

МЕТОД ПОВЫШЕННОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ ДЛЯ РАСЧЕТА НЕГЛАДКИХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ПАССИВНОЙ СУБСТАНЦИИ

В. М. ФОМИН

*Институт вычислительных технологий СО РАН
Новосибирск, Россия*

In this article a new numerical solution method for the calculation of the air and hydrodynamics equations at the class of generalized solutions is considered. This method allows one to obtain the accuracy of solution at the class generalized solutions comparable with the accuracy of the smooth solution if central difference is used for spatial derivatives. This quality proves the suggested method to have an advantage over other methods currently used in practical applications.

В работе [1] предложен новый численный метод расчета решений уравнения переноса, имеющих особенности. Метод основан на том, что особенности, присутствующие в начальном поле, выделяются, т. е. фактически производится разложение функции, описывающей начальное поле, в точках, где есть особенность, в ряд по некоторой системе функций. Далее перемещение указанных точек прослеживается с помощью решения соответствующего уравнения в лагранжевых переменных, а для выделенной гладкой составляющей решения расчет идет в эйлеровых переменных. Автору удалось показать, что условия двух классических теорем математического анализа (теоремы Лагранжа и теоремы Тейлора о разложении в ряд) могут быть ослаблены; этот факт используется при ограничении числа специальных функций для описания особенностей. На шаблонах, содержащих одинаковое количество узлов, предложенный метод позволяет получить для негладких решений рассматриваемого уравнения тот же порядок точности, что и для решений, имеющих нужную, в общепринятом смысле, гладкость.

Формализуем иерархическую структуру особенностей. Пусть последовательность функций $\chi^n(x)$, где $(n = 1, \dots, \infty)$, задается формулой

$$\chi^n(x) = \begin{cases} \frac{x^n}{n!} & (\text{если } x \geq 0), \\ 0 & (\text{если } x \leq 0), \end{cases} \quad (1)$$

где $\chi^0(x)$ — функция Хевисайда. Теперь, согласно утверждению, доказанному в [1], функция, заданная на интервале $x \in [a, b]$, всюду непрерывна со своими производными любого

порядка, кроме счетного числа точек $x = c_i$ ($i = 1, \dots, I$), где она (или ее производная начиная с некоторого порядка m_i) терпит разрыв; в этом случае имеет место представление в виде суммы

$$\varphi(x) = \psi^N(x) + \sum_{i=1}^I \sum_{n=m}^N A_{i,n} \chi^n(x - c_i), \quad (2)$$

где $\psi^N(x)$ — функция, непрерывная с производными до порядка N включительно, а для постоянных A_n выполняется условие: модуль A_n — величина ограниченная. Функции $\psi(x)$ и необходимые константы рассчитываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \varphi(x) - \sum_{i=1}^I \left\{ \frac{dx^M \varphi(x)}{dx^M} \Big|_{x=c_i+} - \frac{d^M \varphi(x)}{dx^M} \Big|_{x=c_i-} \right\} \chi^M(x - c_i), \\ &\dots \\ \psi^n(x) &= \psi^{n-1}(x) - \sum_{i=1}^I \left\{ \frac{d^n \varphi(x)}{dx^n} \Big|_{x=c_i+} - \frac{d^n \varphi(x)}{dx^n} \Big|_{x=c_i-} \right\} \chi^n(x - c_i), \\ A_n &= \left\{ \frac{d^n \varphi(x)}{dx^n} \Big|_{x=c_i+} - \frac{d^n \varphi(x)}{dx^n} \Big|_{x=c_i-} \right\}, \\ &\dots \\ A_M &= \left\{ \frac{d^M \varphi(x)}{dx^M} \Big|_{x=c_i+} - \frac{d^M \varphi(x)}{dx^M} \Big|_{x=c_i-} \right\}, \\ &(M < n \leq N). \end{aligned} \quad (3)$$

$x = c_i+$ (или $x = c_i-$) означает, что значение соответствующей величины берется справа (или слева) от точки $x = c_i$. В соотношениях (3) число M равно минимальному из чисел m_i ; если для точки с определенным индексом $i : m_i > M$, то формально соотношения (3) все равно справедливы, поскольку соответствующие слагаемые обращаются в нуль.

