

ОБ ОДНОМ КЛАССЕ ПОТОКОВЫХ СХЕМ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТИПА КОНВЕКЦИЯ-ДИФФУЗИЯ

Ю.Н. КАРАМЗИН¹, Т.А. КУДРЯШОВА¹, 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. KARAMZIN¹, T. KUDRYASHOVA¹ 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 $(0,1)$:

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

записанное для неизвестной скалярной вещественной функции u .

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

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

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 :

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

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 $(-\infty, +\infty)$:

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

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

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

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

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 < x < 1. \quad (5)$$

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

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

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

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

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 $r_0 \equiv 0$, $r_1 \equiv 0$;
- (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:

$$Lu \equiv \frac{d}{dx} \left(k \frac{du}{dx} + r_0 u \right) + r_1 \frac{du}{dx} - qu = \frac{1}{e_1} \frac{d}{dx} (e_1 W) - \tilde{q} u, \quad (7)$$

$$W = k \left(\frac{du}{dx} + \tilde{r}_0 u \right) = \frac{1}{e_0} \frac{d}{dx} (e_0 u), \quad (8)$$

$$\tilde{q} = q + \tilde{r}_1 r_0, \quad e_l = \exp \left[\int_0^x \tilde{r}_l dx \right], \quad \tilde{r}_l = \frac{r_l}{k}, \quad l = 0, 1.$$

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):

$$u(x_m) = \mu_m \quad \text{или} \quad W(x_m) = (-1)^m \left[\tilde{\lambda}_m u(x_m) - \tilde{\mu}_m \right], \quad (2')$$

$$\tilde{\lambda}_m = \chi_m^{-1} k(x_m) \lambda_m + (-1)^m r_0(x_m), \quad \tilde{\mu}_m = \chi_m^{-1} k(x_m) \mu_m, \quad m = 0, 1.$$

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 $\omega_\epsilon = \{0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N = 1\}$ с узлами x_i ($i = 0, \dots, N$), серединами интервалов $x_{i \pm 1/2} = 0.5(x_i + x_{i \pm 1})$ и шагами $h_i = x_i - x_{i-1}$ ($i = 1, \dots, N$), $\tilde{h}_i = x_{i+1/2}^{(*)} - x_{i-1/2}^{(*)}$ ($i = 0, \dots, N$), $x_{i+1/2}^{(*)} = \min(x_{i+1/2}, x_N)$, $x_{i-1/2}^{(*)} = \max(x_0, x_{i-1/2})$.

Построим теперь потоковые разностные схемы, в которых неизвестная функция y_h

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

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

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

$$W_i = k_i \frac{e_{0,i+1/2} y_{i+1/2} - e_{0,i-1/2} y_{i-1/2}}{e_{0,i} \bar{h}_i}, \quad i = 1, \dots, N-1; \quad (10)$$

$$Q_{i-1/2} = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-1}}^{x_i} q(x') dx', \quad \varphi_{i-1/2} = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x') dx', \quad i = 1, \dots, N; \quad (11)$$

$$k_i = \frac{1}{\bar{h}_i} \int_{x_{i-1/2}^*}^{x_{i+1/2}^*} \frac{1}{k(x')} dx', \quad i = 0, \dots, N; \quad (12)$$

$$e_{l,i} = \exp \left[\int_0^{x_i} r_l(x') dx' \right], \quad i = 0, \dots, N, \quad l = 0, 1; \quad (13)$$

$$e_{l,i-1/2} = \exp \left[\int_0^{x_{i-1/2}} r_l(x') dx' \right], \quad i = 1, \dots, N, \quad l = 0, 1. \quad (14)$$

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:

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

$$k_i \approx k(x_i) \quad \text{или} \quad \frac{k(x_{i+1/2}^*) + k(x_{i-1/2}^*)}{2} \quad \text{или} \quad \frac{2k(x_{i+1/2}^*)k(x_{i-1/2}^*)}{k(x_{i+1/2}^*) + k(x_{i-1/2}^*)}, \quad i = 0, \dots, N; \quad (12')$$

