MATHEMATICA MONTISNIGRI
Vol XXVI (2013) 29-44

ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ КОНВЕКЦИИ-ДИФФУЗИИ

С.В. ПОЛЯКОВ

Аннотация. Объектом исследования выбраны сеточные методы решения уравнений конвекции-диффузии (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 были сохранены основные особенности уравнения - немонотонность и нелинейность. Для решения краевых задач для КДУ предложен специальный вариант немонотонной прогонки и итерационный процесс на базе метода Ньютона.

EXPONENTIAL FINITE-DIFFERENCE SCHEMES FOR DIFFUSION-CONVECTION EQUATION

SERGEY V. POLYAKOV

Keldysh Institute for Applied Mathematics
Russian Academy of Sciences
4 Miusskaya square, 125047 Moscow, Russia
e-mail: polyakov@imamod.ru, web page: http://www.imamod.ru/~serge

Key words: Diffusion-Convection Equation (DCE), Finite-Difference Schemes, Integral Transformation, Non-Monotonic Sweep Procedure, Iterations for Non-Linearity.

Summary. Object of this research are grid methods for decision of differential equations of diffusion-convection type. These equations are used for the description of many nonlinear processes in solids, liquids and gases. In the work a new finite-difference approach to the solution of the equations of this kind is offered. For simplification of consideration the one-dimensional version of the equation was chosen. However the main properties of this equation are equal non-monotonicity and non-linearity were kept. For solving of boundary problems for DCE both a special variant of non-monotonic sweep procedure and iteration process based on Newton method are offered.

2010 *Mathematics Subject Classification.* 65M06, 76E30
Ключевые слова. Уравнение конвекции-диффузии, разностные схемы, интегральные преобразования, алгоритм немонотонной прогонки, итерации по нелинейности.

1 ВВЕДЕНИЕ

Уравнения конвекции-диффузии являются основой многих математических моделей[1]. Методы решения этих уравнений неоднократно обсуждались в литературе[2,3,4,5]. Однако до сих пор решение уравнений подобного типа вызывает определённые трудности. В данной работе представлены результаты построения обобщённой консервативной слабо-монотонной схемы второго порядка точности по пространству на равномерных и квазиравномерных сетках, предложенной изначально в работе[6] и усовершенствованной в работах[7,8,9].

2 ПОСТАНОВКИ ЗАДАЧ

Рассмотрим сначала стационарное одномерное уравнение конвекции-диффузии общего вида на интервале (0,1):

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

В линейном случае коэффициенты уравнения зависят только от координаты x:

$$k = k(x), \quad r_i = r_i(x) \ (i = 0,1), \quad q = q(x), \quad f = f(x).$$

Будем предполагать, что они являются ограниченными кусочно-непрерывными функциями на (0,1), причем функция k строго положительна и отделена от нуля.

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

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

Здесь предполагается, что $x_m = m$, λ_m, χ_m, μ_m – некоторые константы ($m = 0,1$). Краевые условия (2) включают в себя условия либо 1-ого, либо 2-ого, либо 3-его рода, а также могут быть смешанными. Также предполагаем, что все функции и константы, входящие в уравнение (1) и краевые условия (2), определяют единственное решение соответствующей краевой задачи.

В квазилинейном случае краевые задачи ставятся аналогичным образом, однако коэффициенты уравнения (1) зависят еще и от решения задачи $u(x)$:

$$k = k(x,u), \quad r_i = r_i(x,u) \ (i = 0,1), \quad q = q(x,u), \quad f = f(x,u).$$

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

В нестационарном случае рассмотрим уравнение

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu + f, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \tag{3}$$

в котором дифференциальный оператор L определён выше. Коэффициенты уравнения (3) могут зависеть как от координат (x,t), так и от решения u и удовлетворяют тем же ограничениям, что указаны выше.

Для уравнения (3) ставится начально-краевая задача с граничными условиями вида (2) и начальными условиями

$$u(x,0) = u_0(x), \quad 0 < x < 1. \tag{4}$$

Далее также предполагаем, что коэффициенты задачи (3), (2), (4) являются ограниченными кусочно-непрерывными функциями в соответствующих областях, а решение задачи (3), (2), (4) существует и является единственным.

