Д.Я.Прессман

К построению абсолютно устойчивых схем адвективного переноса

Остановимся на анализе некоторых свойств абсолютно устойчивых аппроксимаций, использующих комбинации явных и неявных схем направленных разностей на трехточечных сеточных шаблонах, для уравнений линейного и квазилинейного переносов,. Сначала приведем известные (или легко получаемые с помощью аппарата теории разностных схем) свойства указанных аппроксимаций линейного уравнения переноса

$$\partial u/\partial t + a\cdot\partial u/\partial x = 0\,, \tag{1}$$

где a - скорость адвекции. В этом случае решение представимо в виде линейной комбинации «прогрессивных» волн вида $u = \exp(i(\sigma t + kx))$, где i - мнимая единица, а частота σ связана с волновым числом k соотношением $\sigma = -ak$. Фазовая скорость такой волны $c_{ph} = -\sigma/k = a$. Для волны, перемещающейся вправо со скоростью a>0 при k>0, выполнено σ<0. Скорость переноса энергии пакетом таких волн в рассматриваемом случае совпадает со скоростью переноса: $c_{gr} = -\partial\sigma/\partial k = a$.

Простейшим примером условно устойчивой аппроксимации уравнения (1) является явная трехточечная схема направленных разностей

$$u_0^{\Delta t} - u_0^0 + a\cdot\frac{\Delta t}{\Delta x}\cdot(u_0^0 - u_{-1}^0) = 0.$$

Здесь для решений вида $u^{n\Delta t} = \lambda^n\cdot\exp(ikx)$ множителем перехода является $\lambda = 1 - a\cdot\dfrac{\Delta t}{\Delta x}(1-\exp(-i\cdot k\cdot\Delta x))$. Если ввести обозначения $\alpha = k\cdot\Delta x$ и $r = a\cdot\dfrac{\Delta t}{\Delta x}$ для числа Куранта, то $\lambda = 1 - r\cdot(1-\cos(\alpha)) - i\cdot r\cdot\sin(\alpha)$. Квадрат модуля комплексного числа λ равен $1 + 2r(1-\cos(\alpha))\cdot(r-1)$. Отсюда следует, что при числах Куранта $r > 1$ схема становится неустойчивой. Чтобы получить фазовую скорость рассматриваемого разностного решения, перейдем к записи λ в виде $\lambda = |\lambda|\cdot(\cos(\varphi) + i\cdot\sin(\varphi)) = |\lambda|\cdot\exp(i\cdot\Delta t\cdot\sigma_f)$. Самая короткая по x волна, описываемая схемой, имеет длину $2\cdot\Delta x$, поэтому максимальное волновое число $k_{max} = \pi/\Delta x$, поэтому $0 \le \alpha \le \pi$. Отсюда следует, что при $r > 1/2$ величина $\varphi = \Delta t\cdot\sigma_f \in [0,-\pi]$, а при $r \le 1/2$ эта величина принадлежит $[0,-\pi/2]$. Таким образом, $\varphi = \mathrm{Arctg}\dfrac{-r\cdot\sin(\alpha)}{1 - r\cdot(1-\cos(\alpha))}$, где Arctg при $r > 1/2$ содержит две полуветви (от 0 до $-\pi/2$ и от $-\pi/2$ до $-\pi$), имеющие общую асимптоту, и одну полуветвь (от 0 до $-\pi/2$) при $r \le 1/2$. Фазовой скоростью разностного решения служит $c_{phf} = -\sigma_f/k = -\dfrac{1}{\Delta t\cdot k}\mathrm{Arctg}\dfrac{-r\cdot\sin(\alpha)}{1 - r\cdot(1-\cos(\alpha))}$. В отличие от исходного дифференциального уравнения эта скорость (если $r \ne 1$) различна для разных длин волн, так что разностное уравнение дисперсионно.