Итак, рассмотрим одномерное уравнение адвекции

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u(x) \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0, \quad (4)$$

где x — горизонтальная координата ($x \in [0, L]$), $u(x)$ — горизонтальная компонента скорости (предполагаем, что эта функция удовлетворяет условию необходимой гладкости; будем также полагать, что она периодична, с периодом L и $u(x) > 0$); φ — искомая функция с начальным условием

$$\varphi(x, 0) = \psi(x, 0) + \omega(x, 0). \quad (5)$$

Предположим, что необходимые граничные условия заданы; кроме того, будем считать, что функция $\psi(x, 0)$ периодична, с периодом L (это позволяет упростить рассмотрение трансформации интегральных величин); функция $\psi(x, 0)$ равна нулю на левой границе области. Функция $\psi(x, 0)$ представляет гладкую часть решения. В функции ω представлены особенности.

В работе [1] показано, что для схемы второго порядка аппроксимации по обеим переменным в начальном условии должны быть представлены члены разложения (2) вплоть до члена с максимальным номером $N = 2$. Для пятиточечного шаблона $N = 4$, поскольку

гладкая мода решения в этом случае должна быть дифференцируема в области решения вплоть до четвертого порядка включительно, т. е.

$$\omega(x, 0) = \sum_{n=m}^4 A_n \chi^n(x - x_*), \quad (6)$$

причем $0 \leq x_*^0 < L$. A_n — значение скачка соответствующей производной в особой точке $x = x_*$.

Перемещение особой точки рассчитывается по уравнению характеристики

$$\frac{dx_*}{dt} = u(x_*^k), \quad (7)$$

где $u(x_*(t))$ — значение скорости в точке прохождения особенности может быть получено с помощью интерполяции необходимого порядка.

Рассмотрим поведение особенностей со временем. Далее штрихами сверху будем помечать дифференцирование функции u по переменной x . Используя уравнение (4) и операции дифференцирования справа и слева от указанной точки и учитывая тот факт, что в данной постановке задачи характеристики не пересекаются, получаем:

$$\begin{aligned} \frac{dA_0}{dt} &= 0, & \frac{dA_1}{dt} &= -u'_* A_1, & \frac{dA_2}{dt} &= -2u'_* A_2 - u''_* A_1, \\ \frac{dA_3}{dt} &= -3u'_* A_3 - 3u''_* A_2 - u'''_* A_1, \\ \frac{dA_4}{dt} &= -4u'_* A_4 - 6u''_* A_3 - 4u'''_* A_2 - u''''_* A_1. \end{aligned} \quad (8)$$

Уравнения (8) позволяют найти интегралы движения, перейдя от интегрирования вдоль траектории к интегрированию по координате x ($dx_* = u_* dt$). При этом в уравнениях (8) следует выражать коэффициенты A_n через инварианты, полученные на предыдущих шагах. В результате имеем:

$$\begin{aligned} C_0 &= A_0, & C_1 &= A_1 u_*, & C_2 &= A_2 u_*^2 + A_1 u'_* u_*, \\ C_3 &= A_3 u_*^3 - C_1 [2(u'_*)^2 - u''_* u_*] + 3C_2 u'_*, \\ C_4 &= A_4 u_* - C_1 [6(u'_*)^3 + u'''_* u_*^2 - 6u''_* u'_* u_*] - C_2 [11(u''_*)^2 - 4u''_* u'_*] + 6C_3 u'_*. \end{aligned} \quad (9)$$

Из соотношений (8) следует, что для уравнения (4) выполнено следующее утверждение: если в начальных условиях содержится разрыв ($n = 0$) или излом ($n = 1$), то такая особенность не исчезает (и не появляется, если она отсутствовала). Что касается особенностей, характеризующихся числом n , равным двум или более, здесь дело обстоит иначе: разрыв в производной низшего порядка содействует появлению (или исчезновению) разрыва в производных более высокого порядка. При этом величины A_n остаются ограниченными.

Проведенные вычисления показывают, что если начальные данные представимы в виде (5), где от нуля отличен хотя бы один коэффициент, то в решении уравнения (4) в любой момент времени можно произвести аналогичное разделение на две части: гладкую и включающую особенности.

Численная схема, предлагаемая для расчетов течений с особенностями, основана на идее применения аналитических выражений к функции $\omega(x, t)$, описывающей скачки, изломы и т. д.; в то же время к гладкой составляющей функции φ (т. е. к функции ψ) применяется разностный оператор.

