the equation of underground transport, constructed on the method of the characteristics. Two are offered new schemes, which allow considerably to increase the step on time not losing accuracy of calculations. 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.