Аналогично рассматривается абсолютно устойчивая знакоопределенная неявная трехточечная схема направленных разностей $u_0^{\Delta t} - u_0^0 + a\cdot\dfrac{\Delta t}{\Delta x}\cdot(u_0^{\Delta t} - u_{-1}^{\Delta t}) = 0$.

В этом случае

$$\lambda = \frac{1 + r\cdot(1-\cos(\alpha)) - i\cdot r\cdot\sin(\alpha)}{(1 + r\cdot(1-\cos(\alpha)))^2 + (r\cdot\sin(\alpha))^2}\,, \tag{2}$$

(откуда следует абсолютная устойчивость), $\varphi = -\operatorname{arctg}\dfrac{r\cdot\sin(\alpha)}{1+r\cdot(1-\cos(\alpha))} \in [0,-\pi/2]$,

фазовая скорость $c_{phf} = \dfrac{1}{\Delta t\cdot k}\operatorname{arctg}\dfrac{r\cdot\sin(\alpha)}{1+r\cdot(1-\cos(\alpha))}$.

Из этих двух схем можно образовать четырехточечную схему направленных разностей второго порядка аппроксимации на решениях (1) с модулем множителя перехода, тождественно равным единице на всех описываемых длинах волн. Для этого с весом $\dfrac{1+r}{2r}$ нужно взять явную аппроксимацию и с весом $\dfrac{r-1}{2r}$ - неявную. При этом множитель перехода равен:

$$\lambda = \frac{\dfrac{1+r^2}{2}\cdot\cos(\alpha)+\dfrac{1-r^2}{2}+i\cdot r\cdot\sin(\alpha)}{(1+\dfrac{r-1}{2}\cdot(1-\cos(\alpha)))^2+\left(\dfrac{r-1}{2}\right)^2\cdot\sin^2(\alpha)}, \qquad (3)$$

интервалом изменения φ служит $[0,-\pi]$, а фазовая скорость $c_{phf} = -\dfrac{1}{\Delta t\cdot k}\operatorname{Arctg}\dfrac{-2\cdot r\cdot\sin(\alpha)}{1-r^2+\cos(\alpha)\cdot(1+r^2)}$. Снова при $r\neq 1$ схема дисперсионна. В [1] показано, что для волн, описываемых разностной схемой, обладающей модулем множителя перехода тождественно равным 1 на всех волнах, можно ввести понятие групповой скорости точно так же, как это делается для пакетов волн – решений дифференциального уравнения (1). Таким образом,

$$c_{grf} = -\partial\sigma_{phf}/\partial k = 2a\frac{1+r^2+\cos(\alpha)\cdot(1-r^2)}{(1-r^2+\cos(\alpha)\cdot(1+r^2))^2+4r^2\cdot\sin^2\alpha}. \qquad (4)$$

Анализ множителей перехода и фазовых скоростей для абсолютно устойчивых второй и третьей из рассмотренных схем и групповой скорости для третьей схемы дает представление о некоторых из возможных грубых несоответствий между точным и разностным решениями при больших числах Куранта. Рассмотрим пример, когда сеточная начальная функция u^0 представляет локальное возмущение, отличное от нуля только в одной точке x_0, где она равна единице. Точное решение $u(t,x)$ получается из u^0 смещением положения этой единицы на расстояние $a\cdot t$.

Как следует из (2), разностное решение, отвечающее неявной трехточечной схеме направленных разностей, всюду положительно и с течением времени убывает по амплитуде при перераспределении начального возмущения сразу на всю правую полупрямую, граница которой совпадает с x_0. Убывание амплитуды происходит при том, что это распределение становится все более равномерным по x. Чем больше число Куранта, тем быстрее происходит описанное «размазывание» возмущения.

