ОБ ОДНОМ КЛАССЕ ПОТОКОВЫХ СХЕМ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТИПА КОНВЕКЦИЯ-ДИФФУЗИЯ

Ю.Н. КАРАМЗИН[1], Т.А. КУДРЯШОВА[1], С.В. ПОЛЯКОВ[1,2]

[1] Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН
Москва, Россия
e-mail: karamzin@imamod.ru, web page: http://www.keldysh.ru

[2] Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ
Москва, Россия
e-mail: polyakov@imamod.ru - web page: http://www.mephi.ru

Ключевые слова: уравнение конвекции-диффузии, разностные схемы, интегральные преобразования, алгоритм немонотонной прогонки, итерации.

Аннотация. Объектом исследования выбраны разностные схемы для решения пространственно одномерных уравнений типа конвекция-диффузия (КДУ). Эти уравнения используются для описания многих нелинейных процессов в твёрдых телах, жидкостях и газах. В работе предложен новый конечно-разностный подход к решению уравнений подобного типа. Для упрощения рассмотрения выбран пространственно одномерный вариант КДУ. Однако при этом сохранены основные особенности уравнения: немонотонность и квазилинейность. Для решения краевых и начально-краевых задач для КДУ предложены потоковые схемы с двойным экспоненциальным преобразованием и алгоритмы их реализации.

ON ONE CLASS OF FLOW SCHEMES FOR THE CONVECTION-DIFFUSION TYPE EQUATION

YU. KARAMZIN[1], T. KUDRYASHOVA[1] AND S. POLYAKOV[1,2]

[1] Keldysh Institute of Applied Mathematics of Russian Academy of Sciences (KIAM RAS)
4 Miusskaya square, 125047 Moscow, Russia
e-mail: karamzin@imamod.ru, web page: http://www.keldysh.ru

[2] National Research Nuclear University Moscow Engineering Physics Institute (NRNU MEPhi)
31 Kashirskoe shosse, 115409, Moscow, Russia
e-mail: polyakov@imamod.ru, web page: http://www.keldysh.ru

Summary. The object of the study was chosen finite-difference schemes for solving spatially one-dimensional equations such as convection-diffusion (CDU). These equations are used to describe many nonlinear processes in solids, liquids and gases. A new finite-difference approach to solving equations of this type is proposed in this paper. To simplify the discussion, a spatially one-dimensional version of the CDU is chosen. However, at the same time, the main features of the equation are preserved: nonmonotonicity and quasilinearity. To

2010 Mathematics Subject Classification: 35J25, 35K15, 65N06.
Key words and Phrases: Numerical Methods, Finite-Difference Schemes, Convection-Diffusion Equations.

solve the boundary and initial-boundary value problems for KDU, flow schemes with double exponential transformation and algorithms for their implementation are proposed.

1 ВВЕДЕНИЕ

Уравнения конвекции-диффузии являются основой многих математических моделей [1]. Данные уравнения используются для описания физических процессов в твёрдых телах, жидкостях и газах. Методы решения этих уравнений неоднократно обсуждались в литературе [2-9]. Однако до сих пор решение уравнений подобного типа вызывает определенные трудности. В данной работе представлены результаты построения и обобщения консервативных слабо-монотонных схем второго порядка точности по пространству на равномерных и квазиравномерных сетках, предложенных изначально в работе [10] и усовершенствованных в работах [11-13]. В [14, 15] предложена модификация схем с двойным интегральным преобразованием. Однако обобщение предложенных схем на случай использования ячеистых сеток не проводилось. Данная работа восполняет этот пробел.

2 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим сначала стационарное одномерное уравнение типа конвекция-диффузия с вещественными коэффициентами на интервале (0,1):

$$Lu \equiv \frac{d}{dx}\left(k\frac{du}{dx}+r_0 u\right)+r_1\frac{du}{dx}-qu=-f, \qquad 0<x<1, \tag{1}$$

записанное для неизвестной скалярной вещественной функции u.

При формулировке краевой задачи для уравнения (1) будем использовать следующую запись граничных условий:

$$\chi_m u'(x_m)=(-1)^m\left[\lambda_m u(x_m)-\mu_m\right], \quad \chi_m^2+\lambda_m^2\neq 0, \quad m=0,1. \tag{2}$$

Здесь предполагается, что $x_m=m$, χ_m, λ_m, μ_m – некоторые вещественные константы (в линейном случае) или функции от решения u (в квазилинейном случае). Краевые условия (2) включают в себя условия либо 1-ого, либо 2-ого, либо 3-его рода, а также могут быть смешанными.

В линейном случае коэффициенты уравнения (1) зависят только от координаты x:

$$k=k(x)\geq k_0>0, \quad r_l=r_l(x) \ (l=0,1), \quad q=q(x), \quad f=f(x). \tag{3a}$$

При этом предполагается, что эти функции являются ограниченными кусочно-непрерывными функциями на (0,1), причем функция k строго положительна и отделена от нуля положительной константой k_0. Также предполагается, что все функции и константы, входящие в уравнение (1) и краевые условия (2), определяют классическое решение соответствующей краевой задачи.

