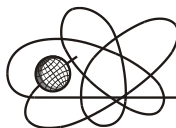




Российская Академия Наук

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

**ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ
БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ
АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ**



ИБРАЭ

RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

**NUCLEAR SAFETY
INSTITUTE**

Препринт ИБРАЭ № ИБРАЭ-2002-16

Preprint IBRAE-2002-16

В. М. Головизнин, С. А. Карабасов

**БАЛАНСНО-ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ СХЕМЫ С
РАЗНЕСЕННЫМИ КОНСЕРВАТИВНЫМИ И
ПОТОКОВЫМИ ПЕРЕМЕННЫМИ НА
МНОЖЕСТВЕ КУСОЧНО-ПОСТОЯННЫХ
НАЧАЛЬНЫХ ДАННЫХ**

Москва
2002

Moscow
2002

Головизнин В.М., Карабасов С.А. БАЛАНСНО-ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ СХЕМЫ С РАЗНЕСЕННЫМИ КОНСЕРВАТИВНЫМИ И ПОТОКОВЫМИ ПЕРЕМЕННЫМИ НА МНОЖЕСТВЕ КУСОЧНО-ПОСТОЯННЫХ НАЧАЛЬНЫХ ДАННЫХ. Препринт № ИВРАЭ-2002-16. Москва: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 2002. 19 с. — Библиогр.: 22 назв.

Аннотация

Показано, что балансно-характеристический подход к построению численных алгоритмов для гиперболических законов сохранения дает на множестве кусочно-постоянных начальных функций точное решение простейшей задачи конвективного переноса. Описаны две разных реализации соответствующего алгоритма, названного алгоритмом «прыжкового переноса». Новый алгоритм обладает следующими свойствами:

- является явным – не требует процедур решения систем линейных уравнений, в том числе и процедуры «бегущего счета»;
- определен на неизменном минимально возможном вычислительном шаблоне – оперирует величинами с двух соседних временных слоев в пределах одной расчетной ячейки;
- является консервативным и монотонным при числах Куранта, меньших единицы;
- на гладких решениях не аппроксимирует в классическом смысле исходное уравнение.

Дано обобщение алгоритма прыжкового переноса на случай неравномерных расчетных сеток и уравнение конвекции-диффузии. Приведены примеры тестовых расчетов.

©ИВРАЭ РАН, 2002

Goloviznin V.M., Karabasov S.A. BALANCE AND CHARACTERISTICS CHEMES WITH STAGGERED CONSERVATIVE AND FLUXES VARIABLES ON PIECEWISE-CONSTANT INITIAL DATES. (In Russian). Preprint IBRAE-2002-16. Moscow: Nuclear Safety Institute, July 2002. 19 p. — Refs.: 22 items.

Abstract

It is shown, that the “balance and characteristics” approach to construction of numerical algorithms for hyperbolic conservation laws gives on set piecewise – constant initial functions the exact decision of the elementary equation of convective transport. Two different realizations of the corresponding algorithm named as algorithm « jumping transport » are described. The new algorithm possesses the following properties:

- is explicit – does not demand procedures of the decision of systems of the linear equations, including procedure of “the running account”;
- it is determined on constant minimally possible computing stencil – operates with grid function from two times layers within of one computational cell;
- is conservative and monotonous at CFL numbers , smaller units;
- on smooth function does not approximate the original equation in classical sense

Generalization of algorithm jumping transport on a case of non-uniform computational grids and on the convection – diffusion equation is given. Examples of test calculations are considered.

©Nuclear Safety Institute, 2002

Балансно-характеристические схемы с разнесенными консервативными и потоковыми переменными на множестве кусочно-постоянных начальных данных

Головизнин В.М., Карабасов С.А.

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ
113191, Москва, ул. Б. Тульская, 52
тел.: (095) 958-14-12, эл. почта: gol@ibrae.ac.ru

Содержание

1. Введение Equation Section 1	3
2. Балансно – характеристические схемы с разнесенными консервативными и потоковыми переменными Equation Section (Next).....	4
Кусочно-постоянные начальные данные	7
Алгоритм прыжкового переноса.....	12
Неравномерные расчетные сетки.....	14
Уравнение конвекции – диффузии	15
3. Заключение	18
4. Литература.....	18

1. Введение Equation Section 1

Проблема аккуратного расчета переноса сеточных величин на эйлеровых сетках остается в настоящее время одной из наиболее значимых проблем вычислительной гидродинамики [1,2]. Основные трудности связаны с явлениями, проявляющимися на простейшем линейном уравнении переноса с постоянными коэффициентами.

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + c \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0, \quad c = const > 0 \quad (1.1)$$

При аппроксимации этого уравнения на регулярных расчетных сетках линейными, однородными разностными схемами, возникают т.н. фазовые и амплитудные ошибки, искажающие частные решения этого уравнения - бегущие волны. Амплитудные ошибки приводят к уменьшению амплитуды гармоник, проявляющемуся в явлении *аппроксимационной вязкости*, фазовые - к разбросу в скоростях их распространения и явлению *вычислительной дисперсии*. [3]. Вычислительная дисперсия приводит к немонотонности численного решения, возникновению в процессе расчетов новых минимумов и максимумов.

Среди линейных, однородных разностных схем важное место занимают т.н. позитивные [1] схемы, для которых выполняется принцип максимума [4]. У позитивных разностных схем новые максимумы и минимумы не образуются. Классическим примером позитивной разностной схемы является схема “уголок” (Simple Upwind):

$$\frac{\varphi_i^{n+1} - \varphi_{i-1}^n}{\tau} + c \cdot \frac{\varphi_i^n - \varphi_{i-1}^n}{h} = 0 \quad (1.2)$$

Схема (1.2) является явной, двухслойной, имеет относительно большую область вычислительной устойчивости, определена на минимальном вычислительном шаблоне, обладает свойством транспортности [1] и имеет первый порядок аппроксимации. Свойство транспортности гарантирует невозможность распространения возмущений вверх по потоку и корректность учета области влияния решения, выражающееся в естественности учета граничных условий. Схема «уголок» могла бы быть признана идеальной, если бы не присущая ей высокая аппроксимационная вязкость.

Не особенно греша против истины, можно сказать, что вся история работ по сеточному переносу связана с непрекращающимися попытками построения малодиссипативных схем, которые по всем остальным свойствам как можно меньше отличались бы от схемы (1.2). Важнейшим, среди этих свойств, признается свойство монотонности, вытекающее из свойства позитивности.

Чрезвычайно важную роль в формировании направлений развития сеточно-транспортных алгоритмов сыграла теорема Годунова [5], утверждающая, что линейные, позитивные разностные схемы не могут иметь порядок аппроксимации выше первого. Теорема Годунова фактически наложила запрет на поиск приемлемого решения в классе линейных алгоритмов и направила усилия математиков на построение и исследования нелинейных разностных схем, свойства которых зависят от получаемого решения. В последние десятилетия на этом пути были получены впечатляющие результаты, связанные с развитием идей нелинейной коррекции потоков [6-13] и их применением к системам многомерных нелинейных гиперболических уравнений. Это направление не исчерпало еще всех своих потенциальных возможностей и, по всей видимости, будет оставаться магистральным в течение ближайшего ряда лет.