Разностное решение, отвечающее описанной выше неявной четырехточечной схеме направленных разностей, может в некоторых точках даже по знаку не совпадать с точным решением, причем, чем больше число Куранта, тем больше число таких точек. Кроме того, из выражения для скорости переноса энергии волн (4) следует, что с ростом числа Куранта эта скорость убывает, стремясь к нулю при возрастании числа Куранта для всех видов волн, кроме бесконечно длинной волны. Таким образом, можно заключить, что преимущества схемы более высокого порядка аппроксимации быстро теряются с ростом числа Куранта.

Например, при бесконечном числе Куранта в расчетах по указанной четырехточечной схеме возмущение указанного вида вообще будет стоять на месте, меняя свой знак при переходе к следующему временному шагу.

Для разностной аппроксимации линейного уравнения (1) в ситуации, когда число Куранта на сеточном интервале больше единицы, можно предложить следующую модификацию последней из описанных схем. Для этого при числах Куранта r больших единицы изменить веса при явной и неявной аппроксимации на $1/r$ и на $(1-1/r)$ соответственно. Кроме того, начальные данные разбиваются на положительную $u^+(x,0)$ и отрицательную $u^-(x,0)$ части. К каждой из частей отдельно применяется указанная схема. Полученные функции $\hat{u}^+(x,\Delta t)$ и $\hat{u}^-(x,\Delta t)$ складываются, после чего из образовавшейся суммарной функции снова выделяются положительная $\tilde{\hat{u}}^+(x,\Delta t)$ и отрицательная $\tilde{\hat{u}}^-(x,\Delta t)$ части, вообще говоря, не совпадающие с $\hat{u}^+(x,\Delta t)$ и $\hat{u}^-(x,\Delta t)$. После этого производится «множительная» коррекция функций $\tilde{\hat{u}}^+(x,\Delta t)$ и $\tilde{\hat{u}}^-(x,\Delta t)$. При ее проведении будем исходить из разностного аналога закона сохранения для уравнения (1), рассматриваемого на ограниченном отрезке (0,L) с переменной по координате x функцией $a(x)$. Это сохранение запишем в виде

$$\int u(x,t)dx = \int u(x,0)dx + \frac{\Delta t}{2} \cdot (a(0) \cdot u(0,0) - a(L) \cdot u(L,0) + \\ + a(0) \cdot u(0,\Delta t) - a(L) \cdot u(L,\Delta t)) + \Delta t \cdot \int \partial a/\partial x \cdot .5 \cdot (u(x,0) + u(x,\Delta t)) \cdot dx, \tag{5}$$

Теперь в (5) следует подставить $u^+(x,0)$ вместо $u(x,0)$ и $c^+ \cdot \tilde{\hat{u}}^+(x,\Delta t)$ вместо $u(x,\Delta t)$, где c^+ - неизвестный множитель. Подстановка позволяет найти этот множитель (ему запрещено быть меньше ноля), после чего находим окончательное значение $u^+(x,\Delta t) = c^+ \cdot \tilde{\hat{u}}^+(x,\Delta t)$. Аналогично поступаем с отрицательной частью решения.

Достоинством полученной абсолютно устойчивой схемы является то, что она при любых числах Куранта переводит положительную часть решения в положительную, отрицательную – в отрицательную, при этом для каждой из указанных частей выполнен разностный аналог соответствующего закона сохранения.

Использование схем указанного типа в случае уравнения квазилинейного переноса дополнительно затруднено необходимостью описывать распространение разрыва, возникающего, если начальные данные содержат участки с отрицательной производной по координате x. Рассмотрим пример скачка, распространяющегося в покоящейся среде. За время t в точном решении соответствующего интегрального закона сохранения (из которого получено дифференциальное уравнение $\partial u/\partial t + u \cdot \partial u/\partial x = 0$) скачок перемещается на расстояние пропорциональное $\sqrt{t}$, тогда как его амплитуда уменьшается пропорционально $1/\sqrt{t}$.

При явной аппроксимации скорости переноса можно попытаться применить вышеописанную схему и к задаче квазилинейного переноса. При больших числах Куранта при этом получается сильное торможение распространения скачка, даже если аппроксимация скорости переноса полунеявная.

