

## АНАЛІЗ ЗАСТОСУВАННЯ ІНТЕРПОЛЯЦІЙНИХ ПРОЦЕДУР ПРИ РЕАЛІЗАЦІЇ МЕТОДУ ХАРАКТЕРИСТИК

*Розглянуто різницеві схеми для рівняння конвекції-дифузії з домінуючою конвекцією. Досліджено схеми, побудовані за методом характеристик (Лагранжево-Ейлеровий підхід). В обчисленні суб-станційної (повної) похідної застосовано лінійну, квадратичну та кубічну сплайн-інтерполяції. Проведено чисельне розв'язання модельної тестової задачі для всіх трьох наведених різницевих схем. Результати обчислень подано у зручних для аналізу графіків і таблиць.*

**Ключові слова:** різницеві схеми, метод характеристик, інтерполяція, чисельний експеримент.

Досліджено одновимірне рівняння параболического типу (рівняння конвекції-дифузії, конвективної дифузії, переносу) 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  $V$  за наявності дифузії, задане коефіцієнтом  $D$ .

Добре відомі характерні обчислювальні труднощі, пов'язані з чисельним розв'язанням рівнянь такого типу [4]. Виконання достовірних розрахунків за такими загальновідомими різницевиими схемами, як схема центральної різниці, монотонна схема А. А. Самарського, схема односторонньої різниці, схема Кранка-Ніколсона, схема Лакса-Вендрофа та їх різноманітних модифікацій можливі, як правило, лише за умов, коли величина  $\frac{Vh}{D} \ll 2$ , або принаймні  $\frac{Vh}{D} \leq 2$ , де  $h$  – крок просторової сітки. Порушення умови веде до значного впливу схемної дифузії, що проявляється в занадто згладженому фронті концентрації, або як наслідок порушення принципу максимуму до нефізичних сплесків чисельного розв'язку. Величину  $\frac{Vh}{D}$  в літературі називають числом Пекле і позначають  $Pe$ . Умови  $Pe \ll 2$  або  $Pe \leq 2$  накладають суттєві обмеження на крок просторової сітки  $h$ , особливо у випадках домінуючої конвекції.

Надалі розглянено схеми, позбавлені зазначених обмежень, – різницеві схеми методу характеристик, основні положення якого викладено у працях [1; 5].

Ідея методу характеристик полягає у введенні до рівняння субстанційної (повної) похідної

(так званого характеристичного напрямку), що описує швидкість зміни концентрації в рухомій точці середовища. Далі проводиться розщеплення в процесі обчислень розрахунку конвективно-го та дифузійного членів рівняння (1) та розгляді кожного типу переносу окремо. При цьому конвекція розраховується Лагранжевим методом (на рухомих сітках, методом «слідкування за частинкою»), а дифузія – стандартним Ейлеровим (на нерухомих сітках). Для отримання неявних різницевих схем зазначені Лагранжева та Ейлерова сітки узгоджуються між собою накладанням умови, щоб їхні вузли у шуканий момент часу збігалися.

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 (повна) похідна, яка визначає швидкість зміни концентрації мігранта в рухомій точці. Побудована відповідно до методу характеристик різницева схема, що апроксимує рівняння (2) в момент часу  $t^n = (n-1)\tau$ ,  $n = 1, 2, \dots, T$  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 у час  $t^n$  потрапляє у вузол сітки  $x_i$ .

У випадку постійних коефіцієнтів  $P = x_i - V\tau$ . Таким чином, у вузол сітки  $x_i$  заноситься частинка, яка відстежується «назад» уздовж відповідної характеристики (звідси і назва методу) до попереднього часового шару  $t^{n-1}$ . Значення кон-

центрації у «відстежуваній» точці визначається інтерполяцією за сусідніми вузлами сітки.

Далі досліджено три процедури інтерполяції – лінійна, квадратична та інтерполяція за допомогою кубічного сплайну. Називатимемо відповідні різницеві схеми як «лінійний метод характеристик» (ЛМХ), «квадратичний метод характеристик» (КМХ) та «кубічний сплайн метод характеристик» (СМХ).