Совершенно новый подход к решению проблемы сеточного переноса обозначился на пути полного отказа от традиционного понятия аппроксимации – поиску решения в классе кусочно – постоянных функций [14]. Кусочно - постоянные функции можно использовать для аппроксимации непрерывных сеточных решений, но сами разностные схемы на таких функциях свойством аппроксимации обладать не будут. Раз уж теорема Годунова запрещает искать монотонные схемы среди схем повышенного порядка точности, то следует искать их среди схем, вообще не обладающих аппроксимацией. Кусочно – постоянные решения естественным образом возникают при т.н. «балансно – характеристическом» подходе к построению разностных схем [15]. В настоящей работе показано, что балансно- характеристические схемы на классе кусочно – постоянных функций дают точное (не улучшаемое) сеточное решение задачи (1.1) в смысле интегральных средних по ячейке.

Показано, как предложенный подход обобщается и на более сложные уравнения, например, одномерное уравнение конвекции – диффузии:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \cdot (c \cdot \varphi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right), \quad c = c(x) \quad (1.3)$$

В данной работе мы сознательно ограничились относительно простыми случаями, поскольку только на них особенности нового алгоритма можно представить наиболее наглядно и обозримо. Нам представляется, что уже сам факт существования точных алгоритмов даже для простейших случаев заслуживает определенного внимания и может быть предметом специальной публикации.

2. Балансно – характеристические схемы с разнесенными консервативными и потоковыми переменными **Equation Section (Next)**

В работе [15] предложен новый подход к построению разностных схем для уравнения конвективного переноса (1.1), одной из характерных черт которого является использование двух типов переменных, т.н. «консервативных», отвечающих за соблюдение закона сохранения, и «потоковых» - определяющих перенос между соседними ячейками. При этом потоковые переменные φ_i^n относятся к узлам пространственно – временной расчетной сетки с целыми индексами, консервативные - $\Theta_{i+1/2}^{n+1/2}$ - к сере-

динам расчетных ячеек. Здесь и далее индекс n обозначает номер временного слоя, i - номер узла, h - шаг сетки по пространственной переменной, τ - шаг по времени.

Основу балансно – характеристических алгоритмов с разнесенными консервативными и потоковыми переменными составляет сеточное уравнение баланса, представляющее собой консервативную схему «крест»

$$\frac{\Theta_{i+1/2}^{n+1/2} - \Theta_{i+1/2}^{n-1/2}}{\tau} + \frac{c \cdot \Phi_{i+1}^n - c \cdot \Phi_i^n}{h} = 0, \quad (2.1)$$

аппроксимирующую на гладких решениях исходное уравнение (1.1) со вторым порядком точности. Для замыкания этого уравнения, необходимо задать какое - либо соотношение, типа:

$$\Phi_{i+1}^{n+1} = f(\Phi_{i+1}^n, \Phi_i^n, \Theta_{i+1/2}^{n+1/2}) \quad (2.2)$$

связывающее консервативные и потоковые переменные на однородном, компактном вычислительном шаблоне. Для линейных балансно – характеристических схем эта связь должна быть линейной:

$$\Phi_{i+1}^{n+1} = a_1 \cdot \Phi_{i+1}^n + a_2 \cdot \Phi_i^n + a_3 \cdot \Theta_{i+1/2}^{n+1/2} \quad (2.3)$$

Примерами линейных балансно – характеристических схем служат схема «КАБАРЕ», для которой

$$\Phi_{i+1}^{n+1} = 2 \cdot \Theta_{i+1/2}^{n+1/2} - \Phi_{i+1}^n \quad (2.4)$$

и схема BCSSCFV-2, определяемая соотношением:

$$\Phi_{i+1}^{n+1} = -r \cdot \Phi_i^n + \frac{(1-r)^2}{(1+r)} \cdot \Phi_{i+1}^n + \frac{4r}{(1+r)} \cdot \Theta_{i+1/2}^{n+1/2}, \quad r = \frac{c \cdot \tau}{h} \quad (2.5)$$

где r - Число Куранта.

Выражение (2.3) можно трактовать как снос по характеристике в узел с номером $(i+1, n+1)$ значения Φ из точки B (рис.1), расположенной на промежуточном временном слое: $\Phi_{i+1}^{n+1} = \Phi(B)$. Значение же функции в точке B в первом случае определяется линейной экстраполяцией по точкам A и C , во втором – квадратичной интерполяцией по точкам A, C и D .

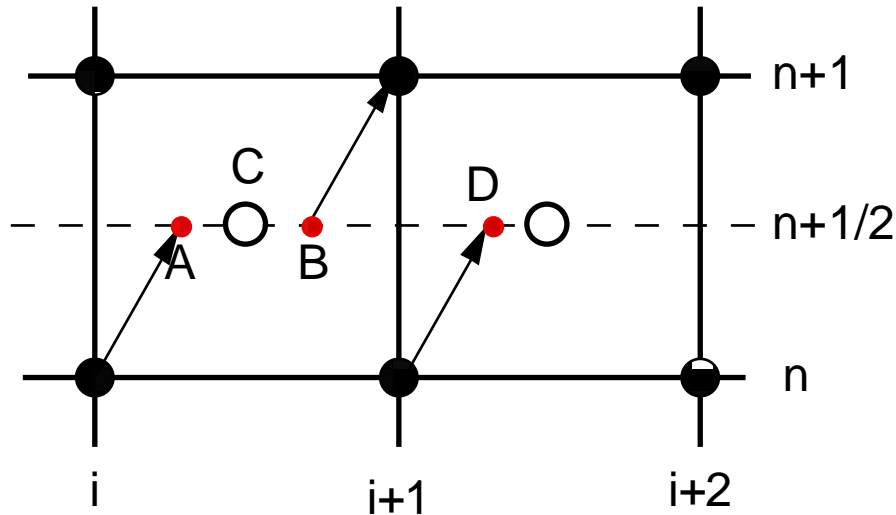


Рис.1

В обоих случаях новое значение потоковой переменной находится со вторым порядком точности, и схемы оказываются устойчивыми при условии $r \leq 1$.

Описанные схемы обладают рядом специфических особенностей [15,16, 17], среди которых следует, прежде всего, отметить их улучшенные, по сравнению с классическими линейными разностными схемами [1,3], диссипативные и дисперсионные характеристики.