3 ПОСТРОЕНИЕ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ

При построении разностных схем для указанных выше уравнений будем различать четыре ситуации вхождения отдельных слагаемых в уравнения (1) и (3):

1) $r_0 \equiv 0, r_1 \equiv 0$, 2) $r_0 \equiv 0, r_1 \neq 0$, 3) $r_0 \neq 0, r_1 \equiv 0$, 4) $r_0 \neq 0, r_1 \neq 0$.

Это разделение обусловлено свойствами получаемого дифференциального решения и существенно влияет на выбор численного метода решения краевой задачи. В частности, для случая 1) используется однородная схема Самарского, для случая 2) – схема Самарского с регуляризацией (обе схемы приведены в[10]). Для случая 3) предлагается использовать схему Кареткиной[4]. Обобщением на все четыре случая является схема, предложенная в работах[7,8,9] и улучшенная схема, рассматриваемая ниже.

3.1 Экспоненциальное интегральное преобразование пространственного оператора

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

$$Lu \equiv \frac{d}{dx}\left(k\frac{du}{dx} + r_0 u\right) + r_1\frac{du}{dx} - qu = \frac{1}{e_1}\frac{d}{dx}(e_1 W) - \tilde{q}u, \tag{5}$$

где

$$W = k\left(\frac{du}{dx} + \tilde{r}_0 u\right) = \frac{1}{e_0}\frac{d}{dx}(e_0 u), \quad \tilde{q} = q + r_1\tilde{r}_0, \quad e_m = \exp\left[\int_0^x \tilde{r}_m dx\right], \quad \tilde{r}_m = \frac{r_m}{k}, \quad m = 0,1. \tag{6}$$

Очевидно, что преобразование (5), (6) не накладывает специальных ограничений на коэффициенты и, тем самым, является эквивалентным.

Для того, чтобы воспользоваться формулами (5), (6) при аппроксимации краевой задачи (1), (2), необходимо переформулировать и граничные условия (2):

$$\begin{gathered} u(x_m) = \tilde{\mu}_m \equiv \frac{\mu_m}{\lambda_m}, \quad \textit{или} \\ W(x_m) = (-1)^m\left[\tilde{\lambda}_m u(x_m) - \tilde{\mu}_m\right], \quad \tilde{\lambda}_m = \frac{k(x_m)\lambda_m}{\chi_m} + (-1)^m r_0(x_m), \quad \tilde{\mu}_m = \frac{k(x_m)\mu_m}{\chi_m}, \quad m = 0,1. \end{gathered} \tag{2'}$$

Очевидно, что данное преобразование также не влияет на разрешимость рассматриваемой краевой задачи. Далее будем считать что вместо (2) заданы условия (2'), а волну над соответствующими коэффициентами опустим.

3.2 Экспоненциальные схемы для стационарной задачи

Построим сначала разностную схему для стационарной задачи (1), (2) с учётом (5), (6). Для этого на отрезке $[0,1]$ введём некоторую неравномерную сетку $\omega_{\hat{x}} = \{0 = x_0 < x_1 < ... < x_N = 1\}$ с узлами x_i, серединами интервалов $x_{i\pm1/2} = 0.5(x_i + x_{i\pm1})$ и шагами $h_i = x_i - x_{i-1}$, $\hbar_i = 0.5\left(h_i + h_{i+1}\right)$. Далее воспользуемся интегро-интерполяционным методом[10] и проинтегрируем уравнение (1) на интервале $\left[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}\right]$. В результате стандартных преобразований получим следующие разностные уравнения:

$$L_h y_i \equiv \frac{1}{\hbar_i e_{1,i}}\left(e_{1,i+1.2} W_{i+1/2} - e_{1,i-1.2} W_{i-1/2}\right) - \tilde{q}_i y_i = -f_i, \quad i = 1, ..., N-1, \tag{7}$$

где $y_h = \left\{y_i\right\}_{i=0}^{N}$ – сеточное приближение к искомой функции u, $f_h = \left\{f_i\right\}_{i=0}^{N}$ – сеточный аналог правой части f, а L_h – сеточный аналог оператора L, и т.д.. Здесь также использованы следующие обозначения и выражения:

$$W_{i+1/2} = k_{i+1/2} \frac{y_{i+1} e_{0,i+1} - y_i e_{0,i}}{e_{0,i+1/2} h_{i+1}}, \quad \tilde{W}_{i-1/2} = k_{i-1/2} \frac{y_i e_{0,i} - y_{i-1} e_{0,i-1}}{e_{0,i-1/2} h_i}; \tag{8}$$

$$\begin{gathered} k_{i+1/2} = \left(\frac{1}{h_{i+1}} \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{k(x)}\right)^{-1}, \quad k_{i-1/2} = \left(\frac{1}{h_i} \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)}\right)^{-1}; \quad \tilde{q}_i = q_i + \frac{r_{0,i} r_{1,i}}{k_i}; \\ e_{m,i} = \exp\left\{\int\limits_0^{x_i} \tilde{r}_m dx\right\}, \quad e_{m,i\pm1/2} = \exp\left\{\int\limits_0^{x_{i\pm1/2}} \tilde{r}_m dx\right\}, \quad m = 0,1. \end{gathered} \tag{9}$$