Використовуючи лінійну інтерполяцію для обчислення значення  $U^{n-1}(P)$  у виразі (3), маємо співвідношення:

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

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

де  $Cu$  – різницеве число Куранта; квадратні дужки позначають цілу частину записаного в них дійсного числа.

Застосування квадратичної інтерполяції передбачає реалізацію наступних формул:

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

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

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

де  $m$  – найближче ціле до числа Куранта.

Співвідношення для розрахунку значення  $U^{n-1}(P)$  у виразі (3) за допомогою кубічної сплайн-інтерполяції такі:

$$U^{n-1}(P) = (1-\alpha)^2(1+2\alpha)U_{i-m-1}^{n-1} + \alpha^2(3-2\alpha)U_{i-m}^{n-1} + h\alpha(1-\alpha)^2 P'_{i-m-1} - h\alpha^2(1-\alpha)P'_{i-m},$$

$$m = [Cu], \alpha = Cu - m, 0 \leq \alpha \leq 1.$$

Зауважимо, що реалізація кубічної сплайн-інтерполяції передбачає попереднє визначення перших похідних кубічного сплайну  $P$  у вузлах сітки. Для їхнього пошуку, враховуючи тридіагональну структуру матриці системи лінійних рівнянь, використано метод прогонки, основні положення якого можна знайти в [2, с.35].

У праці [3] показано, що метод характеристик з лінійною інтерполяцією має схемну дифузю, тоді як застосування квадратичної інтерполяції призводить до відсутності схемної дифузії.

Порівняльний аналіз точності наведених трьох різницевих схем здійснений на такій модельній задачі:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, 0 < x < \infty, 0 < t < T,$$

$$C(0, t) = 1, \lim_{x \rightarrow \infty} C(x, t) = 0, C(x, 0) = 0,$$

точний розв'язок якої має вигляд:

$$C(x, t) = 0,5 \left\{ \operatorname{erfc} \left[ \frac{x - Vt}{2\sqrt{Dt}} \right] + \exp \left( \frac{Vx}{D} \right) \operatorname{erfc} \left[ \frac{x + Vt}{2\sqrt{Dt}} \right] \right\}.$$

При чисельному розв'язанні довжина відрізка  $l$  обиралася за умови, щоб за  $t = T$  сформувався профіль розв'язку, близький до квазістаціонарного. Різницеві числа Пекле і Куранта змінювалися під час обчислення у межах  $Pe = 0,2 \div 3$ ,  $Cu = 0,2 \div 3,2$ . Результати обчислень показано на рис. 1–3.

Для проведення точнішого порівняльного аналізу наведених різницевих схем оцінювалася величина середньоквадратичної похибки, вираженої у відсотках:

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

Результати представлено у таблиці.

Таблиця. Порівняння середньоквадратичної похибки (%)

Схе-ма	Cu	Pe					
		0,2	0,4	0,8	1	2	3
ЛМХ	0,2	0,4490	0,8802	1,6930	2,0762	3,7898	5,2718
КМХ		0,0686	0,0887	0,1389	0,1722	0,4606	0,9460
СМХ		0,0580	0,0476	0,0212	0,0700	0,4169	0,8468
ЛМХ	0,4	0,3290	0,6533	1,2830	1,5885	3,0069	4,2963
КМХ		0,0889	0,1229	0,1602	0,1765	0,3634	0,7420
СМХ		0,0773	0,0797	0,0213	0,0662	0,5126	1,0785
ЛМХ	0,8	0,1402	0,2181	0,4031	0,5151	1,2209	2,0383
КМХ		0,1410	0,1850	0,1750	0,1411	0,3670	0,9926
СМХ		0,1281	0,1457	0,0792	0,0638	0,6014	1,3400
ЛМХ	1,2	0,1553	0,1980	0,2480	0,3023	0,8577	1,5794
КМХ		0,1753	0,2280	0,2081	0,1705	0,3505	0,8969
СМХ		0,1699	0,2107	0,1624	0,1190	0,5046	1,1920
ЛМХ	2,2	0,2374	0,2726	0,1779	0,1210	0,6177	1,3670
КМХ		0,2608	0,3267	0,2957	0,2575	0,4508	1,0512
СМХ		0,2549	0,3098	0,2562	0,2152	0,5626	1,2833
ЛМХ	3,2	0,3082	0,3444	0,2371	0,1700	0,6346	1,3737
КМХ		0,3300	0,3971	0,3652	0,3337	0,5762	1,1563
СМХ		0,3233	0,3795	0,3272	0,2946	0,6687	1,3632