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

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

Тогда уравнения (9), (10), (11')-(14') назовем *поточковой 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:

$$\begin{aligned} W_0 &\approx k_0 \frac{e_{0,1/2}y_{1/2} - e_{0,0}y_0}{h_0 e_{0,0}} = \frac{k_0 e_{0,1/2}}{h_0} y_{1/2} - \frac{k_0}{h_0} \mu_0 \equiv +\bar{\lambda}_0 y_{1/2} - \bar{\mu}_0, \\ W_N &\approx k_N \frac{e_{0,N}y_N - e_{0,N-1/2}y_{N-1/2}}{h_N e_{0,N}} = \frac{k_N}{h_N} \mu_1 - \frac{k_N e_{0,N-1/2}y_{N-1/2}}{h_N e_{0,N}} \equiv -\bar{\lambda}_1 y_{N-1/2} + \bar{\mu}_1. \end{aligned} \quad (15)$$

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

$$W_0 = +\lambda_0 y_0 - \mu_0, \quad W_N = -\lambda_1 y_N + \mu_1. \quad (16)$$

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):

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

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 $O(h_m^2)$, где h_m – максимальный шаг сетки. При определенных условиях на коэффициенты задачи можно показать, что этот же порядок в норме $L_2(\bar{\omega}_x)$ 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:

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

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

Здесь u_{0h} – значения функции $u_0(x)$ на сетке $\bar{\omega}_x$. 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 $O(h_m^2 + \tau^\alpha)$ 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:

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

Коэффициенты в (19) определяются следующим образом:

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

Введем далее следующие сеточные функции:

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

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):

$$\alpha_1 = \frac{A_1}{C_1} = \frac{k_1 \zeta_1^- \gamma_1^-}{h_1^2 Q_{1/2} + h_1 \eta_0^+ \bar{\lambda}_0 + k_1 \zeta_1^- \gamma_1^-}, \quad \beta_1 = \frac{F_1}{C_1} = \frac{h_1^2 \varphi_{1/2} + h_1 \eta_0^+ \bar{\mu}_0}{h_1^2 Q_{1/2} + h_1 \eta_0^+ \bar{\lambda}_0 + k_1 \zeta_1^- \gamma_1^-},$$

$$\alpha_i = \frac{A_i}{C_i - B_{i-1} \alpha_{i-1}} = \frac{k_i \zeta_i^- \gamma_i^-}{h_i^2 Q_{i-1/2} + k_i \zeta_i^- \gamma_i^- + k_{i-1} \zeta_{i-1}^+ \gamma_{i-1}^+ (1 - \alpha_{i-1})}, \quad (22)$$

$$\beta_i = \frac{F_i + A_{i-1} \beta_{i-1}}{C_i - B_{i-1} \alpha_{i-1}} = \frac{h_i^2 \varphi_{i-1/2} + k_{i-1} \eta_{i-1}^+ \zeta_{i-1}^- \gamma_{i-1}^+ \beta_{i-1}}{h_i^2 Q_{i-1/2} + k_i \zeta_i^- \gamma_i^- + k_{i-1} \zeta_{i-1}^+ \gamma_{i-1}^+ (1 - \alpha_{i-1})}, \quad i = 2, \dots, N-1;$$

$$y_{N-1/2} = \frac{F_N + A_{N-1} \beta_{N-1}}{C_N - B_{N-1} \alpha_{N-1}} = \frac{h_N^2 \varphi_{N-1/2} + h_N \eta_N^- \bar{\mu}_1 + k_{N-1} \eta_{N-1}^+ \zeta_{N-1}^- \gamma_{N-1}^+ \beta_{N-1}}{h_N^2 Q_{N-1/2} + h_N \eta_N^- \bar{\lambda}_1 + k_{N-1} \zeta_{N-1}^+ \gamma_{N-1}^+ (1 - \alpha_{N-1})}, \quad (23)$$

$$y_{i-1/2} = \frac{B_i}{A_i} \alpha_i y_{i+1/2} + \beta_i = \theta_i^+ \alpha_i y_{i+1/2} + \beta_i, \quad i = N-1, \dots, 1.$$