Кроме того, приведенные схемы, несмотря на двухслойную форму записи, являются по – существу трех-слойными, и требуют задания специальной стартовой процедуры для определения значений консервативных переменных на первом промежуточном временном слое:

$$\frac{\Theta_{i+1/2}^{1/2} - \Theta_{i+1/2}^0}{\tau/2} + \frac{c \cdot \varphi_{i+1}^0 - c \cdot \varphi_i^0}{h} = 0, \quad \varphi_i^0 = \frac{\Theta_{i+1/2}^0 + \Theta_{i-1/2}^0}{2} \quad (2.6)$$

Здесь основными переменными считаются консервативные и именно их значения задаются в нулевой момент времени в качестве начальных условий.

Линейные балансно – характеристические схемы не являются монотонными и для них разработан специальный алгоритм нелинейной коррекции [15]. Важной его особенностью является то, что он использует только информацию, содержащуюся в данной расчетной ячейке – коррекция не приводит к расширению вычислительного шаблона. Основанием для корректировки результатов, полученных по линейной схеме, служит нарушение достаточных условий монотонности

$$\begin{aligned} -\varphi_{i+1/2}^n \leq \varphi_{i+1}^{n+1} \leq +\varphi_{i+1/2}^n, \quad -\varphi_{i+1/2}^n \leq \Theta_{i+1/2}^{n+1/2} \leq +\varphi_{i+1/2}^n \\ -\varphi_{i+1/2}^n = \min(\varphi_{i+1}^n, \varphi_i^n), \quad +\varphi_{i+1/2}^n = \max(\varphi_{i+1}^n, \varphi_i^n) \end{aligned} \quad (2.7)$$

(принципа максимума) в пределах данного конечного элемента. Коррекция осуществляется в степени, минимально необходимой для восстановления достаточных условий монотонности. При этом коррекции подвергаются как конвективные потоки, так и консервативные переменные. Считая результаты, полу-

ченны по линейным схемам предварительными и обозначая их как $\tilde{\varphi}_{i+1}^{n+1}$ и $\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2}$, процедуру нелинейной коррекции можно записать как:

$$\varphi_{i+1}^{n+1} = \begin{cases} \tilde{\varphi}_{i+1}^{n+1} & \text{if } (-\varphi_{i+1/2}^n < \tilde{\varphi}_{i+1}^{n+1} < +\varphi_{i+1/2}^n) \\ +\varphi_{i+1/2}^n & \text{if } (\tilde{\varphi}_{i+1}^{n+1} \geq +\varphi_{i+1/2}^n) \\ -\varphi_{i+1/2}^n & \text{if } (\tilde{\varphi}_{i+1}^{n+1} \leq -\varphi_{i+1/2}^n) \end{cases} \quad (2.8)$$

$$\Theta_{i+1/2}^{n+1/2} = \begin{cases} \tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} & \text{if } (-\varphi_{i+1/2}^n \leq \tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} \leq +\varphi_{i+1/2}^n) \\ -\varphi_{i+1/2}^n & \text{if } (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} < -\varphi_{i+1/2}^n) \\ +\varphi_{i+1/2}^n & \text{if } (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} > +\varphi_{i+1/2}^n) \end{cases} \quad (2.9)$$

Для сохранения свойства консервативности схем, величина возникающего дисбаланса консервативной переменной переправляется в соседнюю подветренную ячейку. С учетом последнего обстоятельства, алгоритм (2.9) может быть представлен в следующей редакции:

$$\Theta_{i+1/2}^{n+1/2} = \tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} - (W_{i+1}^{n+1/2} - W_i^{n+1/2}),$$

$$W_{i+1}^{n+1/2} = \begin{cases} 0 & \text{if } (-\varphi_{i+1/2}^n \leq \tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} \leq +\varphi_{i+1/2}^n) \\ (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} - -\varphi_{i+1/2}^n) & \text{if } (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} < -\varphi_{i+1/2}^n) \\ (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} - +\varphi_{i+1/2}^n) & \text{if } (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} > +\varphi_{i+1/2}^n) \end{cases} \quad (2.10)$$

Величины $W_{i+1}^{n+1/2}$ получили название [14] «возвратно – транзитных» потоков.

Тестовые расчеты показывают, что балансно – характеристические схемы «КАБАРЕ» и BCSSCFV-2 с описанной процедурой нелинейной монотонизации, на разрывных решениях не уступают, а на гладких решениях заметно превосходят схемы высокой разрешающей способности, основанные на нелинейной коррекции потоков с лимитерами MinMod и SuperBee [18].

Кусочно-постоянные начальные данные

Балансно- характеристические схемы с разнесенными консервативными и потоковыми переменными приводят к качественно новым результатам с случае кусочно-постоянных начальных данных.

Пусть в момент времени t_k в ячейке заданы значения консервативной $\Theta_{i+1/2}^k$ и двух потоковых переменных $\varphi_{i+1}^k, \varphi_i^k$, такие, что $\Theta_{i+1/2}^k \in [\varphi_{i+1}^k, \varphi_i^k]$. Если априори известно, что функция $\varphi(t^*, x)$ в пределах данной ячейки является кусочно постоянной и имеет не более одного разрыва, то подсеточное положение этого разрыва x^d однозначно определяется выражением:

$${}^d x_{i+1/2}^k = x_i + h \cdot \left(\frac{\Theta_{i+1/2}^k - \Phi_{i+1}^k}{\Phi_i^k - \Phi_{i+1}^k} \right) \quad (2.11)$$

Это следует из геометрической интерпретации, представленной на рис.2.

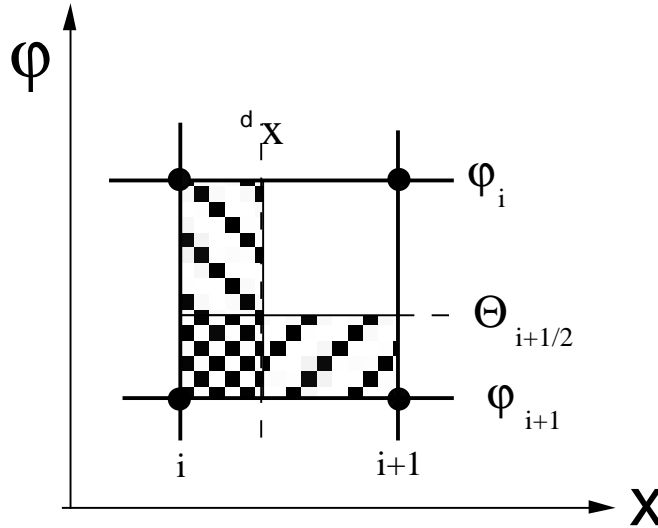


Рис.2

Зададим в качестве начальных данных кусочно постоянную функцию, непрерывную и равную $\Theta_{i+1/2}^0$ во внутренних точках каждой расчетной ячейки и имеющую разрывы на ее границах. Начальные значения потоковых переменных определим как:

$$\Phi_i^0 = \begin{cases} \Theta_{i-1/2}^0 & \text{if } (c > 0) \\ \Theta_{i+1/2}^0 & \text{if } (c \leq 0) \end{cases} \quad (2.12)$$

Покажем, как строго следуя балансно - характеристическому подходу можно получить линейный однородный вычислительный алгоритм, приводящий к точному решению задачи о переносе кусочно – постоянной функции.