Аналіз проведених розрахунків підтверджує високу ефективність методу характеристик для розв'язання параболічних рівнянь. Лінійний метод характеристик суттєво поступається іншим, якщо числа Куранта малі і числа Пекле великі (див. таблицю за  $0,2 < Cu < 0,8$ ,  $1 < Pe < 3$ ). Це якраз узгоджується з результатами теоретичного дослідження схем, виконаного у працях [3; 4], де показано, що лінійний метод характеристик має схемну дифузю і перший порядок точності, тоді як у квадратичного методу характеристик схемної дифузії немає і метод має другий порядок точності. Якщо числа Куранта та Пекле малі (див. таблицю за умов  $0,2 < Cu$ ,  $Pe < 0,8$ ), найліпшу точність демонструє метод характеристик із використанням кубічної сплайн-інтерполяції.

Також зауважимо, якщо збільшене число Пекле, інших схемах. Цю тенденцію можна простежити точність методу характеристик із використанням майже для всіх чисел Куранта з досліджуваного квадратичної інтерполяції стає кращою, ніж в діапазону (див. таблицю по рядкам).

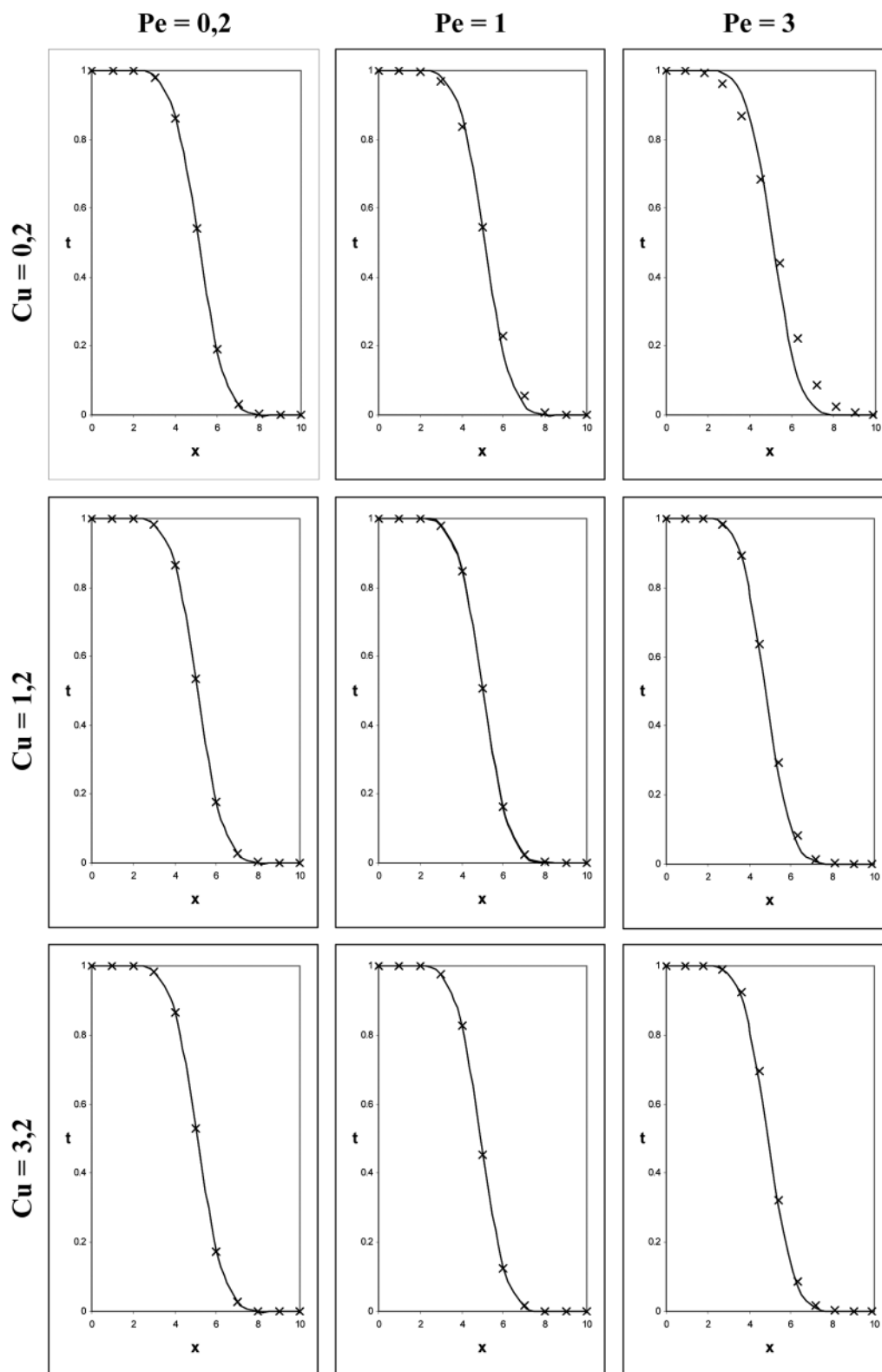


Рис. 1. Результати обчислень за лінійним методом характеристик (схема ЛМХ): — — аналітичний розв’язок; × — чисельний розв’язок