Уравнения (7)-(9) описывают так называемую точную схему, которую будем называть *экспоненциальной* вследствие наличия экспоненциальных функций.

Если интегральные выражения в (9) заменить аппроксимациями, получим другие варианты схемы. Например, можно использовать следующие выражения:

$$\begin{gathered} k_{i\pm1/2} \approx \frac{2 k_i k_{i\pm1}}{k_i + k_{i\pm1}}; \quad e_{m,i} \approx \exp\left\{\sum_{j=1}^{i} \frac{1}{2}\left(\tilde{r}_{m,j-1} + \tilde{r}_{m,j}\right) h_j\right\}; \\ e_{m,i-1/2} \approx e_{m,i-1} \exp\left\{\frac{h_i}{8}\left(3\tilde{r}_{m,i-1} + \tilde{r}_{m,i}\right)\right\}, \quad e_{m,i+1/2} \approx e_{m,i} \exp\left\{\frac{h_{i+1}}{8}\left(3\tilde{r}_{m,i} + \tilde{r}_{m,i+1}\right)\right\}, \quad m = 0,1. \end{gathered} \tag{9'}$$

Граничные разностные уравнения запишем сначала в общем виде:

$$L_h y_i = -\overline{f}_i, \quad i = 0, N. \tag{10}$$

Конкретный вид этих уравнений зависит от вариантов граничных условий:

$$\begin{gathered} L_h y_0 \equiv -y_0 = -\overline{f}_0 \equiv -\mu_0, \quad \textit{или} \quad L_h y_0 \equiv \frac{1}{\hbar_0 e_{1,0}}\left(e_{1,1/2} W_{1/2} - e_{1,0} W_0\right) - \tilde{q}_0 y_0 = -f_0; \\ L_h y_N \equiv -y_N = -\overline{f}_N \equiv -\mu_1, \quad \textit{или} \quad L_h y_N \equiv \frac{1}{\hbar_N e_{1,N}}\left(e_{1,N} W_N - e_{1,N-1.2} W_{N-1/2}\right) - \tilde{q}_N y_N = -f_N; \\ W_0 = \lambda_0 y_0 - \mu_0; \quad W_N = -\lambda_1 y_N + \mu_1. \end{gathered} \tag{10'}$$

Проведённое построение не зависит от наличия или отсутствия нелинейности в коэффициентах краевой задачи. Поэтому построенные варианты схемы применимы и в случае зависимости коэффициентов от решения.

Погрешность аппроксимации построенных схем (7)-(10) на равномерных и квазиравномерных сетках имеет порядок $O\left(\hbar^2\right)$.

3.3 Экспоненциальные схемы для нестационарной задачи

Перейдем к нестационарной задаче (3), (2), (4). С учётом экспоненциальных преобразований она переходит в задачу (3), (5), (6), (2), (4). Эту задачу также будем решать в рамках конечно-разностного подхода на произвольной неравномерной сетке по пространству. В качестве сетки по времени возьмём равномерную сетку $\omega_t = \left\{ t_j = j\tau,\, j = 0,...,N_t,\, N_t = t_{\max} / \tau \right\}$ ($t_{\max}$ – величина временного интервала, на котором решается задача, τ – шаг по времени, N_t – число шагов).

Для решения начально-краевой задачи (3), (5), (6), (2), (4) на основе разработанного выше подхода легко построить следующую схему с весами:

$$\frac{\hat{y}_h - y_h}{\tau} = \sigma\left[\hat{L}_h \hat{y}_h + \hat{f}_h\right] + (1-\sigma)\left[L_h y_h + f_h\right], \quad x \in \omega_{\hat{x}}, \quad t \in \omega_t, \tag{11}$$

$$y_h(0) = u_{0h}, \quad x \in \omega_{\hat{x}}. \tag{12}$$

Здесь использованы общепринятые обозначения: $\hat{y}_h = y_h(t+\tau)$, $y_h = y_h(t)$ и т.д. Оператор L_h определен в (7)-(9) и может зависеть от времени.