В квазилинейном случае коэффициенты уравнения (1) зависят еще и от решения задачи $u(x)$, область значений которого совпадает со всей числовой осью $(-\infty,+\infty)$:

$$k = k(x,u) \ge k_0 > 0, \quad r_l = r_l(x,u) \ (l = 0,1), \quad q = q(x,u), \quad f = f(x,u). \tag{3b}$$

а в дополнительных условиях (2) величины $\chi_m = \chi_m(u)$, $\lambda_m = \lambda_m(u)$, $\mu_m = \mu_m(u)$ – нелинейные функции по u. Здесь также предполагается существование классического решения каждой из рассматриваемых краевых задач.

В нестационарном случае рассмотрим уравнение вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu + f, \qquad 0 < x < 1, \quad t > 0, \tag{4}$$

в котором дифференциальный оператор L определён в (1) с заменой обычных пространственных производных на частные.

Для уравнения (4) ставится начально-краевая задача с граничными условиями вида (2) и начальными условиями

$$u(x,0) = u_0(x), \qquad 0 < x < 1. \tag{5}$$

В линейном случае коэффициенты уравнения (4) зависят только от координат:

$$k = k(x,t) \ge k_0 > 0, \quad r_l = r_l(x,t) \ (l = 0,1), \quad q = q(x,t), \quad f = f(x,t). \tag{6a}$$

В квазилинейном случае коэффициенты уравнения (4) зависят от координат и решения:

$$\begin{aligned} &k = k(x,t,u) \ge k_0 > 0, \quad r_l = r_l(x,t,u) \ (l = 0,1), \\ &q = q(x,t,u), \quad f = f(x,t,u). \end{aligned} \tag{6b}$$

В обоих случаях предполагается, что коэффициенты являются ограниченными кусочно-непрерывными функциями по совокупности переменных в областях своего определения. Также предполагается, что коэффициенты начально-краевой задачи (4), (5), (2) определяют классическое решение на некотором конечном промежутке времени $[0, t_{\max}]$.

3 ПОСТРОЕНИЕ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ

При построении разностных схем для указанных выше уравнений (1) и (4) будем различать четыре ситуации:

(А) функции $r_0 \equiv 0, \quad r_1 \equiv 0$;

(Б) функция $r_0 \equiv 0$, функция r_1 не равна тождественно 0;

(В) функция r_0 не равна тождественно 0, функция $r_1 \equiv 0$;

(Г) функции r_0, r_1 не равны тождественно 0.

Это разделение обусловлено свойствами получаемого дифференциального решения и существенно влияет на выбор численного метода решения краевой задачи. В частности, для случая (А) используется однородная схема А.А. Самарского, для случая (Б) – схема Самарского с регуляризацией (обе схемы приведены в [12]), для случая (В) предлагается использовать схему Н.В. Кареткиной [4]. Обобщением на все четыре случая (в том числе (Г)) является схема, предложенная в работах [7-9], а также схемы, предложенные в [10, 11].

3.1 Интегральное преобразование пространственного оператора

Для построения разностных схем удобно преобразовать дифференциальный оператор L к следующему виду:

$$Lu \equiv \frac{d}{dx}\left(k\frac{du}{dx}+r_0u\right)+r_1\frac{du}{dx}-qu=\frac{1}{e_1}\frac{d}{dx}\left(e_1W\right)-\tilde{q}u, \tag{7}$$

$$\begin{gathered} W=k\left(\frac{du}{dx}+\tilde{r}_0u\right)=\frac{1}{e_0}\frac{d}{dx}\left(e_0u\right), \\ \tilde{q}=q+\tilde{r}_1r_0,\quad e_l=\exp\left[\int_0^x\tilde{r}_ldx\right],\quad \tilde{r}_l=\frac{r_l}{k},\quad l=0,1. \end{gathered} \tag{8}$$

Здесь W – функция, с точностью до знака имеющая смысл потока величины u.

Очевидно, что интегральное преобразование (7), (8) не накладывает дополнительных ограничений на коэффициенты оператора L и, тем самым, является эквивалентным. Данное преобразование включает экспоненциальные множители и используется ниже при построении разностных схем, которые естественно называть экспоненциальными.

Для того, чтобы воспользоваться формулами (7), (8) при аппроксимации соответствующих краевых и начально-краевых задач, удобно переформулировать граничные условия (2):

$$\begin{gathered} u\left(x_m\right)=\mu_m \quad \textit{или} \quad W\left(x_m\right)=\left(-1\right)^m\left[\tilde{\lambda}_mu\left(x_m\right)-\tilde{\mu}_m\right], \\ \tilde{\lambda}_m=\chi_m^{-1}k\left(x_m\right)\lambda_m+\left(-1\right)^mr_0\left(x_m\right),\quad \tilde{\mu}_m=\chi_m^{-1}k\left(x_m\right)\mu_m,\quad m=0,1. \end{gathered} \tag{2'}$$

Данное преобразование также не влияет на разрешимость рассматриваемых задач. Кроме того, во многих приложениях граничное условие ставится именно на поток W, так что величины $\tilde{\lambda}_m$ и $\tilde{\mu}_m$ являются известными параметрами задачи. Поэтому далее будем считать, что вместо граничных условий (2) заданы условия (2'), а волну над функциями $\tilde{q},\tilde{r}_l,\tilde{\lambda},\tilde{\mu}$ будем опускать.