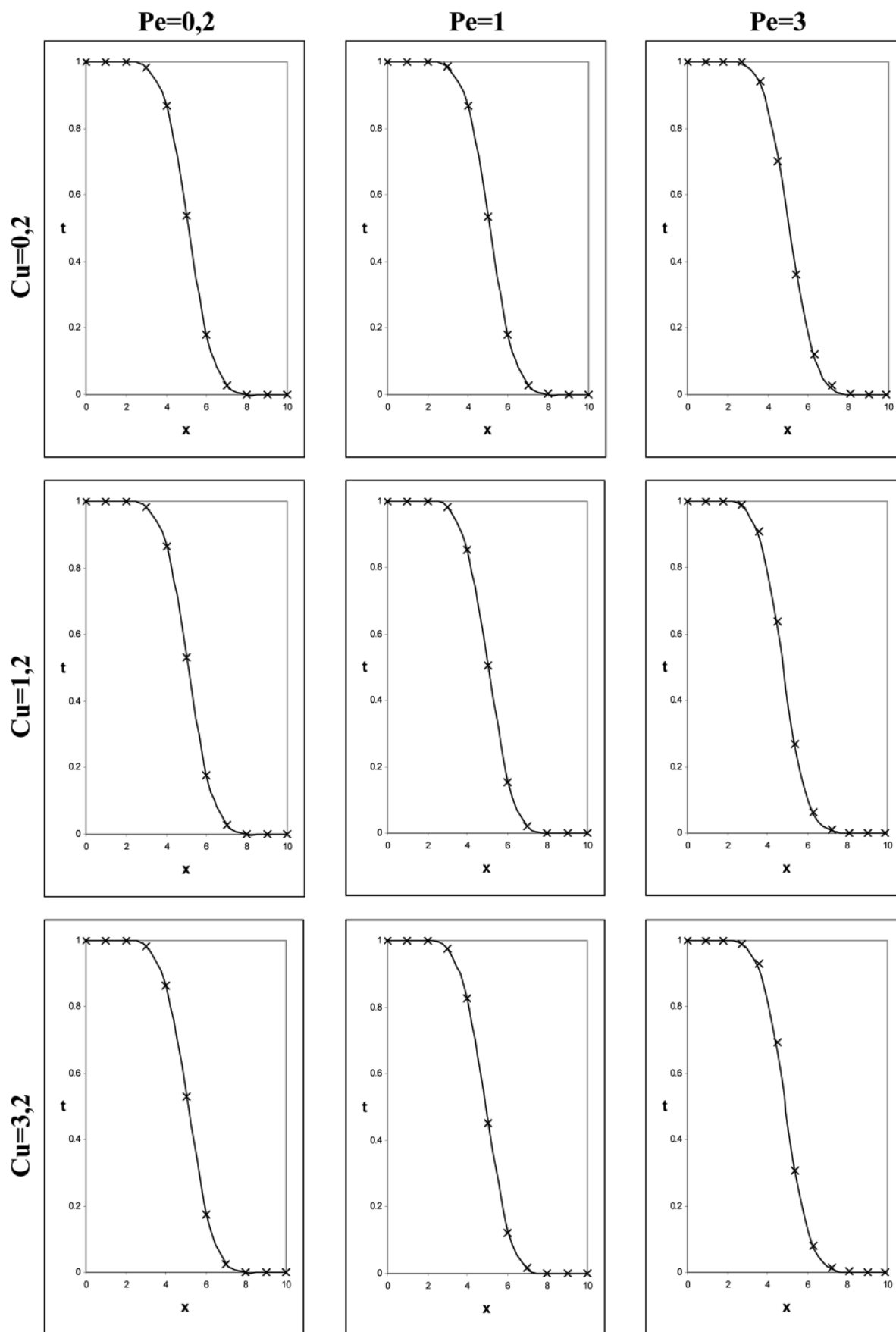


Рис. 2. Результати обчислень за квадратичним методом характеристик: — — аналітичний розв'язок; × — чисельний розв'язок