Более приемлемые результаты при численном решении задачи квазилинейного переноса при больших числах Куранта по схеме направленных разностей получаются с помощью полностью неявной аппроксимации исходного для вывода уравнения $\partial u/\partial t + u \cdot \partial u/\partial x = 0$ интегрального закона сохранения

$$\frac{d}{dt}\int_0^L u(x,t)dx = \frac{u^2(0,t) - u^2(L,t)}{2}. \tag{6}$$

Опишем эту аппроксимацию и алгоритм ее применения при переходе от начального момента времени к моменту Δt. Отрезок $[0, L]$, где ищется решение, разбивается на участки четырех типов. Участки первого типа содержат сеточные интервалы $[x_k, x_{k+1}]$, такие что $u(x_k,0) \geq 0$ и $u(x_{k+1},0) \geq 0$. Для таких интервалов будем использовать аппроксимацию

$$u^{\Delta t}(x_{k+1}) - u^0(x_{k+1}) + \frac{\Delta t}{2 \cdot \Delta x} \cdot \left[(u^{\Delta t}(x_{k+1}))^2 - (u^{\Delta t}(x_k))^2\right] = 0, \tag{7}$$

которая служит определением величины

$$u^{\Delta t}(x_{k+1}) = \frac{-1 + \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \cdot (u^{\Delta t}(x_k))^2 + u^0(x_{k+1}) \cdot \frac{2\Delta t}{\Delta x}}}{\frac{\Delta t}{\Delta x}}.$$

Участки второго типа содержат сеточные интервалы $[x_k, x_{k+1}]$, такие что $u(x_k,0) \leq 0$ и $u(x_{k+1},0) \leq 0$. Для таких интервалов уравнение (7), модифицированное в соответствии со знаком начальной функции, приобретает вид

$$u^{\Delta t}(x_k) - u^0(x_k) + \frac{\Delta t}{2 \cdot \Delta x} \cdot \left[(u^{\Delta t}(x_{k+1}))^2 - (u^{\Delta t}(x_k))^2\right] = 0 \tag{8}$$

и служит определением величины

$$u^{\Delta t}(x_k) = \frac{1 - \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \cdot (u^{\Delta t}(x_{k+1}))^2 - u^0(x_k) \cdot \frac{2\Delta t}{\Delta x}}}{\frac{\Delta t}{\Delta x}}.$$

Участки третьего типа содержат сеточные интервалы $[x_k, x_{k+1}]$, такие что $u(x_k,0) \leq 0$ и $u(x_{k+1},0) \geq 0$. Для таких интервалов уравнения (7) и (8) позволяют определить величину $u^{\Delta t}(x_k) = \dfrac{1 - \sqrt{1 - u^0(x_k) \cdot \frac{2\Delta t}{\Delta x_k}}}{\frac{\Delta t}{\Delta x_k}}$ и величину

$u^{\Delta t}(x_{k+1}) = \dfrac{-1 + \sqrt{1 + u^0(x_{k+1}) \cdot \frac{2\Delta t}{\Delta x_{k+1}}}}{\frac{\Delta t}{\Delta x_{k+1}}}$, где $\Delta x_k = x_r - x_k$, $\Delta x_{k+1} = x_{k+1} - x_r$, а x_r - определяемая интерполяцией точка рассматриваемого интервала, в которой функция $u(x,0)$ обращается в нуль.