Вес схемы $\sigma \in [0,1]$, однако традиционно из всего семейства рассматриваются лишь явная ($\sigma = 0$), неявная ($\sigma = 1$) и симметричная ($\sigma = 0.5$) схемы.

В случае нелинейности коэффициентов дифференциальной задачи схема (11), (12) также будет нелинейной, если $\sigma \neq 0$.

Погрешность аппроксимации схемы с весами зависит от веса и на равномерных или квазиравномерных сетках по пространству имеет порядок $O\left(\hbar^2 + \tau\right)$ при $\sigma \neq 0.5$, и $O\left(\hbar^2 + \tau^2\right)$ при $\sigma = 0.5$.

4 РЕАЛИЗАЦИЯ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ

Для реализации построенных схем в пространственно одномерном случае используется алгоритм немонотонной прогонки. Исходно, его можно взять в виде, указанном в [4]. Однако 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 варианты алгоритма прогонки для стационарного и нестационарного случаев.

В квазилинейном случае для реализации построенных схем требуется дополнительно итерационный процесс по нелинейности. В многомерном случае можно рассмотреть как локально-одномерные конечно-разностные схемы, так и конечно-объёмные схемы на нерегулярных треугольных, тетраэдральных и гибридных сетках. Как показано в [8,9], наличие многих пространственных переменных и нерегулярность сетки для построения и реализации предложенных экспоненциальных схем не является препятствием.

4.1 Реализация схем в стационарном случае

Реализация линейной стационарной схемы (7)-(10) производится с помощью алгоритма немонотонной прогонки[4,10]. Для его формулировки запишем сначала уравнения (7) в следующем каноническом виде:

$$
\begin{gathered}
-A_{i-1} y_{i-1} + C_i y_i - B_{i+1} y_{i+1} = F_i, \quad 1 \le i \le N-1, \\
C_0 y_0 - B_0 y_1 = F_0, \quad C_N y_N - A_N y_{N-1} = F_N.
\end{gathered}
\tag{13}
$$

Коэффициенты в (13) определяются следующим образом:

$$
\begin{aligned}
& A_i = k_{i+1/2} \frac{e_{1,i+1/2} e_{0,i}}{e_{0,i+1/2} h_{i+1}}, \quad i = 0,\ldots,N-1; \\
& B_i = k_{i-1/2} \frac{e_{1,i-1/2} e_{0,i}}{e_{0,i-1/2} h_i}, \quad i = 1,\ldots,N; \\
& C_i = k_{i+1/2} \frac{e_{1,i+1/2} e_{0,i}}{e_{0,i+1/2} h_{i+1}} + k_{i-1/2} \frac{e_{1,i-1/2} e_{0,i}}{e_{0,i-1/2} h_i} + \hbar_i e_{1,i} \tilde{q}_i \equiv A_i + B_i + D_i, \quad i = 1,\ldots,N-1; \\
& F_i = \hbar_i e_{1,i} f_i, \quad i = 1,\ldots,N-1.
\end{aligned}
\tag{14}
$$

Граничные коэффициенты на левой границе определяются выражениями:

$$
\begin{aligned}
& B_0 = 0, \quad C_0 = 1, \quad F_0 = \mu_0, \quad \textit{или} \\
& B_0 = k_{1/2} \frac{e_{1,1/2} e_{0,1}}{e_{0,1/2} h_1}, \quad C_0 = k_{1/2} \frac{e_{1,1/2} e_{0,0}}{e_{0,1/2} h_1} + \hbar_0 e_{1,0} \tilde{q}_0 + e_{1,0} \lambda_0, \\
& F_0 = \hbar_0 e_{1,0} f_0 + e_{1,0} \mu_0.
\end{aligned}
\tag{14'}
$$

Граничные коэффициенты на правой границе определяются выражениями:

$$
\begin{aligned}
& A_N = 0, \quad C_N = 1, \quad F_N = \mu_1, \quad \textit{или} \\
& A_N = k_{N-1/2} \frac{e_{1,N-1/2} e_{0,N-1}}{e_{0,N-1/2} h_N}, \quad C_N = k_{N-1/2} \frac{e_{1,N-1/2} e_{0,N}}{e_{0,N-1/2} h_N} + \hbar_N e_{1,N} \tilde{q}_N + e_{1,N} \lambda_1, \\
& F_N = \hbar_N e_{1,N} f_N + e_{1,N} \mu_1.
\end{aligned}
\tag{14''}
$$

Будем предполагать, что разностная сетка выбрана таким образом, что коэффициенты C_i строго положительны. Тогда можно показать, что алгебраическая задача (13) однозначно разрешима.