У точного решения задачи (1.1) на кусочно – постоянных начальных данных потоковые величины в каждом узле расчетной сетки также будут кусочно постоянными функциями времени. Действительно, характеристики, приходящие в каждый узел, всегда приносят туда кусочно – постоянные значения точного решения. Это, в частности, свидетельствует о том, что при вычислении новых значений потоковых переменных в рамках балансно – характеристического подхода следует исключить любые интерполяционные или экстраполяционные процедуры.

Для простоты изложения потоковые и консервативные переменные будем относить к одним и тем же временным слоям с целыми индексами. Пусть в произвольный момент времени t_n выполняется условие «монотонности»

$$-\varphi_{i+1/2}^n < \Theta_{i+1/2}^n < +\varphi_{i+1/2}^n, \quad (2.13)$$

функция $\varphi(x, t_{n+1/2})$ является кусочно постоянной, имеющей в пределах каждой ячейки не более одного разрыва и выполнено условие однородности локализации этого разрыва во всех ячейках:

$$\left(\frac{\Theta_{i+1/2}^n - \varphi_{i+1}^n}{\varphi_i^n - \varphi_{i+1}^n} \right) = \text{const}_{(n+1/2)} \quad (2.14)$$

Проинтегрируем исходное уравнение (1.1) по контрольному объему (рис.3)

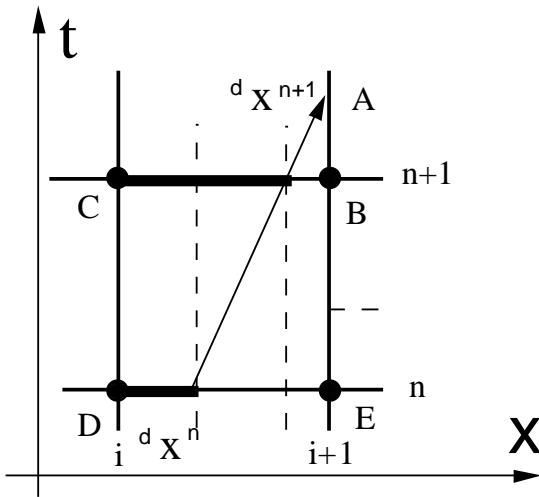


Рис. 3

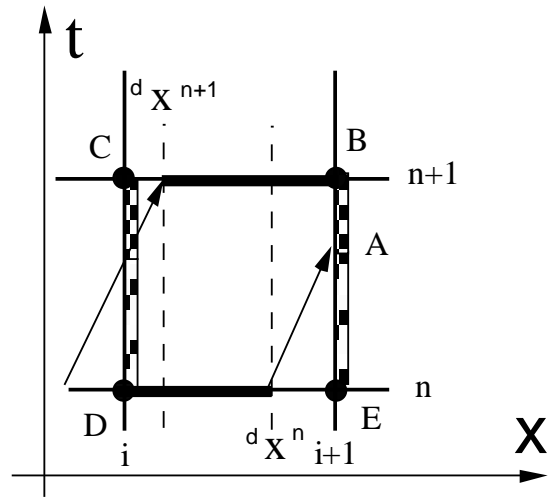


Рис.4

$$\frac{\Theta_{i+1/2}^{n+1} - \Theta_{i+1/2}^n}{\tau} + \frac{Flux_{i+1}^{n+1/2} - Flux_i^{n+1/2}}{h} = 0, \quad \Theta_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{h} \cdot \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi(x, t_{n+1}) \cdot dx \quad (2.15)$$

и, исходя из известного точного решения, вычислим значения конвективных потоков

$$Flux_i^{n+1/2} = \frac{c}{\tau} \cdot \int_{t_n}^{t_{n+1}} \varphi(x_i, t) \cdot dt \quad (2.16)$$

Найдем точку $A = (x_{i+1}, t^*)$ пересечения (рис.3) характеристики, выпущенной из точки $x_{i+1/2}^n$, с вертикальной прямой x_{i+1} . Нетрудно убедиться, что

$$t^* = t_n + \frac{h}{c} \cdot \left(\frac{\Phi_i^n - \Theta_{i+1/2}^n}{\Phi_i^n - \Phi_{i+1}^n} \right) \quad (2.17)$$

Если точка $A = (x_{i+1}, t^*)$ лежит выше временного слоя с номером $n+1$, т.е. $t^* \geq t_n + \tau$, то $\Phi(x_{i+1}, t) \equiv \Phi_{i+1}^n$, $t \in [t_{n+1}, t_n]$ и значения конвективных потоков на правой и левой границах контрольного объема соответственно равны (рис.3):

$$Flux_{i+1}^{n+1/2} = c \cdot \Phi_{i+1}^n, \quad Flux_i^{n+1/2} = c \cdot \Phi_i^n \quad (2.18)$$

Если $t^* < t_{n+1}$, то поток через правую границу будет кусочно – постоянным (рис.4) и мы получаем:

$$Flux_{i+1}^{n+1/2} = \frac{c}{\tau} \cdot \left[\Phi_{i+1}^n \cdot (t^* - t_n) + \Phi_i^n \cdot (t_{n+1} - t^*) \right] \quad (2.19)$$

Учитывая, что $c = const_1$, $h = const_2$ и разрывы во всех ячейках занимают одинаковое положение, выражение (2.19) будет справедливо для каждого узла, в том числе и для левой границы ячейки:

$$Flux_i^{n+1/2} = \frac{c}{\tau} \cdot \left[\Phi_i^n \cdot (t^* - t_n) + \Phi_{i-1}^n \cdot (t_{n+1} - t^*) \right] \quad (2.20)$$

Значения потоковых переменных на слое $(n+1)$ будет зависеть от того, выше или ниже этих точек пройдет соответствующая характеристика:

$$\Phi_{i+1}^{n+1} = \begin{cases} \Phi_{i+1}^n & \text{if } (t^* > t_{n+1}) \\ \Phi_i^n & \text{if } (t^* \leq t_{n+1}) \end{cases} \quad (2.21)$$