3.2 Экспоненциальные схемы потокового типа

Построим разностные схемы, в которых решение определяется в центрах ячеек пространственной сетки. Для этого на отрезке $[0,1]$ введем некоторую неравномерную сетку $\omega_{\text{£}}=\left\{0=x_0<x_1<...<x_N=1\right\}$ с узлами x_i ($i=0,...,N$), серединами интервалов $x_{i\pm1/2}=0.5\left(x_i+x_{i\pm1}\right)$ и шагами $h_i=x_i-x_{i-1}$ ($i=1,...,N$), $\hbar_i=x_{i+1/2}^{(*)}-x_{i-1/2}^{(*)}$ ($i=0,...,N$), $x_{i+1/2}^{(*)}=\min\left(x_{i+1/2},x_N\right)$, $x_{i-1/2}^{(*)}=\max\left(x_0,x_{i-1/2}\right)$.

Построим теперь потоковые разностные схемы, в которых неизвестная функция y_h

(являющаяся сеточным аналогом u) определена в центрах отрезков (ячеек) $x_{i-1/2}$ ($i=1,...N$). Сетку, состоящую из таких узлов обозначим $\overline{\omega}_{\text{£}}$.

Далее воспользуемся известным интегро-интерполяционным методом [3, 16] и проинтегрируем уравнение (1) на отрезке $\left[x_{i-1}, x_i\right]$. В результате стандартных преобразований [16] получим следующие разностные уравнения:

$$L_h y_{i-1/2} \equiv \frac{e_{1,i}W_i - e_{1,i-1}W_{i-1}}{h_i e_{1,i-1/2}} - Q_{i-1/2}y_{i-1/2} = -\varphi_{i-1/2}, \quad i=1,...,N, \tag{9}$$

$$W_i = k_i \frac{e_{0,i+1/2}y_{i+1/2} - e_{0,i-1/2}y_{i-1/2}}{e_{0,i}\hbar_i}, \quad i=1,....,N-1; \tag{10}$$

$$Q_{i-1/2} = \frac{1}{h_i}\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} q\left(x'\right)dx', \quad \varphi_{i-1/2} = \frac{1}{h_i}\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} f\left(x'\right)dx', \quad i=1,....,N; \tag{11}$$

$$k_i = \frac{1}{\hbar_i}\int\limits_{x^*_{i-1/2}}^{x^*_{i+1/2}} \frac{1}{k\left(x'\right)}dx', \quad i=0,....,N; \tag{12}$$

$$e_{l,i} = \exp\left[\int\limits_0^{x_i} r_l\left(x'\right)dx'\right], \quad i=0,....,N, \quad l=0,1; \tag{13}$$

$$e_{l,i-1/2} = \exp\left[\int\limits_0^{x_{i-1/2}} r_l\left(x'\right)dx'\right], \quad i=1,....,N, \quad l=0,1. \tag{14}$$

Будем говорить, что уравнения (9)-(14) описывают так называемую *точную потоковую экспоненциальную разностную схему*.

При необходимости (когда квадратуры, входящие в (11)-(14) невозможно или неудобно вычислять точно) в схеме (9)-(14) можно использовать следующие аппроксимации:

$$Q_{i-1/2} \approx q_{i-1/2}, \quad \varphi_{i-1/2} \approx f_{i-1/2}, \quad i=1,....,N; \tag{11'}$$

$$k_i \approx k\left(x_i\right) \quad \textit{или} \quad \frac{k\left(x^*_{i+1/2}\right) + k\left(x^*_{i-1/2}\right)}{2} \quad \textit{или} \quad \frac{2k\left(x^*_{i+1/2}\right)k\left(x^*_{i-1/2}\right)}{k\left(x^*_{i+1/2}\right) + k\left(x^*_{i-1/2}\right)}, \quad i=0,....,N; \tag{12'}$$

$$e_{l,0} = 1, \quad e_{l,i} \approx \exp\left[\sum_{j=1}^{i} 0.5\left(r_{l,j} + r_{l,j-1}\right)h_j\right], \quad i=1,....,N, \quad l=0,1; \tag{13'}$$

$$e_{l,i-1/2} = e_{l,i-1} \exp\left[\frac{h_i}{8}\left(3r_{l,i-1} + r_{l,i}\right)\right], \quad i = 1,....,N, \quad l = 0,1. \tag{14}$$

Тогда уравнения (9), (10), (11')-(14') назовем *потоковой экспоненциальной разностной схемой*.

Для того, чтобы использовать построенные схемы для поиска решения, необходимо знать значения потоков W_0 и W_N.