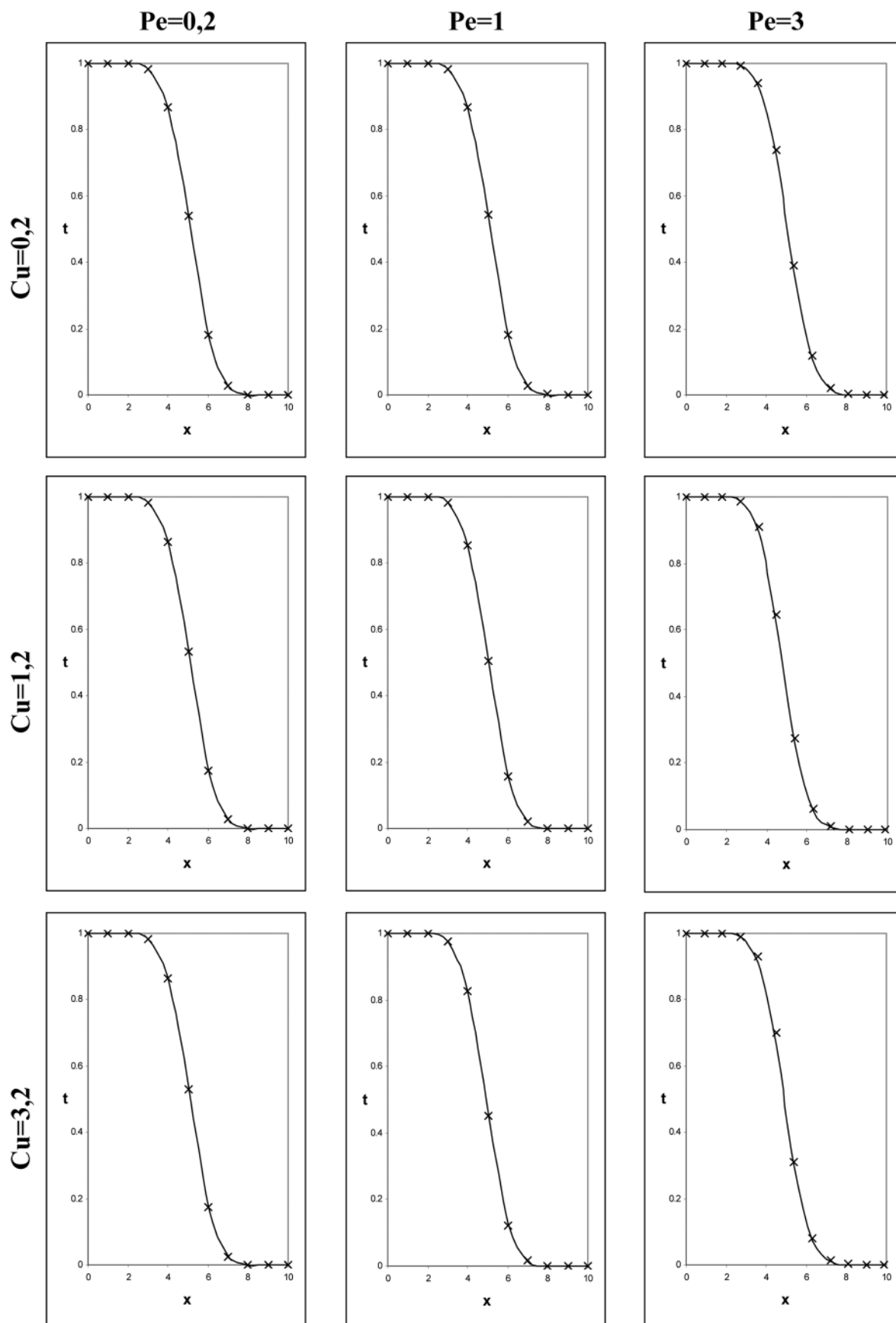


Рис. 3. Результати обчислень із використанням кубічної сплайн-інтерполяції (схема CMX): — — аналітичний розв'язок; × — чисельний розв'язок

### *Література*

1. Демченко В. Ф. Разностные схемы для уравнения конвективной диффузии. Тр. Международн. совещания «Моделирование в ядерной энергетике». – Ч. 1. – Варна, 1982. – С. 24–49.
2. Самарский А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1983. – 616 с.
3. Тригуб О. С. Застосування методу характеристик до розв'язання задач підземного масопереносу / О. С. Тригуб // Наукові записки НАУКМА. – 1999. – Т. 9 (Спец. вип.). – С. 305–311.
4. Тригуб О. С. Аналіз застосування методу сіток до чисельного розв'язання параболічних рівнянь / О. С. Тригуб // Наукові записки НАУКМА. Комп'ютерні науки. – 2003. – Т. 21. – С. 22–30.
5. Douglas J. Jr. Numerical Methods for Convection Dominated Diffusion Problems Based on Combining the Method of Characteristics with Finite Element or Finite Difference Procedures / J. Jr. Douglas, T. F. Russel // SIAM J. Numer. Anal. – 1982. – № 5. – P. 871–885.

*O. Stelya, O. Trygub, V. Lyashko*

## **THE ANALYSIS OF THE USING OF INTERPOLATION PROCEDURES IN THE IMPLEMENTATION OF THE METHOD OF CHARACTERISTICS**

*The difference schemes for convection-diffusion equation with dominant convection are considered. Schemes constructed by the method of characteristics (Lagrangian-Euler approach) are investigated. In calculating the substantive (full) derivative linear, quadratic and cubic spline – interpolation used. For all three difference schemes numerical solution of the model test problem was done. The results of calculations are presented in the form of graphs and table.*

**Keywords:** numerical experiment, difference schemes, method of characteristics, convective-diffusion equation, interpolation.

*Матеріал надійшов 27.03.2012*