Аналогично рассмотрим формулы левой немонотонной прогонки:

$$\alpha_N = \frac{B_{N-1}}{C_N} = \frac{k_{N-1} \zeta_{N-1}^+ \gamma_{N-1}^+}{h_N^2 Q_{N-1/2} + h_N \eta_N^- \bar{\lambda}_1 + k_{N-1} \zeta_{N-1}^+ \gamma_{N-1}^+},$$

$$\beta_N = \frac{F_N}{C_N} = \frac{h_N^2 \varphi_{N-1/2} + h_N \eta_N^- \bar{\mu}_1}{h_N^2 Q_{N-1/2} + h_N \eta_N^- \bar{\lambda}_1 + k_{N-1} \zeta_{N-1}^+ \gamma_{N-1}^+}, \quad (22')$$

$$\alpha_i = \frac{B_{i-1}}{C_i - A_i \alpha_{i+1}} = \frac{k_{i-1} \zeta_{i-1}^+ \gamma_{i-1}^+}{h_i^2 Q_{i-1/2} + k_i \zeta_i^- \gamma_i^- (1 - \alpha_{i+1}) + k_{i-1} \zeta_{i-1}^+ \gamma_{i-1}^+},$$

$$\beta_i = \frac{F_i + B_i \beta_{i+1}}{C_i - A_i \alpha_{i+1}} = \frac{h_i^2 \varphi_{i-1/2} + k_i \eta_i^- \zeta_i^+ \gamma_i^- \beta_{i+1}}{h_i^2 Q_{i-1/2} + k_i \zeta_i^- \gamma_i^- (1 - \alpha_{i+1}) + k_{i-1} \zeta_{i-1}^+ \gamma_{i-1}^+}, \quad i = N-1, \dots, 2;$$

$$y_{1/2} = \frac{F_1 + B_1 \beta_2}{C_1 - A_1 \alpha_2} = \frac{h_1^2 \varphi_{1/2} + h_1 \eta_0^+ \bar{\mu}_0 + k_1 \eta_1^- \zeta_1^+ \gamma_1^- \beta_2}{h_1^2 Q_{1/2} + h_1 \eta_0^+ \bar{\lambda}_0 + k_1 \zeta_1^- \gamma_1^- (1 - \alpha_2)}, \quad (23')$$

$$y_{i+1/2} = \frac{A_i}{B_i} \alpha_{i+1} y_{i-1/2} + \beta_{i+1} = \theta_i^- \alpha_{i+1} y_{i-1/2} + \beta_{i+1}, \quad i = 1, \dots, N-1.$$

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:

$$C_i > 0, \quad C_i - B_i > 0, \quad i = 2, \dots, N; \quad \text{или} \quad C_N > 0, \quad C_i - A_i > 0, \quad i = 1, \dots, N-1. \quad (24)$$

$$\theta_i^- = \frac{B_i}{A_i} \leq 1 \quad \text{или} \quad \theta_i^+ = \frac{A_i}{B_i} \leq 1, \quad i=1, \dots, N-1. \quad (25)$$

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 переменная 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:

$$h_i |\tilde{r}_{l,i}| \leq C_R \quad (i=0, \dots, N) \quad \text{или} \quad h_i |\tilde{r}_{l,i-1/2}| \leq C_R \quad (i=1, \dots, N), \quad l=0, 1, \quad (26)$$

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

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

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, Taylor & 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 elektronnyim 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 evolyutsionnykh 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