Уравнение (7) решается с помощью конечных разностей. Производная по времени расписывается центральными разностями. Поскольку здесь, как и далее, требуется два начальных условия, будем полагать, что они получены с помощью схемы Эйлера. Условие Куранта — Фридрихса — Леви для рассматриваемого случая записывается так: $\Delta t \leq a \frac{\Delta x}{\max(u_i)}$, (где a — постоянная несколько меньшая единицы); оно налагает ограничение на перемещение траектории за промежуток времени $2\Delta t$. Так, если $x_{J-1} \leq x_*^k \leq x_J$ (x_*^k — уже решение конечно-разностного уравнения), то движение особой точки описывается следующими вариантами:

$$\begin{aligned} x_*^{k+1} &> x_J, & x_*^{k-1} &\leq x_{J-1}; \\ x_*^{k+1} &> x_J, & x_*^{k-1} &> x_{J-1}; \\ x_*^{k+1} &\leq x_J, & x_*^{k-1} &\leq x_{J-1}; \\ x_*^{k+1} &\leq x_J, & x_*^{k-1} &> x_{J-1}. \end{aligned} \tag{10}$$

Здесь нижний индекс означает номер точки на отрезке $x \in [0, L]$, верхний индекс — временной. Интерполяционный многочлен Лагранжа позволяет выразить правую часть уравнения (7) через значения сеточной функции u_i ($1 \leq i \leq I + 1$) (отметим, что $u_1 = u_{I+1}$).

Используя указанную интерполяцию, нетрудно установить, что уравнение (7) аппроксимируется со вторым порядком точности по времени и четвертым по пространству. Конечно-разностные свойства уравнения (7) достаточно хорошо изучены, центральные разности по времени обеспечивают устойчивость и ошибка решения (δ) может быть оценена (в норме C) так же, как и в [1]:

$$\delta = |(x_*^k - x_*(t^k))| \leq B(T)(\Delta t)^2 + C(T)(\Delta x)^4, \tag{11}$$

B и C — положительные функции аргумента T (интервала интегрирования).

В дальнейшем при получении оценок мы постараемся не приводить громоздких выкладок. Отсылаем читателя к работе [1], поскольку путь получения оценок один и тот же. Единственное отличие заключается в том, что здесь оценка точности производится без использования условия Куранта — Фридрихса — Леви. Для расчета коэффициентов A_n с необходимой точностью (четвертый порядок по пространству и второй по времени) по уравнениям (8) или (9) необходимым условием является существование интеграла по Риману от седьмой производной от скорости.

Проведенный анализ поведения особенностей во времени (формулы (8) и (9)) позволяет ввести новую функцию $\Omega(x, t)$. Замена обозначений — следствие того, что в слагаемом, содержащем особенности, расчет перемещения особой точки теперь производится в соответствии с конечно-разностным уравнением. Итак, пусть

$$\omega(x, t) = \sum_{n=m}^4 A_n(t) \chi^n(x - x_*), \tag{12}$$

далее мы можем записать дифференциальное уравнение

$$\frac{d\omega}{dt} + u \frac{d\omega}{dx} = \sum_{n=1}^4 \left(\frac{dA_n}{dt} \chi^n(x - x_*) + A_n(u - u_*) \chi^{n-1}(x - x_*) \right) \equiv W. \tag{13}$$

Поскольку $\frac{dA_0}{dt} = 0$, и $\frac{d\chi^0(x - x_*)}{dt} = 0$, член в сумме (13) с индексом, равным нулю, пропадает. Теперь мы в состоянии оценить неточность расчета функции ω , возникающую вследствие перехода от дифференциального уравнения характеристики к конечно-разностному. Рассмотрим следующий случай: пусть особенность — скачок, т. е. в функции представлен лишь единственный член суммы с индексом, равным нулю. Тогда $W \equiv 0$, и оценка отклонения решения от точного (δ) для составляющей Ω дается так:

$$\delta = \frac{1}{L} \int_0^L |\Omega^k - \omega(x - x_*^k)| dx = \frac{1}{L} |A_0(x_*^k - x_*(t^k))| \leq A_0(B(\Delta t)^2 + C(\Delta x)^4), \quad (14)$$

где B и C — функции из (11).