Введём далее сеточные функции:

$$\xi_i^+ = \frac{e_{0,i}}{e_{0,i+1/2}} = \exp\left[-\int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \tilde{r}_0 dx\right] \approx \exp\left[-\frac{1}{8} h_{i+1}\left(3\tilde{r}_{0,i} + \tilde{r}_{0,i+1}\right)\right], \quad i = 0,\dots,N-1;$$

$$\xi_i^- = \frac{e_{0,i}}{e_{0,i-1/2}} = \exp\left[+\int_{x_{i-1/2}}^{x_i} \tilde{r}_0 dx\right] \approx \exp\left[+\frac{1}{8} h_i\left(3\tilde{r}_{0,i} + \tilde{r}_{0,i-1}\right)\right], \quad i = 1,\dots,N;$$

$$\eta_i^+ = \frac{e_{1,i+1/2}}{e_{1,i}} = \exp\left[+\int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \tilde{r}_1 dx\right] \approx \exp\left[+\frac{1}{8} h_{i+1}\left(3\tilde{r}_{1,i} + \tilde{r}_{1,i+1}\right)\right], \quad i = 0,\dots,N-1;$$

$$\eta_i^- = \frac{e_{1,i-1/2}}{e_{1,i}} = \exp\left[-\int_{x_{i-1/2}}^{x_i} \tilde{r}_1 dx\right] \approx \exp\left[-\frac{1}{8} h_i\left(3\tilde{r}_{1,i} + \tilde{r}_{1,i-1}\right)\right], \quad i = 1,\dots,N; \tag{15}$$

$$\theta_i^+ = \frac{e_{0,i+1}}{e_{0,i}} = \exp\left[+\int_{x_i}^{x_{i+1}} \tilde{r}_0 dx\right] \approx \exp\left[+\frac{1}{2} h_{i+1}\left(\tilde{r}_{0,i} + \tilde{r}_{0,i+1}\right)\right], \quad i = 0,\dots,N-1;$$

$$\theta_i^- = \frac{e_{0,i-1}}{e_{0,i}} = \exp\left[-\int_{x_{i-1}}^{x_i} \tilde{r}_0 dx\right] \approx \exp\left[-\frac{1}{2} h_i\left(\tilde{r}_{0,i} + \tilde{r}_{0,i-1}\right)\right], \quad i = 1,\dots,N;$$

$$\gamma_i^+ = \frac{\hbar_i}{h_{i+1}}, \quad i = 0,\dots,N-1; \quad \gamma_i^- = \frac{\hbar_i}{h_i}, \quad i = 1,\dots,N.$$

Тогда коэффициенты в (13) можно представить следующим образом:

$$A_i = \frac{e_{1,i}}{\hbar_i}\left(k_{i+1/2}\eta_i^+\xi_i^+\gamma_i^+\right), \quad i = 0,\dots,N-1;$$

$$B_i = \frac{e_{1,i}}{\hbar_i}\left(k_{i-1/2}\eta_i^-\xi_i^-\gamma_i^-\right), \quad i = 1,\dots,N;$$

$$C_i = \frac{e_{1,i}}{\hbar_i}\left(k_{i+1/2}\eta_i^+\xi_i^+\gamma_i^+ + k_{i-1/2}\eta_i^-\xi_i^-\gamma_i^- + \hbar_i^2\tilde{q}_i\right), \quad i = 1,\dots,N-1; \tag{16}$$

$$F_i = \frac{e_{1,i}}{\hbar_i}\left(\hbar_i^2 f_i\right), \quad i = 1,\dots,N-1;$$

$$B_0 = 0, \quad C_0 = 1, \quad F_0 = \mu_0, \quad \text{или}$$

$$B_0 = \frac{e_{1,0}}{\hbar_0}\left(k_{1/2}\eta_0^+\xi_1^-\gamma_0^+\right), \quad C_0 = \frac{e_{1,0}}{\hbar_0}\left(k_{1/2}\eta_0^+\xi_0^+\gamma_0^+ + \hbar_0^2\tilde{q}_0 + \hbar_0\eta_0^+\lambda_0\right), \tag{16'}$$