В случае граничных условий 1-ого рода величины потоков выражаются через известные значения решения μ_0 и μ_1 в граничных узлах:

$$\begin{aligned} W_0 &\approx k_0 \frac{e_{0,1/2} y_{1/2} - e_{0,0} y_0}{\hbar_0 e_{0,0}} = \frac{k_0 e_{0,1/2}}{\hbar_0} y_{1/2} - \frac{k_0}{\hbar_0} \mu_0 \equiv +\bar{\lambda}_0 y_{1/2} - \bar{\mu}_0, \\ W_N &\approx k_N \frac{e_{0,N} y_N - e_{0,N-1/2} y_{N-1/2}}{\hbar_N e_{0,N}} = \frac{k_N}{\hbar_N} \mu_1 - \frac{k_N e_{0,N-1/2} y_{N-1/2}}{\hbar_N e_{0,N}} \equiv -\bar{\lambda}_1 y_{N-1/2} + \bar{\mu}_1. \end{aligned} \tag{15}$$

В случае граничных условий 2-ого или 3-его рода величины потоков выражаются через неизвестные значения решения в граничных узлах:

$$W_0 = +\lambda_0 y_0 - \mu_0, \quad W_N = -\lambda_1 y_N + \mu_1. \tag{16}$$

Эти граничные значения y_0 и y_N можно определить следующим образом.

Из определения потока W следуют два приближенных интегральных соотношения:

$$\int_0^{x_{1/2}} \frac{W e_0}{k} dx' \approx e_{0,1/2} y_{1/2} - e_{0,0} y_0, \quad \int_{x_{N-1/2}}^{x_N} \frac{W e_0}{k} dx' \approx e_{0,N} y_N - e_{0,N-1/2} y_{N-1/2},$$

Если заменить интегралы в левых частях данных соотношений на их приближенные выражения по формулам соответственно левых и правых прямоугольников и произвести элементарные преобразования, то в результате получим следующие выражения для граничных значений искомой функции:

$$y_0 \approx \frac{e_{0,1/2}}{e_{0,0}} y_{1/2} - \frac{h_1 W_0}{k_0}, \quad y_N \approx \frac{e_{0,N-1/2}}{e_{0,N}} y_{N-1/2} + \frac{h_N W_N}{k_N}.$$

Подставив эти значения в граничные условия (16) с помощью элементарных преобразований получим формулы аналогичные (15):

$$\begin{aligned} W_0 &\approx +\frac{\phi_0 \lambda_0 e_{0,1/2}}{e_{0,0}} y_{1/2} - \phi_0 \mu_0 \equiv +\bar{\lambda}_0 y_{1/2} - \bar{\mu}_0, \quad \phi_0 = \left(1 + \frac{\lambda_0 h_1}{2k_0}\right)^{-1}, \\ W_N &\approx -\frac{\phi_1 \lambda_1 e_{0,N-1/2}}{e_{0,N}} y_{N-1/2} + \phi_1 \mu_1 \equiv -\bar{\lambda}_1 y_{N-1/2} + \bar{\mu}_1, \quad \phi_1 = \left(1 + \frac{\lambda_1 h_N}{2k_N}\right)^{-1}. \end{aligned} \tag{15'}$$

Условия разрешимости и устойчивости выражений (15') обсудим ниже.

В итоге с точностью до определения новых значений $\bar{\lambda}_l$ и $\bar{\mu}_l$ $(l = 0,1)$ получаем одинаковые выражения (15) для потоков W_0 и W_N.

Отметим далее, что погрешность аппроксимации построенных стационарных потоковых экспоненциальных схем на равномерных и квазиравномерных сетках имеет порядок $O\left(h_m^2\right)$, где h_m – максимальный шаг сетки. При определенных условиях на коэффициенты задачи можно показать, что этот же порядок в норме $L_2\left(\bar{\omega}_{\hat{x}}\right)$ имеет и точность построенных схем.

По аналогии с предыдущим для решения начально-краевой задачи (4), (5), (2) на основе потоковой экспоненциальной аппроксимации на равномерной сетке по времени ω_t с шагом τ можно построить следующую нестационарную схему с весами:

$$\frac{\hat{y}_h - y_h}{\tau} = \sigma\left[\hat{L}_h\hat{y}_h + \hat{\varphi}_h\right] + (1-\sigma)\left[L_h y_h + \varphi_h\right], \quad x \in \omega_{\hat{x}}, \quad t \in \omega_{t,h\tau} \tag{17}$$

$$y_h(0) = u_{0h}, \quad x \in \bar{\omega}_{\hat{x}}. \tag{18}$$

Здесь u_{0h} – значения функции $u_0(x)$ на сетке $\bar{\omega}_{\hat{x}}$. Вес схемы σ должен быть неотрицательным. Однако будем рассматривать лишь три его значения, соответствующие явной ($\sigma = 0$), неявной ($\sigma = 1$) и симметричной ($\sigma = 0.5$) схемам.