Чтобы провести подобную оценку для общего случая, т. е. когда в начальных данных (12) представлены другие особенности, следует предварительно провести оценку близости значений функций $A_n(t^k)$ и A_n^k , т. е. истинного и приближенного. Неравенство указанных функций обусловлено как использованием конечно-разностного уравнения характеристики, так и тем, что производные в (9) рассчитываются в конечно-разностном виде. Функции A_n могут быть рассчитаны и по уравнениям (8), если их записать с помощью конечных разностей, позаботившись о необходимом порядке аппроксимации.

Уточним наши требования на гладкость функции u . Из формул (9) вытекает, что для расчета коэффициентов A_n с необходимой точностью (четвертый порядок по переменной x) с такой же точностью должна быть рассчитана конечно-разностная производная u''' . Это означает, что функция u должна иметь непрерывную производную вплоть до шестого порядка включительно. В противном случае следует представить указанную функцию в виде ряда (2), а формулу (10) использовать лишь для гладкой составляющей, исключив особенности с номерами $N = 0, \dots, 6$. Тогда мера близости значений функций $u(x_*(t^k))$ и $u(x_*^k)$ может быть определена в соответствии с оценкой (11) в (C -норме) как

$$|u(x_*(t^k)) - u(x_*^k)| \leq D(\Delta t)^2 + E(\Delta x)^4, \quad (15)$$

где D и E — положительные функции аргумента T . Используя для аппроксимации производной по пространству функции u_* из интегралов (9) шаблон из восьми узлов ($i = J - 4, \dots, J + 3$), можно получить оценку (в норме C)

$$|A_n(t^k) - A_n^k| \sim O(\Delta t)^2 + O(\Delta x)^4 \quad (16)$$

и рассчитать неточность решения (в норме C для части решения, описывающей скачок, и в норме L_1 для оставшейся части) [1]:

$$\left| |A_n(t^k)\chi(x - x_*(t^k))A_n^k\chi^n(x - x_*^k)| \right| \leq F(\Delta t)^2 + G(\Delta x)^4, \quad (17)$$

где F и G — положительные функции T . В процессе вычислений были использованы все ранее полученные оценки. Пользуясь теми же приемами, можно также показать, что (в норме C)

$$\left\| \frac{d}{dt} [A_n(t^k)\chi(x - x_*(t^k))] - \frac{1}{2\Delta t} \times \right. \\ \left. \times [A_n^{k+1}\chi^n(x_i - x_*^{k+1}) - A_n^{k-1}\chi^n(x_i - x_*^{k-1})] \right\| \sim O(\Delta t)^2 + O(\Delta x)^4, \quad (18)$$

используя интегралы (9) и шаблон из восьми узлов для аппроксимации конечно-разностных производных.

Для того чтобы выделить из уравнения (4) уравнение для гладкой части, воспользуемся линейностью указанного уравнения и уравнением (13). Запишем уравнение для ψ сразу в конечно-разностном виде, аппроксимируя уравнение (4) центральными разностями также со вторым порядком точности по времени и четвертым порядком по пространству:

$$\frac{\psi_i^{k+1} - \psi_i^{k-1}}{2\Delta t} + u_i \left[\frac{4}{3}L_1 - \frac{1}{3}L_2 \right] \psi_i^k = -W_i^k, \quad (19)$$

где $L_1\psi_i^k = \frac{\psi_{i+1}^k - \psi_{i-1}^k}{2\Delta x}$; $L_2\psi_i^k = \frac{\psi_{i+2}^k - \psi_{i-2}^k}{4\Delta x}$.

Функция W непрерывна и дифференцируема в точке $x = x_*(\hat{t}), t = \hat{t}$ (где \hat{t} — произвольный момент времени) необходимое число раз: $W \sim O(t - \hat{t})^2 + O(x - x_*)^4$ при $x \rightarrow x_*$ справа и при $t \rightarrow \hat{t}$ слева, что легко проверяется анализом уравнений (8,9, 13). Условие Куранта — Фридрихса — Леви обеспечивает устойчивость, и из теоремы Лакса следует сходимость решения к решению соответствующей аналитической задачи с тем же порядком точности. Теперь запишем выражение

$$\frac{\Omega_i^{k+1} - \Omega_i^{k-1}}{2\Delta t} + u_i \left[\frac{4}{3} \frac{\Omega_{i+1}^k - \Omega_{i-1}^k}{2\Delta x} - \frac{1}{3} \frac{\Omega_{i+2}^k - \Omega_{i-2}^k}{4\Delta x} \right] - W_i^k, \quad (20)$$