$$F_0 = \frac{e_{1,0}}{\hbar_0}\left(\hbar_0^2 f_0 + \hbar_0\eta_0^+\mu_0\right);$$

$$A_N = 0, \quad C_N = 1, \quad F_N = \mu_1, \quad \text{или}$$

$$A_N = \frac{e_{1,N}}{\hbar_N}\left(k_{N-1/2}\eta_N^-\xi_{N-1}^+\gamma_N^-\right), \quad C_N = \frac{e_{1,N}}{\hbar_N}\left(k_{N-1/2}\eta_N^-\xi_N^-\gamma_N^- + \hbar_N^2\tilde{q}_N + \hbar_N\eta_N^-\lambda_1\right), \tag{16''}$$

$$F_N = \frac{e_{1,N}}{\hbar_N}\left(\hbar_N^2 f_N + \hbar_N\eta_N^-\lambda_1\mu_1\right).$$

Рассмотрим далее алгоритм правой немонотонной прогонки:

$$
\begin{aligned}
&\alpha_0 = \frac{A_0 B_0}{B_1 C_0}, \quad \beta_0 = \frac{F_0}{C_0}, \\
&\alpha_i = \frac{A_i}{C_i - B_i \alpha_{i-1}}, \quad \beta_i = \frac{F_i + A_{i-1}\beta_{i-1}}{C_i - B_i \alpha_{i-1}}, \quad i = 1, \dots, N-1; \\
&y_N = \frac{F_N + A_N \beta_{N-1}}{C_N - A_N \left(B_N / A_{N-1}\right)\alpha_{N-1}}, \quad y_i = \frac{B_{i+1}}{A_i}\alpha_i y_{i+1} + \beta_i, \quad i = N-1, \dots, 0.
\end{aligned} \tag{17}
$$

Подставим значения коэффициентов (16) и преобразуем формулы (17):

$$
\begin{aligned}
&\alpha_0 = 0, \quad \beta_0 = \mu_0, \quad \textit{или} \\
&\alpha_0 = \frac{k_{1/2}\eta_0^+ \xi_0^+ \gamma_0^+}{k_{1/2}\eta_0^+ \xi_0^+ \gamma_0^+ + \hbar_0^2 \tilde{q}_0 + \hbar_0 \eta_0^+ \lambda_0}, \quad \beta_0 = \frac{\hbar_0^2 f_0 + \hbar_0 \eta_0^+ \mu_0}{k_{1/2}\eta_0^+ \xi_0^+ \gamma_0^+ + \hbar_0^2 \tilde{q}_0 + \hbar_0 \eta_0^+ \lambda_0}; \\
&\alpha_i = \frac{k_{i+1/2}\eta_i^+ \xi_i^+ \gamma_i^+}{k_{i+1/2}\eta_i^+ \xi_i^+ \gamma_i^+ + k_{i-1/2}\eta_i^- \xi_i^- \gamma_i^- \left(1 - \alpha_{i-1}\right) + \hbar_i^2 \tilde{q}_i}, \\
&\beta_i = \frac{\hbar_i^2 f_i + k_{i-1/2}\eta_i^- \xi_{i-1}^+ \gamma_i^- \beta_{i-1}}{k_{i+1/2}\eta_i^+ \xi_i^+ \gamma_i^+ + k_{i-1/2}\eta_i^- \xi_i^- \gamma_i^- \left(1 - \alpha_{i-1}\right) + \hbar_i^2 \tilde{q}_i}, \quad i = 1, \dots, N-1; \\
&y_N = \mu_1, \quad \textit{или} \\
&y_N = \frac{\hbar_N^2 f_N + \hbar_N \eta_N^- \mu_1 + k_{N-1/2}\eta_N^- \xi_{N-1}^- \gamma_N^- \beta_{N-1}}{\hbar_N^2 \tilde{q}_N + \hbar_N \eta_N^- \lambda_1 + k_{N-1/2}\eta_N^- \xi_N^- \gamma_N^- \left(1 - \alpha_{N-1}\right)}; \\
&y_i = \theta_i^+ \alpha_i y_{i+1} + \beta_i, \quad i = N-1, \dots, 0.
\end{aligned} \tag{18}
$$