Подставляя (2.19),(2.20) в (2.15) можно убедиться в том, что если разрыв за один шаг по времени не доходит до правой границы ячейки, т.е. $(t^* > t_{n+1})$, то $\Theta_{i+1/2}^{n+1} = \Theta_{i+1/2}^n - r \cdot (\varphi_{i+1}^n - \varphi_i^n)$ и

$$\begin{aligned}
{}^d x_{i+1/2}^{n+1} &= x_i + h \cdot \left(\frac{\Theta_{i+1/2}^{n+1} - \varphi_{i+1}^{n+1}}{\varphi_i^{n+1} - \varphi_{i+1}^{n+1}} \right) = x_i + h \cdot \left(\frac{\Theta_{i+1/2}^{n+1} - \varphi_{i+1}^n}{\varphi_i^n - \varphi_{i+1}^n} \right) = \\
&= x_i + h \cdot \left[\frac{(\Theta_{i+1/2}^n - r \cdot (\varphi_{i+1}^n - \varphi_i^n)) - \varphi_{i+1}^n}{\varphi_i^n - \varphi_{i+1}^n} \right] = \\
&= x_i + h \cdot \left(\frac{\Theta_{i+1/2}^{n+1} - \varphi_{i+1}^{n+1}}{\varphi_i^{n+1} - \varphi_{i+1}^{n+1}} \right) + c \cdot \tau = {}^d x_{i+1/2}^n + c \cdot \tau
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Если же разрыв пересекает правую границу ячейки, то из (2.19),(2.20) можно представить в виде :

$$\begin{aligned}
Flux_{i+2}^{n+1/2} &= \frac{h}{\tau} \cdot \Theta_{i+3/2}^n - \left(\frac{h - c \cdot \tau}{\tau} \right) \cdot \varphi_{i+1}^n \\
Flux_{i+1}^{n+1/2} &= \frac{h}{\tau} \cdot \Theta_{i+1/2}^n - \left(\frac{h - c \cdot \tau}{\tau} \right) \cdot \varphi_i^n
\end{aligned} \tag{2.23}$$

и (2.15) следует, что

$$\Theta_{i+3/2}^{n+1} = \Theta_{i+1/2}^n + \left(\frac{h - c \cdot \tau}{h} \right) \cdot (\varphi_{i+1}^n - \varphi_i^n) \tag{2.24}$$

Новое положение разрыва в ячейке с номером $(i + 3/2)$ определится выражением:

$$\begin{aligned}
{}^d x_{i+3/2}^{n+1} &= x_{i+1} + h \cdot \left(\frac{\Theta_{i+3/2}^{n+1} - \varphi_{i+2}^{n+1}}{\varphi_{i+1}^{n+1} - \varphi_{i+2}^{n+1}} \right) = x_{i+1} + h \cdot \left(\frac{\Theta_{i+3/2}^{n+1} - \varphi_{i+1}^n}{\varphi_i^n - \varphi_{i+1}^n} \right) = \\
&= x_i + h + h \cdot \left(\frac{\Theta_{i+1/2}^n - \varphi_{i+1}^n}{\varphi_i^n - \varphi_{i+1}^n} \right) - (h - c \cdot \tau) = {}^d x_{i+1/2}^n + c \cdot \tau
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Таким образом, в обоих случаях, новое положение разрыва на подсеточном уровне, при $r \leq 1$, будет удовлетворять условию:

$$x^*(t_{n+1}) = x^*(t_n) + c \cdot \tau$$

т.е. за один временной шаг разрыв переместиться в точном соответствии с аналитическим решением . Точному аналитическому решению будут также соответствовать значения всех консервативных и потоковых переменных.

Алгоритм прыжкового переноса

Описанная процедура по существу является проектированием аналитического решения на заданные сеточные множества. В то же время, она может быть представлена в виде вычислительного алгоритма, весьма близкого к схемам высокой разрешающей способности [7-13]. Представим этот алгоритм в виде трех следующих этапов:

Первый этап - согласование начальных значений консервативных и потоковых переменных:

$$\Phi_i^0 = \begin{cases} \Theta_{i-1/2}^0 & \text{if } (c > 0) \\ \Theta_{i+1/2}^0 & \text{if } (c \leq 0) \end{cases} \quad (2.26)$$

Второй этап – вычисление интегральных значений конвективных потоков и интегрирование уравнения баланса:

$$Flux_{i+1}^{n+1/2} = \frac{c}{\tau} \cdot \left[\Phi_{i+1}^n \cdot (t^* - t_n) + \Phi_i^n \cdot (t_{n+1} - t^*) \right], \quad t^* = t_n + \frac{h}{c} \cdot \left(\frac{\Phi_i^n - \Theta_{i+1/2}^n}{\Phi_i^n - \Phi_{i+1}^n} \right) \quad (2.27)$$

$$\frac{\Theta_{i+1/2}^{n+1} - \Theta_{i+1/2}^n}{\tau} + \frac{Flux_{i+1}^{n+1/2} - Flux_i^{n+1/2}}{h} = 0 \quad (2.28)$$

Третий этап- вычисление новых значений потоковых переменных:

$$\Phi_{i+1}^{n+1} = \begin{cases} \Phi_{i+1}^n & \text{if } (t^* > t_{n+1}) \\ \Phi_i^n & \text{if } (t^* \leq t_{n+1}) \end{cases} \quad (2.29)$$

Алгоритм (2.26)-(2.29) является явным, линейным, монотонным и совершенно точным при условии $r \leq 1$. Приведенную выше форму его представления будем называть «первой формой»

В алгоритме (2.26)-(2.29) потоковые переменные изменяются скачкообразно: при переходе на новый временной слой их значения либо остаются неизменными, либо переносятся из надветренного узла. При динамической визуализации решения профиль потоковых переменных перемещается прыжками, которые тем заметнее, чем меньше число Куранта. По этой причине алгоритм (2.26)-(2.29) был

назван «алгоритмом прыжкового переноса» [14]. Следует отметить, что консервативные переменные изменяются при этом непрерывным образом.

Алгоритм прыжкового переноса изначально был получен из других соображений [14] в форме, близкой к алгоритму для схемы «КАБАРЕ» с нелинейной коррекцией. Вторую форму алгоритма прыжкового переноса удобно представить в виде следующих четырех этапов:

Первый этап – стартовая процедура. Задание начальных данных для консервативных и потоковых переменных на нулевом временном слое

$$\Theta_{i+1/2}^0 = \frac{1}{h_{i+1/2}} \cdot \int_{x_i}^{x_{i+1}} f_1(x) \cdot dx, \quad \Phi_i^0 = \begin{cases} \Theta_{i-1/2}^0 & \text{if } (c > 0) \\ \Theta_{i+1/2}^0 & \text{if } (c \leq 0) \end{cases} \quad (2.30)$$

Второй этап – вычисление предварительных значений консервативных переменных на основе дискретного уравнения баланса:

$$\frac{\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} - \Theta_{i+1/2}^{n-1/2}}{\tau_n} + c \cdot \frac{\Phi_{i+1}^n - \Phi_i^n}{h_{i+1/2}} = 0, \quad \tau_n = (t_{n+1/2} - t_{n-1/2}) \quad (2.31)$$