которое обладает следующими свойствами: во всех точках левее узла с индексом i , равным $J - 2$, оно тождественно равно нулю (на основании условий (14); и задания функции Ω в виде суперпозиции полиномов $\chi^n(x - x_*^k)$); в точках правее узла $i = J + 1$, оно равно нулю с точностью до $O(\Delta t)^2 + O(\Delta x)^4$, поскольку в этой области функция Ω гладкая.






Добавим к правой и левой частям уравнения (19) выражение (20). С учетом сказанного получаем

$$\begin{aligned} & \frac{\varphi_i^{k+1} - \varphi_i^{k-1}}{2\Delta t} + u_i \left[\frac{4}{3} \frac{\varphi_{i+1}^k - \varphi_{i-1}^k}{2\Delta x} - \frac{1}{3} \frac{\Omega_{i+2}^k - \Omega_{i-2}^k}{4\Delta x} \right] = \\ & = \frac{\Omega_i^{k+1} - \Omega_i^{k-1}}{2\Delta t} + u_i \left[\frac{4}{3} \frac{\Omega_{i+1}^k - \Omega_{i-1}^k}{2\Delta x} - \frac{1}{3} \frac{\Omega_{i+2}^k - \Omega_{i-2}^k}{4\Delta x} \right] - W \end{aligned} \quad (21)$$

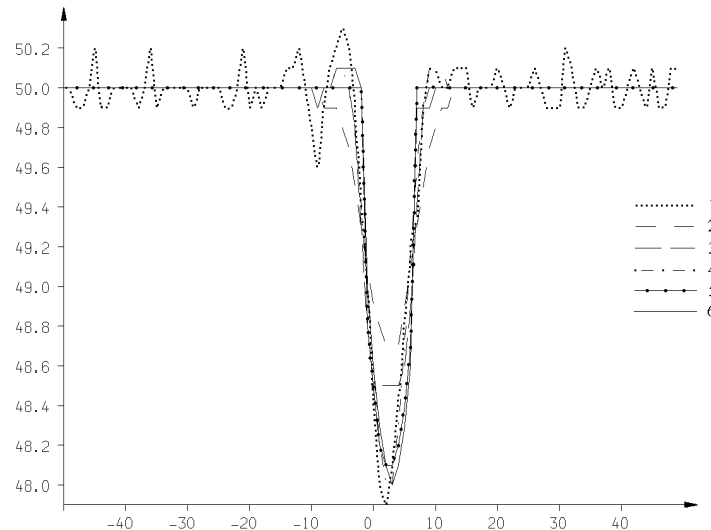
для точек $i = J - 2, \dots, J + 1$, где правая часть может быть выражена через функции $\chi^n(x - x_*^k)$ с помощью суммы (12), условий (10), уравнений (8) и интегралов (9). Будем решать численное уравнение (21). По сути дела мы решаем уравнение (19) с дополнительным членом в правой части, пропорциональным $O(\Delta t)^2 + O(\Delta x)^4$.

Далее рассмотрим результаты численных экспериментов, представленные в таблице, в которой приведено сравнение авторского метода с некоторыми методами, употребляющимися на практике (Смоляркевича, Ван Лира и др.). Эксперименты проводились при следующих значениях параметров: $x = 1; u = \text{const} = 1$; соотношение Куранта $K = 0.45$; $L = 100$, время интегрирования $T = 400$. Отклонение решения от точного дано в норме l_1 . Во всех схемах по пространству использовался шаблон из пяти узлов. Исключением является схема Лакса — Вендрофа: в ней использовался шаблон из трех узлов. По времени аппроксимация везде первого порядка (кроме авторской схемы, схемы центральных разностей и схемы Лакса — Вендрофа, где аппроксимация второго порядка). Пять первых тестов представляют перенос кусочно-линейных функций, вид которых схематично показан в первом столбце.