Аналогично рассмотрим алгоритм левой немонотонной прогонки:

$$
\begin{aligned}
&\alpha_N = \frac{B_N A_N}{A_{N-1} C_N}, \quad \beta_N = \frac{F_N}{C_N}, \\
&\alpha_i = \frac{B_i}{C_i - A_i \alpha_{i+1}}, \quad \beta_i = \frac{F_i + B_{i+1}\beta_{i+1}}{C_i - A_i \alpha_{i+1}}, \quad i = N-1, \dots, 1; \\
&y_0 = \frac{F_0 + B_0 \beta_1}{C_0 - B_0 \left(A_0 / B_1\right)\alpha_1}, \quad y_i = \frac{A_{i-1}}{B_i}\alpha_i y_{i-1} + \beta_i, \quad i = 1, \dots, N.
\end{aligned} \tag{19}
$$

При подстановке коэффициентов (16) получим:

$$
\begin{aligned}
&\alpha_N = 0, \quad \beta_N = \mu_1, \quad \textit{или} \\
&\alpha_N = \frac{k_{N-1/2}\eta_N^- \xi_N^- \gamma_N^-}{k_{N-1/2}\eta_N^- \xi_N^- \gamma_N^- + \hbar_N^2 \tilde{q}_N + \hbar_N \eta_N^- \lambda_1}, \quad \beta_N = \frac{\hbar_N^2 f_N + \hbar_N \eta_N^- \mu_1}{k_{N-1/2}\eta_N^- \xi_N^- \gamma_N^- + \hbar_N^2 \tilde{q}_N + \hbar_N \eta_N^- \lambda_1}; \\
&\alpha_i = \frac{k_{i-1/2}\eta_i^- \xi_i^- \gamma_i^-}{k_{i+1/2}\eta_i^+ \xi_i^+ \gamma_i^+ \left(1 - \alpha_{i+1}\right) + k_{i-1/2}\eta_i^- \xi_i^- \gamma_i^- + \hbar_i^2 \tilde{q}_i}, \\
&\beta_i = \frac{\hbar_i^2 f_i + k_{i+1/2}\eta_i^+ \xi_{i+1}^- \gamma_i^+ \beta_{i+1}}{k_{i+1/2}\eta_i^+ \xi_i^+ \gamma_i^+ \left(1 - \alpha_{i+1}\right) + k_{i-1/2}\eta_i^- \xi_i^- \gamma_i^- + \hbar_i^2 \tilde{q}_i}, \quad i = N-1, \dots, 1; \\
&y_0 = \mu_0, \quad \textit{или} \\
&y_0 = \frac{F_0 + B_0 \beta_1}{C_0 - B_0 \theta_1^- \alpha_1} = \frac{\hbar_0^2 f_0 + \hbar_0 \eta_0^+ \mu_0 + k_{1/2}\eta_0^+ \xi_1^- \gamma_0^+ \beta_1}{k_{1/2}\eta_0^+ \xi_0^+ \gamma_0^+ \left(1 - \alpha_1\right) + \hbar_0^2 \tilde{q}_0 + \hbar_0 \eta_0^+ \lambda_0}; \\
&y_i = \theta_i^- \alpha_i y_{i-1} + \beta_i, \quad i = 1, \dots, N.
\end{aligned} \tag{20}
$$

Как видно из (18) и (20), окончательные формулы правой и левой немонотонной прогонки позволяют при реализации не вычислять полностью экспоненциальные множители, а ограничиться их отношениями в соседних узлах.

Анализ устойчивости формул (18), (20) показывает, что в этих случаях достаточно неположительности, неотрицательности функции $r_0(x)$ на всём интервале интегрирования.

Если функция $r_0(x)$ меняет знак на интервале интегрирования, то перед использованием формул прогонки необходимо найти все смежные интервалы сетки, на которых выполняется условие устойчивости правой или левой прогонки:

$$I_k = \left\{ x_i : \theta_i^+ \le 1 \, или \, \theta_i^- \le 1, i = i_{k1}, \dots i_{k2} \right\}, \quad k = 1, \dots, M. \tag{21}$$

Здесь M – количество смежных интервалов, на которых функция $r_0(x)$ имеет постоянный знак. Очевидно, что количество таких интервалов на единицу больше, чем число перемен знака функции $r_0(x)$. При этом точное знание точек перемен знака не требуется.