Третий этап – вычисление новых значений потоковых переменных:

$$\Phi_{i+1}^{n+1} = \begin{cases} \Phi_{i+1}^n & \text{if } (-\Phi_{i+1/2}^n < \tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} < +\Phi_{i+1/2}^n) \\ +\Phi_{i+1/2}^n & \text{if } (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} \geq +\Phi_{i+1/2}^n) \\ -\Phi_{i+1/2}^n & \text{if } (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} \leq -\Phi_{i+1/2}^n) \end{cases} \quad (2.32)$$

Четвертый этап – коррекция консервативных переменных при нарушении монотонности консервативных и потоковых величин в пределах каждой ячейки:

$$\Theta_{i+1/2}^{n+1/2} = \tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} - [W_{i+1}^{n+1/2} - W_i^{n+1/2}] \quad (2.33)$$

где

$$W_{i+1}^{n+1/2} = \begin{cases} 0 & \text{if } (-\Phi_{i+1/2}^n \leq \tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} \leq +\Phi_{i+1/2}^n) \\ (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} - +\Phi_{i+1/2}^n) & \text{if } (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} > +\Phi_{i+1/2}^n); \\ (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} - -\Phi_{i+1/2}^n) & \text{if } (\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1/2} < -\Phi_{i+1/2}^n) \end{cases} \quad (2.34)$$

Основное отличие второй формы представления алгоритма прыжкового переноса состоит в том, что в ее основу кладется консервативная схема «крест» с классическими конвективными потоками. Отклонение этих потоков от их точных величин (2.27) проявляется в том, что предварительные значения консервативных переменных выходят за пределы, отведенные им достаточным условием принципа максимума(2.7).

Возникающая при этом ошибка полностью компенсируется за счет «возвратно-транзитных» потоков (2.34). Нарушение или соблюдение достаточного условия принципа максимума служит также и критерием для определения новых значений потоковых переменных, что в точности совпадает с условием (2.29).

В обоих представлениях алгоритм прыжкового переноса является линейным – для него справедлив принцип суперпозиции. Как уже отмечалось, он является точным на достаточно произвольных ступенчатых функциях, в том числе и на сеточной «дельта –функции» представляющей собой максимально возможную на сеточном уровне сингулярность.

Алгоритм (2.30)-(2.34) обладает следующими свойствами:

- при числах Куранта меньших единицы обеспечивает соблюдение принципа максимума, т.е. обладает свойством монотонности;
- обладает свойством консервативности (дивергентности);
- является явным – не требует процедур решения систем линейных уравнений, в том числе и процедуры «бегущего счета»;
- определен на неизменном минимально возможном вычислительном шаблоне - оперирует величинами с двух соседних временных слоев в пределах одной расчетной ячейки;
- приводит к точному решению уравнения (1.1) на кусочно – постоянных начальных данных, имеющих не более одного разрыва на расчетную ячейку;
- на гладких решениях не аппроксимирует в классическом смысле исходное уравнение .

Неравномерные расчетные сетки

Вторая форма алгоритма прыжкового переноса (2.30)-(2.34) записана с учетом неравномерности пространственно - временных расчетных сеток. Существенное отличие от равномерных сеток будет проявляться только в том случае, если в процессе вычислений, в крупной ячейке окажется более одного разрыва. В этом случае алгоритм приведет к устранению одного из разрывов и корректировке потоковой переменной, следующей из требования безусловной консервативности. Такой процесс, достаточно условно, можно связать со специфическим проявлением сеточной дисперсии, полностью отсутствующей на равномерных пространственных сетках.

Для иллюстрации этого явления рассмотрим задачу о переносе гладкого начального профиля

$$\varphi(x, t_0) = \exp\left[-(x-10)^2 / 7\right] + \exp\left[-(x-20)^2 / 7\right] \quad (2.35)$$

на неравномерной сетке, сгенерированной с помощью датчика случайных чисел таким образом, чтобы отношение размеров максимальной ячейки к минимальной не превышало трех. На рис. 5 Приведена гистограмма такой сетки, состоящей из 100 ячеек. Полная длина области расчета при этом оказалась равной $L = 191$. Задача решалась как периодическая, так что можно было проследить, что станет с переносимой функцией при очень больших временах расчета.

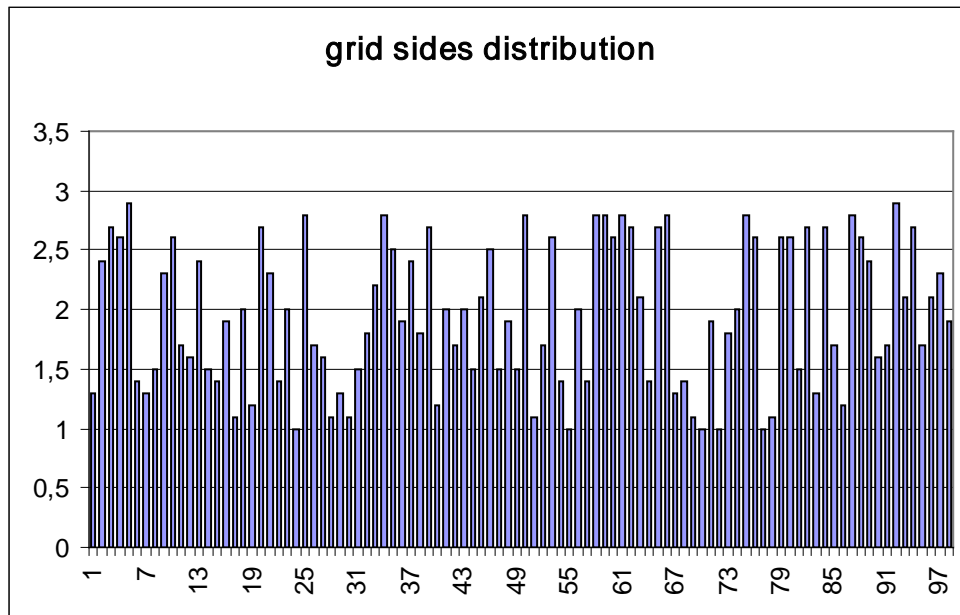


Рис.5

При проектировании начального профиля (2.35) на множество кусочно постоянных (ступенчатых) функций, исходный профиль несколько деформируется и имеет вид, представленный на рис.6

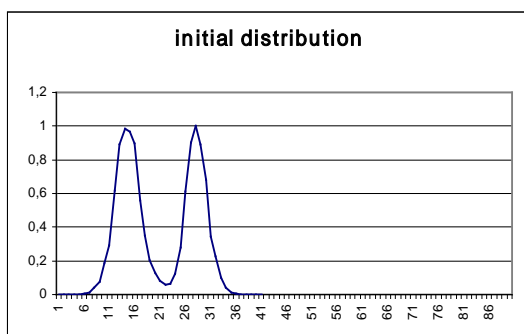


Рис.6

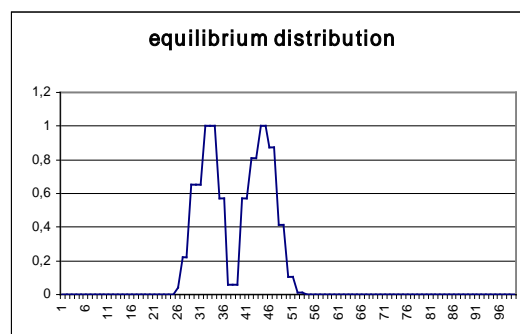


Рис.7

Результаты показывают, что с течением времени часть начальной информации о функции теряется и профиль становится менее гладким. При числе временных шагов 10^6 и $\max(r_{i+1/2}) = 0.6$ он выходит на «равновесную» форму, представленную на рис. 7. Никаких диссипативных сеточных эффектов при этом не наблюдается.