Результаты тестирования метода

№ пп	Схема	Цент. разн.	Лакс- Венд.	Смо- лярк.	Ботт	UNO	Ван Лир	Super bee	Автор
	Тест								
1		—	0.129	0.046	0.033	0.048	0.044	0.020	0.000
2		—	0.082	0.027	0.081	0.027	0.016	0.008	0.000
3		—	0.90	0.033	0.019	0.030	0.031	0.021	0.000
4		—	0.96	0.032	0.019	0.030	0.031	0.024	0.000
5		—	0.095	0.027	0.011	0.020	0.025	0.015	0.000
6	Уедин. 1 $L = 20$	0.017	0.086	0.019	0.010	0.016	0.013	0.101	0.007
7	Уедин. 1 $L = 10$	0.036	0.112	0.035	0.013	0.033	0.013	0.017	0.012
8	Уедин. 2 $L = 20$	0.011	0.084	0.022	0.016	0.018	0.018	0.019	0.010
9	Уедин. 2 $L = 10$	0.020	0.190	0.043	0.018	0.032	0.034	0.024	0.013
10	$\sin(\pi x/10)$	1.00	0.90	0.188	0.081	0.122	0.217	0.140	0.040
11	$\sin(\pi x/5)$	1.034	0.58	0.600	0.199	0.590	0.615	0.608	1.034

Два следующих теста — уединенная волна с разрывом первой производной (часть синусоиды, соответствующая половине длине волны), длина волны указана в первом столбце. Седьмая и восьмая строки — уединенная волна с разрывом второй производной (часть синусоиды, соответствующая длине волны), длина волны указана в первом столбце. Для первых восьми тестов предложенный автором метод дает почти абсолютно лучшую точность. Для тестов 6–8 были проведены эксперименты с отключением членов ряда (12) со старшими номерами, т. е. в тестах 6–8 пренебрегалось тем, что третья производная от функции, задающей начальное поле, не равна нулю; для тестов 8, 9 полагалось, что четвертая производная от такой функции равна нулю. Для таких уточненных тестов новые оценки равны (по порядку) 0.007, 0.012, 0.013, 0.010. Два последних теста рассчитывались для гладких начальных данных — синусоида с длиной волны, указанной в первом столбце. Здесь в авторском методе расчет фактически производится с помощью метода центральных разностей. Из последнего эксперимента следует, что мелкомасштабные колебания предложенный метод описывает несколько хуже. Однако, на наш взгляд, этот факт несколько не вредит авторскому методу, поскольку рассчитываемые на практике поля представляют суперпозицию волн разной длины и амплитуда крупномасштабных гармоник, как правило, существенно больше. Кроме того, если интегрирование проводится на небольшом промежутке по времени ($= 100$), то предложенный метод дает результаты не худшие, чем другие методы.



Результаты расчетов.

1 — центральные разности, 2 — UNO, 3 — SUPERBEE, 4 — Ботт, 5 — автор, 6 — точное решение.

На рисунке представлены результаты эксперимента, в котором начальное поле есть сумма импульсов Хевисайда и половины синусоидальной волны (длина волны равна восьми, амплитуда импульсов равна единице), т. е. представлена комбинация разрыва в самой функции и первой производной. Остальные параметры такие же как и в тестах 1–8. Из рисунка видно, что в области минимума истинного решения близкие к нему решения дают авторский метод, метод центральных разностей и метод Ботта. Однако в области, где истинное решение представлено прямой, метод центральных разностей дает осциллирующее решение, метод же Ботта дает два всплеска справа и слева от нелинейного участка истинного решения. Для этого теста оценка точности авторского метода равна 0.019; оценка же наилучшего из остальных методов (Ботт [2]) равна 0.034.

Программа ближайших исследований предполагает предложенный метод использовать при конструировании численных схем для двумерного уравнения переноса, убрать ограничение на гладкость функции u , рассмотреть случай, когда особенности имеют характер полюса.

Список литературы

- [1] Фомин В. М. Метод расчета обобщенных решений одномерного линейного уравнения адвекции. *Вычисл. технологии*, **5**, №2, 2000 (в печати).
- [2] Ботт А. А. Positive definite advection scheme obtained by non-linear renormalization of the advective fluxes. *M. W. R.*, **117**, 1989, 1006–1015.

Поступила в редакцию 12 сентября 1995 г.,
в переработанном виде 27 сентября 1997 г.