Участки третьего типа рассматриваются первыми, а соответствующие результаты расчета позволяют перейти к определению неизвестной функции в точках сетки, являющихся границами интервалов 1 и 2 типов. Очевидно, что таким образом будут перебраны все точки сетки. Следует уточнить порядок расчета для точек сетки, где

$u(x_k,0)$=0. Если такая точка изолирована, то не исключен «алгоритмический» приход в нее как слева, так и справа. В таком случае результат получается суммированием чисел, найденных по формулам (7) и (8). Если же такая точка не изолирована, то снова не исключена возможность прихода в нее как слева, так и справа. В этом случае рассматривается зона из подряд идущих интервалов, имеющих нули неизвестной функции на границах и содержащих эту точку. Внутри зоны находим вспомогательную точку, делящую зону в отношении $\sqrt{u_л / u_п}$, где $u_л$ и $u_п$ - значения $u(x,0)$ на левой и на правой границах зоны. Для точек сетки, расположенных левее вспомогательной точки расчет ведется по формулам (7), а для прочих точек – по формуле (8).

Хотя все точки сетки уже рассмотрены, следует дополнительно исследовать сеточные интервалы $[x_k, x_{k+1}]$, такие что $u(x_k,0) \geq 0$ и $u(x_{k+1},0) \leq 0$. Это делается для обеспечения перемещения скачка, расположенного между узлами, по точкам сетки. Сначала линейной интерполяцией определяем положение скачка в начальный для временного шага момент. Затем в найденной таким образом точке (x_*) по формулам, аналогичным формулам (7) и (8), находим два значения, которые складываем:

$$u^{\Delta t}(x_*) = \frac{\sqrt{1+\left(\frac{\Delta t}{\Delta x_k}\right)^2 \cdot (u^{\Delta t}(x_k))^2}}{\frac{\Delta t}{\Delta x_k}} + \frac{-\sqrt{1+\left(\frac{\Delta t}{\Delta x_{k+1}}\right)^2 \cdot (u^{\Delta t}(x_{k+1}))^2}}{\frac{\Delta t}{\Delta x_{k+1}}}.$$

Здесь $\Delta x_k = x_* - x_k$, $\quad \Delta x_{k+1} = x_{k+1} - x_*$.

Теперь меняем значение $u^{\Delta t}(x_k)$ на $\hat{u}^{\Delta t}(x_k)$. При этой замене требуем равенство величин двух разностных аналогов интеграла, взятого по шагу сетки с центром в точке x_k. Первый аналог вычисляется по формуле прямоугольников при известной величине $\hat{u}^{\Delta t}(x_k)$, а второй - по формуле $u^{\Delta t}(x_k) \cdot \Delta x / 2$ для левой половины указанного шага сетки и по формуле трапеций для правой половины с учетом величин $u^{\Delta t}(x_*)$, $u^{\Delta t}(x_k)$ и, возможно, $u^{\Delta t}(x_{k+1})$, если точка x_* находится внутри этой правой половины. Аналогичное требование выполняем при замене $u^{\Delta t}(x_{k+1})$ на $\hat{u}^{\Delta t}(x_{k+1})$.

По-видимому, расчетов по разностным схемам для уравнений квазилинейного переноса при больших числах Куранта следует избегать, однако они могут встретиться при численном решении прогностических уравнений. Например, такая ситуация может возникнуть при расчетах прогностических задач с фиксированным шагом по времени при непредусмотренно больших величинах модуля скорости ветра или при решении уравнения переноса осадков по вертикали на сетке точек, сильно сгущающихся при приближении к подстилающей поверхности. Скорость вертикального переноса той или иной фазы осадков обычно параметризуется с помощью степенной функции от массовой доли этой фазы. Алгоритм решения получающейся задачи несколько упрощается, так как здесь можно рассматривать только сеточные интервалы второго типа. Однако последовательное определение упомянутой массовой доли (при движении по точкам сетки сверху вниз) приходится проводить с помощью итерационной процедуры, поскольку теперь явно выписываемого разностного решения (в отличие от вышерассмотренного случая простейшего квазилинейного переноса) уравнения для массовой доли может не быть.

Литература

1. Trefethen L. N., Group Velocity Interpretation of the Stability Theory of Gustafsson, Kreiss and Sundstrom. J. Of Comp. Phys. 1983, 49,199-217.