Уравнение конвекции – диффузии

Алгоритму прыжкового переноса можно придать более компактную форму записи, представив его в операторном виде:

$$\begin{aligned}
\frac{\bar{\Theta}^{n+1} - \bar{\Theta}^n}{\tau^n} + L_{\omega}(\bar{\Theta}^n, \bar{\Phi}^n) &= 0; \\
\frac{\bar{\Phi}^{n+1} - \bar{\Phi}^n}{\tau^n} + L_{\omega}(\bar{\Theta}^n, \bar{\Phi}^n) &= 0;
\end{aligned}
\tag{2.36}$$

где L_{ω}, L_{ω} однородные операторы, линейные на решениях системы (2.36) и отображающие на сеточные множества $\omega, \bar{\omega}$ пары сеточных вектор - функций, определенных в полужелтых и желтых узлах расчетной сетки.

Опираясь на представление (2.36) и идею расщепления по физическим процессам, обобщение алгоритма прыжкового переноса на случай уравнения конвекции- диффузии (1.3) представим в виде двух последовательных этапов: фазы конвекции

$$\begin{aligned}
\frac{\tilde{\Theta}^{n+1} - \tilde{\Theta}^n}{\tau^n} + L_{\omega}(\tilde{\Theta}^n, \tilde{\Phi}^n) &= 0; \\
\frac{\tilde{\Phi}^{n+1} - \tilde{\Phi}^n}{\tau^n} + L_{\omega}(\tilde{\Theta}^n, \tilde{\Phi}^n) &= 0;
\end{aligned}
\tag{2.37}$$

и фазы диффузионного переноса

$$\begin{aligned}
\frac{\Theta_{n+1/2}^{n+1} - \tilde{\Theta}_{n+1/2}^{n+1}}{\tau^n} &= \sigma \cdot \Lambda_{i+1/2}^{\omega} \cdot \tilde{\Theta}^{n+1} + (1-\sigma) \cdot \Lambda_{i+1/2}^{\omega} \cdot \tilde{\Theta}^{n+1}, \quad \sigma \in [0,1] \\
\Lambda_{i+1/2}^{\omega} \cdot \tilde{\Theta} &= \frac{1}{h^2} \cdot [\mu_{i+1} \cdot (\Theta_{i+3/2} - \Theta_{i+1/2}) - \mu_i \cdot (\Theta_{i+1/2} - \Theta_{i-1/2})]
\end{aligned}
\tag{2.38}$$

с последующим переопределением конвективных переменных:

$$\Phi_i^{n+1} = \frac{\left({}^d x_{i+1/2}^{n+1} - x_i \right) \cdot \Theta_{i+1/2}^{n+1} + \left(x_i - {}^d x_{i-1/2}^{n+1} \right) \cdot \Theta_{i-1/2}^{n+1}}{{}^d x_{i+1/2}^{n+1} - {}^d x_{i-1/2}^{n+1}}
\tag{2.39}$$

где

$${}^d x_{i+1/2}^k = x_i + h \cdot \left(\frac{\tilde{\Theta}_{i+1/2}^{n+1} - \tilde{\Phi}_{i+1}^{n+1}}{\tilde{\Phi}_i^{n+1} - \tilde{\Phi}_{i+1}^{n+1}} \right)
\tag{2.40}$$

Следует отметить, что диффузионный оператор применяется только к консервативным переменным. Пересчет новых значений потоковых переменных после этапа диффузии основывается на допущении, что координаты разрывов в процессе диффузии не смещаются.

Схема (2.38) аппроксимируют диффузионный процесс с точностью $O[(\sigma - 0.5) \cdot \tau + \tau^2 + h^2]$, устойчива при

$$\frac{\mu \cdot \tau}{h^2} \leq \frac{1}{2 \cdot (1 - 2\sigma)}; \quad \sigma \in [0, 1/2] \quad (2.41)$$

и безусловно устойчива при $\sigma \geq 0.5$. Конвективный перенос при условии $\max(r_{i+1/2}) < 1$ воспроизводится точно. Это говорит о том, что точность суммарного алгоритма (2.37)-(2.40) лимитируется точностью алгоритма решения уравнения диффузии (2.38).

Для иллюстрации возможностей нового алгоритма рассмотрим начально - краевую задачу (1.3) на отрезке $x \in [0, l]$ при $c(x) = \text{const} > 0$, $\mu = \text{const} > 0$ с условиями:

$$\begin{aligned} \varphi(x, t_0) &= \frac{1}{\sqrt{t_0}} \cdot \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{4\mu \cdot t_0}\right\}, \\ \varphi(0, t) &= \frac{1}{\sqrt{t}} \cdot \exp\left\{-\frac{(c \cdot t + x_0)^2}{4\mu \cdot t}\right\}, \quad \varphi(l, t) = \frac{1}{\sqrt{t}} \cdot \exp\left\{-\frac{(l - c \cdot t - x_0)^2}{4\mu \cdot t}\right\} \end{aligned} \quad (2.42)$$

Аналитическое решение представляет собой расплывающийся волновой пакет:

$$\varphi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{t}} \cdot \exp\left\{-\frac{(x - c \cdot t - x_0)^2}{4\mu \cdot t}\right\}$$

Начальные данные при $t_0 = 1$, $\mu = 0.01$, $x_0 = 3$ изображены на рис.8. На рис.9 представлено сравнение численного и аналитического решения при $t_0 = 1$, $\mu = 0.01$, $x_0 = 3$. Число Пекле в этой задаче равно 10^3 .