Как и выше, при определенных условиях на коэффициенты задачи можно показать, что погрешность аппроксимации и точность построенных нестационарных потоковых экспоненциальных схем на равномерных и квазиравномерных пространственных сетках имеет порядок $O\left(h_m^2 + \tau^\alpha\right)$ в норме. При этом показатель степени $\alpha = 2$ для $\sigma = 0.5$, и $\alpha = 1$ – в остальных случаях.

4 РЕАЛИЗАЦИЯ ПОСТРОЕННЫХ СХЕМ

В данном пункте рассмотрим детали реализации построенных экспоненциальных схем. Для этого сначала сделаем ряд общих замечаний.

Во-первых, для реализации линейных стационарных схем предлагается использовать алгоритмы прогонки. Исходно, их можно взять в виде, указанном в [16] и [5]. Однако в последнем случае прямое вычисление экспоненциальных членов (вследствие применения второго экспоненциального преобразования – функции e_1) не позволяет использовать формулы прогонки непосредственно. Поэтому необходимо учесть конкретный вид коэффициентов алгебраической задачи и переформулировать алгоритм. В результате можно показать, что вместо полных интегральных членов в формулах прогонки будут фигурировать только их отношения на шаблоне сетки, которые легко вычисляются. Ниже приводятся соответствующие варианты алгоритма прогонки.

Во-вторых, в квазилинейном стационарном случае необходимо организовать итерационный процесс по нелинейности. В качестве итераций можно использовать простые или ньютоновские итерации. На каждой итерации такого процесса будет также использоваться немонотонная прогонка.

В-третьих, в линейном нестационарном случае можно использовать два подхода:

алгоритмы монотонной или немонотонной прогонки. Каждый из них приведет к своим особенностям и ограничениям. В частности, если использовать монотонный алгоритм, то получим ограничение на шаг по времени. Если использовать немонотонную прогонку, то получим дополнительные условия на структуру пространственной сетки. Поскольку второе более естественно, наша рекомендация состоит в использовании немонотонного варианта прогонки.

В-четвертых, в квазилинейном нестационарном случае можно применить либо схемы с запаздыванием (полностью явные или явные по нелинейности схемы), которые реализуются на каждом временном шаге с помощью алгоритмов монотонной или немонотонной прогонки, либо полностью неявные схемы, реализующиеся на каждом временном шаге с помощью итераций по нелинейности и соответствующих алгоритмов прогонки.

Рассмотрим теперь более подробно линейный стационарный случай. Реализация линейной стационарной схемы производится с помощью алгоритмов прогонки [16]. Выбор алгоритма прогонки зависит от коэффициентов дифференциальной задачи. Если рассматриваются ситуации (А) или (Б), то используется обычная монотонная прогонка [16]. В ситуациях (В) или (Г) используется немонотонная прогонка [5].

Рассмотрим подробно алгоритм немонотонной прогонки.

Для этого умножим уравнения (9) на $-h_i e_{1,i-1/2}$ и запишем их в так называемом *каноническом* виде:

$$\begin{aligned}
&C_i y_{i-1/2} - A_{i-1} y_{i-3/2} - B_i y_{i+1/2} = F_i, \quad i = 2,\dots,N-1,\\
&C_1 y_{1/2} - B_1 y_{3/2} = F_1, \quad C_N y_{N-1/2} - A_{N-1} y_{N-3/2} = F_N.
\end{aligned} \tag{19}$$

Коэффициенты в (19) определяются следующим образом:

$$\begin{aligned}
&A_i = e_{1,i} k_i \frac{e_{0,i-1/2}}{\hbar_i e_{0,i}}, \quad B_i = e_{1,i} k_i \frac{e_{0,i+1/2}}{\hbar_i e_{0,i}}, \quad i = 1,\dots,N-1;\\
&D_i = h_i e_{1,i-1/2} Q_{i-1/2}, \quad i = 1,\dots,N;\\
&C_i = A_i + B_{i-1} + D_i, \quad F_i = h_i e_{1,i-1/2} \varphi_{i-1/2}, \quad i = 2,\dots,N-1,\\
&C_1 = A_1 + D_1 + e_{1,0} \bar{\lambda}_0, \quad F_1 = h_1 e_{1,1/2} \varphi_{1/2} + e_{1,0} \bar{\mu}_0,\\
&C_N = B_{N-1} + D_N + e_{1,N} \bar{\lambda}_1, \quad F_N = h_N e_{1,N-1/2} \varphi_{N-1/2} + e_{1,N} \bar{\mu}_1.
\end{aligned} \tag{20}$$