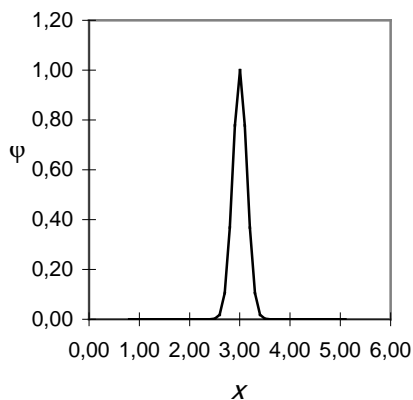


Рис.8

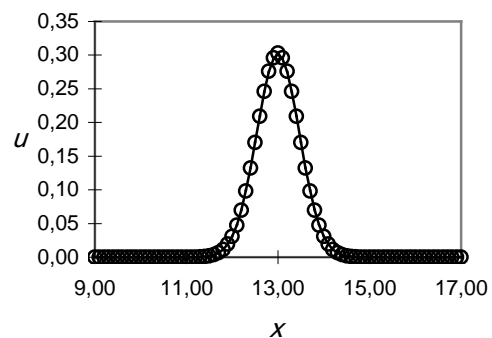


Рис.9

Заключение

Мы не приводим примеров тестовых расчетов, выполненных по алгоритму прыжкового переноса и их сравнения с другими методами по той причине, что точное решение во все моменты времени остается практически таким же, как и в начальный момент. Если рисовать графики консервативных переменных, то их отличие друг от друга заметить довольно трудно, графики потоковых переменных полностью совпадают с точностью до сдвига на целое число ячеек.

Алгоритм прыжкового переноса на равномерных сетках приводит к точному решению задачи (1.1) при условии $r \leq 1$, совпадающем с условием вычислительной устойчивости для большинства классических линейных разностных схем. Однако в нашем случае это условие является достаточным условием монотонности. Явления вычислительной неустойчивости в обычном его понимании как неограниченного экспоненциально быстрого роста коротковолновых возмущений в алгоритме прыжкового переноса не наблюдается. При нарушении критерия $r \leq 1$ текущие координаты сеточных разрывов перестают точно соответствовать решению дифференциального уравнения (1.1), и величина отклонения линейно нарастает со временем. Алгоритм теряет точность, но переполнения арифметического устройства не происходит.

Как уже отмечалось ранее, для достижения абсолютной точности, переносимая ступенчатая функция должна иметь не более одного разрыва на одну ячейку. Это ограничение не является фундаментальным и в работе [14] описана модификация алгоритма, допускающая временное существование в ячейке двух разрывов. В принципе, это количество может быть увеличено.

В настоящей работе мы не стали загромождать изложения анализом особенностей прыжкового переноса на переменном поле скоростей. Достаточно подробно этот вопрос рассмотрен в работе [14].

Представленные в работе алгоритмы допускают разнообразные интерпретации и трактовки. Их можно рассматривать как дальнейшее развитие метода характеристик [19], метода концентраций (Volume of fluid (VOF) method) [20] и как новый класс линейных разностных схем, характеризующийся кусочно-постоянной зависимостью конвективных потоков от времени.

Специального обсуждения заслуживает легко просматриваемая аналогия алгоритма прыжкового переноса с методом “крупных частиц” [21]. Роль “крупных частиц” играют частные решения в виде сеточных дельта-функций. Отличие состоит в том, что в обычном методе частиц вся информация о частице хранится независимо от расчетной сетки. В новом алгоритме она хранится на сетке и изменяется по мере перемещения частицы. В этом смысле алгоритм прыжкового переноса можно рассматривать и как дальнейшее развитие метода частиц

С точки зрения компьютерной реализации и организации массивных параллельных вычислений алгоритм прыжкового переноса сохранил все притягательные свойства схемы “уголок” (simple upwind) - двухслойность, явность, линейность, монотонность, компактность и постоянство шаблона, простоту и естественность задания граничных условий. Он легко обобщается на одномерные системы линейных гиперболических уравнений [22].

Литература

1. Роуч Р. Вычислительная гидродинамика. М. Мир, 1976.
2. Самарский А.А., Вабичев П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. Москва, Эдиторал УРСС, 1999 г., 248 с.
3. Б.Л. Рождественский, Н.Н. Яненко. Системы квазилинейных уравнений. М: Наука, 1978, 688с.
4. Самарский А.А. Теория разностных схем. М: Наука, 1989 г.
5. Godunov, S.K. A difference scheme for numerical computation of discontinuous solutions of equations of fluid dynamics, Math.Sb. 47(89), (1959), 271-306.
6. J.P.Boris, D.L.Book, K. Hain. Flux-corrected transport: Generalization of the method. J. Comput. Physics. 1975. V. 31. pp. 335-350
7. Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method. J. Comput. Physics. 1979. V.32. pp.101-137.
8. Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. J. Comput. Phys. 1983, V.49, pp. 357-393
9. Harten, S. Osher. Uniformly high-order accurate non-oscillatory schemes. I. SIAM. J. Numer. Anal. V. 24. N2. 1987.

10. . *B.P. Leonard*, Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities, *Int. J. Numer. Methods Fluids* 8, 1291 (1988)
11. *A.Harten*. ENO Schemes With Subcell Resolution. *J. Comput. Physics*, 1989, V.83, pp. 148-184.
12. *Колган В.П.* Конечно-разностная схема для расчета двумерных разрывных решений нестационарной газовой динамики. *Уч. Зап. ЦАГИЮ* 1972, т.3, №6, с. 68-77.
13. *Вязников К.В., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П., Шашков М.Ю.* Квазимонотонные разностные схемы повышенного порядка точности. М. Препринт ИПМ АН СССР им. М.В. Келдыша, 1983, №36, с. 27
14. *Головизнин В.М., Карабасов С.А.* Метод прыжкового переноса для численного решения гиперболических уравнений. Точный алгоритм для моделирования конвекции на эйлеровых сетках. Препринт ИБРАЭ №ИВРАЕ-2000-04, Москва, 2000 г., 40 с.
15. *Головизнин В.М., Карабасов С.А. Кобринский И.М.* Балансно–характеристические схемы с разделенными консервативными и потоковыми переменными. М: Математическое моделирование, в печати.
16. *В.М. Головизнин, А.А. Самарский.* Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной. //Журнал Математического моделирования, т.10 (1998), №1, с.86-100.
17. *В.М. Головизнин, А.А. Самарский.* Некоторые свойства разностной схемы “Кабаре”. //Журнал Математического моделирования, т. 10 (1998), №1, с.101-116.
18. *P. Colella, E.G. Puckett* Modern Numerical Method for Fluid Flow. Internet resources, E-mail: egpuckett@ucdavis.edu
19. *Жуков А.И.* Применение метода характеристик к численному решению одномерных задач газовой динамики. - Тр. Матем. ин-та АН СССР, 1960, 58
20. *C.W. Hirt and B.D. Nicholls*, Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, *J. Comput.Phys.* 39, 201 (1981)
21. *.P. Degond and Mas-Gallic*, The weighed particle for convection-diffusion equations. Hart.1. The case of an isotropic viscosity, *Math. Comput.* 53, 485 (1990)
22. *Головизнин В.М., Карабасов С.А., Тишкина Л.В.* Метод прыжкового переноса для численного решения систем линейных гиперболических уравнений. Москва, Препринт ИБРАЭ РАН № ИВРАЕ – 2000-06, 2000 г.