Введем далее следующие сеточные функции:

$$\begin{aligned}
&\xi_i^- = \frac{e_{0,i-1/2}}{e_{0,i}}, \quad \eta_i^- = \frac{e_{1,i}}{e_{1,i-1/2}}, \quad \zeta_i^- = \xi_i^- \eta_i^-, \quad \gamma_i^- = \frac{h_i}{\hbar_i}, \quad i = 1,\dots,N;\\
&\xi_{i-1}^+ = \frac{e_{0,i-1/2}}{e_{0,i-1}}, \quad \eta_{i-1}^+ = \frac{e_{1,i-1}}{e_{1,i-1/2}}, \quad \zeta_{i-1}^+ = \xi_{i-1}^+ \eta_{i-1}^+, \quad \gamma_i^+ = \frac{h_i}{\hbar_{i-1}}, \quad i = 1,\dots,N;\\
&\theta_i^\pm = \frac{e_{0,i\pm1/2}}{e_{0,i\mp1/2}} = \exp\left[\pm \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} r_0(x')\,dx'\right] \quad \textit{или} \quad \exp\left[\pm 0.5 h_i \left(r_0\left(x_{i-1/2}\right) + r_0\left(x_{i+1/2}\right)\right)\right],\\
&i = 1,\dots,N.
\end{aligned} \tag{21}$$

Альтернатива в формулах (21) призвана отличить соответственно точную и приближенную схемы.

Рассмотрим теперь для примера формулы правой немонотонной прогонки и учтем в них выражения (20) и (21):

$$\begin{aligned}
&\alpha_1 = \frac{A_1}{C_1} = \frac{k_1\zeta_1^-\gamma_1^-}{h_1^2 Q_{1/2} + h_1\eta_0^+\overline{\lambda}_0 + k_1\zeta_1^-\gamma_1^-}, \quad \beta_1 = \frac{F_1}{C_1} = \frac{h_1^2\varphi_{1/2} + h_1\eta_0^+\overline{\mu}_0}{h_1^2 Q_{1/2} + h_1\eta_0^+\overline{\lambda}_0 + k_1\zeta_1^-\gamma_1^-},\\
&\alpha_i = \frac{A_i}{C_i - B_{i-1}\alpha_{i-1}} = \frac{k_i\zeta_i^-\gamma_i^-}{h_i^2 Q_{i-1/2} + k_i\zeta_i^-\gamma_i^- + k_{i-1}\zeta_{i-1}^+\gamma_{i-1}^+\left(1-\alpha_{i-1}\right)},\\
&\beta_i = \frac{F_i + A_{i-1}\beta_{i-1}}{C_i - B_{i-1}\alpha_{i-1}} = \frac{h_i^2\varphi_{i-1/2} + k_{i-1}\eta_{i-1}^+\xi_{i-1}^-\gamma_{i-1}^+\beta_{i-1}}{h_i^2 Q_{i-1/2} + k_i\zeta_i^-\gamma_i^- + k_{i-1}\zeta_{i-1}^+\gamma_{i-1}^+\left(1-\alpha_{i-1}\right)}, \quad i = 2,\dots,N-1;
\end{aligned} \tag{22}$$

$$\begin{aligned}
&y_{N-1/2} = \frac{F_N + A_{N-1}\beta_{N-1}}{C_N - B_{N-1}\alpha_{N-1}} = \frac{h_N^2\varphi_{N-1/2} + h_N\eta_N^-\overline{\mu}_1 + k_{N-1}\eta_{N-1}^+\xi_{N-1}^-\gamma_{N-1}^+\beta_{N-1}}{h_N^2 Q_{N-1/2} + h_N\eta_N^-\overline{\lambda}_1 + k_{N-1}\zeta_{N-1}^+\gamma_{N-1}^+\left(1-\alpha_{N-1}\right)},\\
&y_{i-1/2} = \frac{B_i}{A_i}\alpha_i y_{i+1/2} + \beta_i = \theta_i^+\alpha_i y_{i+1/2} + \beta_i, \quad i = N-1,\dots,1.
\end{aligned} \tag{23}$$

Аналогично рассмотрим формулы левой немонотонной прогонки:

$$\begin{aligned}
&\alpha_N = \frac{B_{N-1}}{C_N} = \frac{k_{N-1}\zeta_{N-1}^+\gamma_{N-1}^+}{h_N^2 Q_{N-1/2} + h_N\eta_N^-\overline{\lambda}_1 + k_{N-1}\zeta_{N-1}^+\gamma_{N-1}^+},\\
&\beta_N = \frac{F_N}{C_N} = \frac{h_N^2\varphi_{N-1/2} + h_N\eta_N^-\overline{\mu}_1}{h_N^2 Q_{N-1/2} + h_N\eta_N^-\overline{\lambda}_1 + k_{N-1}\zeta_{N-1}^+\gamma_{N-1}^+},\\
&\alpha_i = \frac{B_{i-1}}{C_i - A_i\alpha_{i+1}} = \frac{k_{i-1}\zeta_{i-1}^+\gamma_{i-1}^+}{h_i^2 Q_{i-1/2} + k_i\zeta_i^-\gamma_i^-\left(1-\alpha_{i+1}\right) + k_{i-1}\zeta_{i-1}^+\gamma_{i-1}^+},\\
&\beta_i = \frac{F_i + B_i\beta_{i+1}}{C_i - A_i\alpha_{i+1}} = \frac{h_i^2\varphi_{i-1/2} + k_i\eta_i^-\xi_i^+\gamma_i^-\beta_{i+1}}{h_i^2 Q_{i-1/2} + k_i\zeta_i^-\gamma_i^-\left(1-\alpha_{i+1}\right) + k_{i-1}\zeta_{i-1}^+\gamma_{i-1}^+}, \quad i = N-1,\dots,2;
\end{aligned} \tag{22'}$$

$$\begin{aligned}
&y_{1/2} = \frac{F_1 + B_1\beta_2}{C_1 - A_1\alpha_2} = \frac{h_1^2\varphi_{1/2} + h_1\eta_0^+\overline{\mu}_0 + k_1\eta_1^-\xi_1^+\gamma_1^-\beta_2}{h_1^2 Q_{1/2} + h_1\eta_0^+\overline{\lambda}_0 + k_1\zeta_1^-\gamma_1^-\left(1-\alpha_2\right)},\\
&y_{i+1/2} = \frac{A_i}{B_i}\alpha_{i+1} y_{i-1/2} + \beta_{i+1} = \theta_i^-\alpha_{i+1} y_{i+1/2} + \beta_{i+1}, \quad i = 1,\dots,N-1.
\end{aligned} \tag{23'}$$

Как видно из (22), (23) и (22'), (23'), окончательные формулы правой и левой немонотонной прогонки позволяют не вычислять экспоненциальные множители, а ограничиться расчетами их отношений со смежными индексами.

Анализ устойчивости приведенных формул прогонки приводит нас к условиям:

$$C_1 > 0, \quad C_i - B_i > 0, \quad i = 2,\dots,N; \quad \textit{или} \quad C_N > 0, \quad C_i - A_i > 0, \quad i = 1,\dots,N-1. \tag{24}$$

$$\theta_i^- = \frac{B_i}{A_i} \le 1 \quad или \quad \theta_i^+ = \frac{A_i}{B_i} \le 1, \quad i = 1, \ldots, N-1. \tag{25}$$

Условия (25) означают неположительность или неотрицательность функции $r_0(x)$ на всем интервале интегрирования.

В итоге, в этих простых случаях при выполнении условий (24), (25) построенные линейные стационарные потоковые экспоненциальные разностные схемы однозначно разрешимы.

В общем случае окончательный вариант алгоритма немонотонной прогонки определяется числом M интервалов постоянства знака функции $r_0(x)$.

В случае $M=1$ (функция $r_0(x)$ знакопостоянна) для реализации схем используем формулы прогонки (22), (23) или (22'), (23') в зависимости от знака $r_0(x)$.

В случае $M=2$ (одна перемена знака функции $r_0(x)$ используется алгоритм встречной прогонки, который легко скомпоновать из формул (22), (23) и (22'), (23'). При этом существуют две его реализации, зависящие от знаков $r_0(x)$ на соответствующих интервалах сетки.

В случае $M>2$ удобно применять алгоритм, сочетающий вычисления по формулам правой и левой немонотонной прогонки (алгоритм обобщенной встречной прогонки). Этот алгоритм по структуре вычислений совпадает с алгоритмом параллельной прогонки, подробно рассмотренном в [11].

Заметим далее, что в квазилинейном случае приведенная процедура решения используется на итерациях, когда коэффициенты схемы уже известны. В случае реализации неявных схем по времени легко произвести аналогичные выкладки и получить соответствующие модификации формул (22), (23) и (22'), (23').

Сделаем еще одно замечание относительно условий реализации рассмотренных экспоненциальных схем. Оно касается вычислений экспоненциальных множителей на компьютере. Обычно все вычисления производятся с некоторой фиксированной точностью (одинарной, двойной, расширенной, четверной и т.д.). При этом показатель экспоненты лежит в пределах диапазона $[MinArgExp, MaxArgExp]$. Например, в случае одинарной точности этот диапазон примерно равен $[-87.31, +88.72]$, в случае двойной точности он увеличивается до $[-708.36, +709.73]$ и т.д.. Это означает, что для реализации экспоненциальных схем существует формальное ограничение на аргумент экспоненты, которое в нашем случае можно выразить следующим достаточным условием:

$$\hbar_i \left| \tilde{r}_{l,i} \right| \le C_R \quad (i = 0, \ldots, N) \quad или \quad h_i \left| \tilde{r}_{l,i-1/2} \right| \le C_R \quad (i = 1, \ldots, N), \quad l = 0, 1, \tag{26}$$

где C_R – величина, связанная с точностью представления чисел в компьютере.

Однако реальная точность расчетов связана, как известно, с длиной мантиссы вещественных чисел. Поэтому величину C_R необходимо брать из условия

$$C_R = \ln\left(\varepsilon_M^{-1}\right), \quad \varepsilon_M = 2^{-n}, \tag{27}$$

где ε_M – машинный ноль без учета порядка, n – количество двоичных разрядов в мантиссе. В итоге, величина $C_R \approx 15.94, 36.04, 43.67, 77.63$ соответственно для чисел одинарной, двойной, расширенной и четверной точности, имеющих длину мантиссы соответственно 23, 52, 63 и 112 бит.

Если при решении исходной дифференциальной задачи необходимо получить лишь представление о решении (портрет), то условия (25), (26) позволят построить необходимую для этого "грубую" сетку. Если же решить задачу необходимо с заданной точностью ε, то, как минимум, придется построить сетку в соответствии с условиями (25), в которых величина $C_R < 1$ и зависит от желаемой точности ε.

5 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение отметим, что мы построили и обсудили реализацию одного класса консервативных потоковых разностных схем, основанных на двойном интегральном преобразовании оператора конвекции-диффузии, которые назвали экспоненциальными. Основное свойство данных схем в случае немонотонного оператора состоит в качественной и количественной передаче экспоненциального характера дифференциального решения сеточному аналогу, а также выполнение слабого принципа максимума. Полное исследование сходимости предложенных схем еще предстоит выполнить, однако использование их в практических задачах подтвердило эффективность предложенного подхода.

Благодарности: Исследования выполнены в рамках Научно-технической программы Союзного государства СКИФ-Недра при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (ГК № 14.964.11.0001 от 17 июня 2015 г.).

REFERENCES

[1] A.A. Samarskii, A.P. Mikhailov, *Principles of Mathematical Modelling: Ideas,Methods, Examples*, London, Tailor & Francis (2002).
[2] A.A. Samarskii, “Monotonic difference schemes for elliptic and parabolic equations in the case of a non-selfadjoint elliptic operator”, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **5** (3), 212-217 (1965).
[3] I.V. Fryazinov, “On a class of schemes for a parabolic equation”, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **15** (1), 108-120 (1975).
[4] E.I. Golant, “Conjugate families of difference schemes for equations of parabolic type with lowest terms”, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **18** (5), 88-95 (1978).
[5] N.V. Karetkina, “An unconditionally stable difference scheme for parabolic equations containing first derivatives”, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **20** (1), 257-262 (1980).
[6] A.A. Samarskii, P.P. Matus, V.I. Mazhukin, I.E. Mozolevski. “Monotone Difference Schemes for Equations with Mixed Derivatives”, *Computers and Mathematics with Applications*, **44**, 501-510 (2002).
[7] A.V. Mazhukin and V.I. Mazhukin. “Dynamic Adaptation for Parabolic Equations”, *Comput. Math. and Math. Phys.,* **47** (11), 1833–1855 (2007).

[8] O.B. Feodoritova, N.D. Novikova, V.T. Zhukov. "Multigrid method for diffusion equations based on adaptive smoothing", *Mathematica Montisnigri*, **36**, 14-26 (2016).
[9] V.I. Mazhukin, A.V. Shapranov, A.V. Mazhukin, O.N. Koroleva. "Mathematical formulation of a kinetic version of Stefan problem for heterogeneous melting/crystallization of metals". *Mathematica Montisnigri* , **36**, 58-77 (2016).
[10] S.V. Polyakov, V.A. Sablikov, "Lateral'nyi perenos fotoindutsirovannykh nositelei zryada v geterostrukturakh s dvumernym elektronnym gazom", *Matematicheskoe modelirovanie*, **9** (12), 76-86 (1997).
[11] T.A. Kudryashova, S.V. Polyakov, "O nekotorykh metodakh resheniya kraevykh zadach na mnogoprotsessornykh vychislitel'nykh sistemakh", *Trudy chetvertoi mezhdunarodnoi konferentsii po matematicheskomu modelirovaniyu (editor L.A. Uvarova), Moscow, STANKIN*, **2**, 134-145 (2001).
[12] S.V. Polyakov, "Eksponentsial'nye skhemy dlya resheniya evolutsionnykh uravneniy na neregulyarnykh setkakh", *Uchenye zapiski kazanskogo gosudarstvennogo universiteta, Seriya "Fiziko-matematicheskie nauki"*, **149** (4), 121-131 (2007).
[13] Yu.N. Karamzin, S.V. Polyakov, "Eksponentsial'nye konechno-ob'emnye skhemy dlya resheniya ellipticheskikh i parabolicheskikh uravnenii obshchego vida na neregulyarnykh setkakh", *Setochnye metody dlya kraevykh zadach i prilozheniya*, *Materialy Vos'moi Vserossiiskoi Konferentsii, Kazan, Kazan University*, 234-248 (2010).
[14] S.V. Polyakov, "Exponential difference schemes for convection-diffusion equation", *Mathematica Montisnigri*, **XXV**, 1-16 (2012).
[15] S.V. Polyakov, "Exponential Difference Schemes with Double Integral Transformation for Solving Convection-Diffusion Equations", *Mathematical Models and Computer Simulations*, **5** (4), 338-340 (2013).
[16] A.A. Samarskii, E.S. Nikolaev, *Numerical Methods for Grid Equations*, Vol. I: Direct Methods, Vol. II: Iterative Methods, Basel-Boston-Berlin, Birkhäuser Verlag (1989).

Received November 15, 2017