В итоге в указанной ситуации можно применять комбинированный алгоритм, сочетающий вычисления по формулам правой и левой немонотонной прогонки. Этот алгоритм фактически совпадает с алгоритмом параллельной прогонки, подробно рассмотренном в [7]. Он предполагает представление решения на каждом частичном интервале в виде линейной комбинации трёх так называемых базисных функций:

$$y_i^{(k)} = y_i^{(I,k)} + y_{i_{k1}} y_i^{(II,k)} + y_{i_{k2}} y_i^{(III,k)}, \quad i \in I_k. \tag{22}$$

Вычисление базисных функций производится с помощью формул правой или левой немонотонной прогонки на основе трёх задач вида (13) с соответствующими граничными условиями в узлах i_{k1} и i_{k2}.

Далее формулируется и решается задача для поиска стыковочных значений $y_{i_{k1}}$ и $y_{i_{k2}}$ (подробнее см. [7]). Разрешимость этой "короткой" задачи полностью зависит от разрешимости исходной задачи. Метод решения короткой задачи – правая или левая обыкновенная прогонка, т. к. вблизи стыковочных узлов оператор L_h становится монотонным. Однако для страховки можно использовать и ленточный метод Гаусса с выбором главного элемента.

Реализация нелинейной стационарной схемы (7)-(10) производится с помощью итераций по нелинейности. В качестве итерационного процесса можно использовать как простые итерации, так и итерации по Ньютону. Решение на новой итерации находится с помощью изложенного выше алгоритма немонотонной прогонки.

4.2 Реализация схем в нестационарном случае

Представим схему (11) в следующем виде:

$$\left(E - \tau\sigma \hat{L}_h \right) \hat{y}_h = \left(E + \tau\left(1-\sigma\right) L_h \right) y_h + \tau\sigma \hat{f}_h + \tau\left(1-\sigma\right) f_h. \tag{23}$$

Если вес $\sigma = 0$, эти уравнения превращаются в простые расчётные формулы.

Если вес $\sigma \ne 0$, то они реализуются с помощью алгоритма немонотонной прогонки. Для этого уравнения (23) следует дополнительно умножить на $\hbar \hat{e}_1$ и использовать формулы (18) или (20). В случае достаточной малости шага τ можно не учитывать наличие перемен знака у функции $\hat{r}_0$, однако в общем случае это следует делать.

Если исходная дифференциальная задача нелинейна, а вес $\sigma \ne 0$, то при реализации перехода с одного временного слоя на другой потребуется итерационный процесс. В качестве такого процесса также можно использовать простые итерации или итерации по Ньютону. На шаге итерационного процесса новое приближение находится методом немонотонной прогонки.

5 РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА ПРЕДЛОЖЕННЫХ СХЕМ

Рассмотрим некоторые результаты численного анализа предложенных экспоненциальных схем. Данное исследование было проведено на примере стационарной задачи. Дополнительно в некоторых расчётах строилась квазиравномерная сетка, адаптирующаяся к особенностям решения.

Первый тестовый расчёт был проведён для линейной задачи (1), (2) с коэффициентами

$$k(x)=1+100\cdot(x-0.5)^2,\quad r_0(x)=\sin(4\pi x),\quad r_1(x)\equiv 0,\quad q(x)=2+\sin(0.5\pi x). \tag{24}$$

Граничные условия 1-го рода соответствовали решению $u(x)=\sin(0.5\pi x)+\cos(0.5\pi x)$. Расчёты на равномерной сетке подтвердили сходимость разработанной схемы к точному решению со скоростью $O(h^2)$.

Второй тестовый расчёт проводился для условий Дирихле $u=1$ на обоих концах отрезка. При этом функции $k(x)\equiv 1$, $r_1(x)\equiv 0$, $q(x)\equiv 0$, $f(x)\equiv 0$. Функция $r_0(x)$ была разрывной и задавалась в виде:

$$r_0(x)=\begin{cases}+\alpha_1\cdot e^{+\beta_1(x-0.5)}, & x\le 0.5;\\ -\alpha_2\cdot e^{-\beta_2(x-0.5)}, & x>0.5.\end{cases} \tag{25}$$

Параметры $\alpha_2=1,\quad \beta_1=5,\quad \beta_2=5,$ – были фиксированы, а параметр α_1 варьировался. Рассмотрим поведение схемы для значений параметра $\alpha_1=10,50,250$. На Рис. 1, 2 показаны вид функции $r_0(x)$ и итоговый профиль разностного решения на адаптивной сетке для $\alpha_1=10,250$. Расчёты подтверждают работоспособность и сходимость схемы при довольно жёстких условиях.

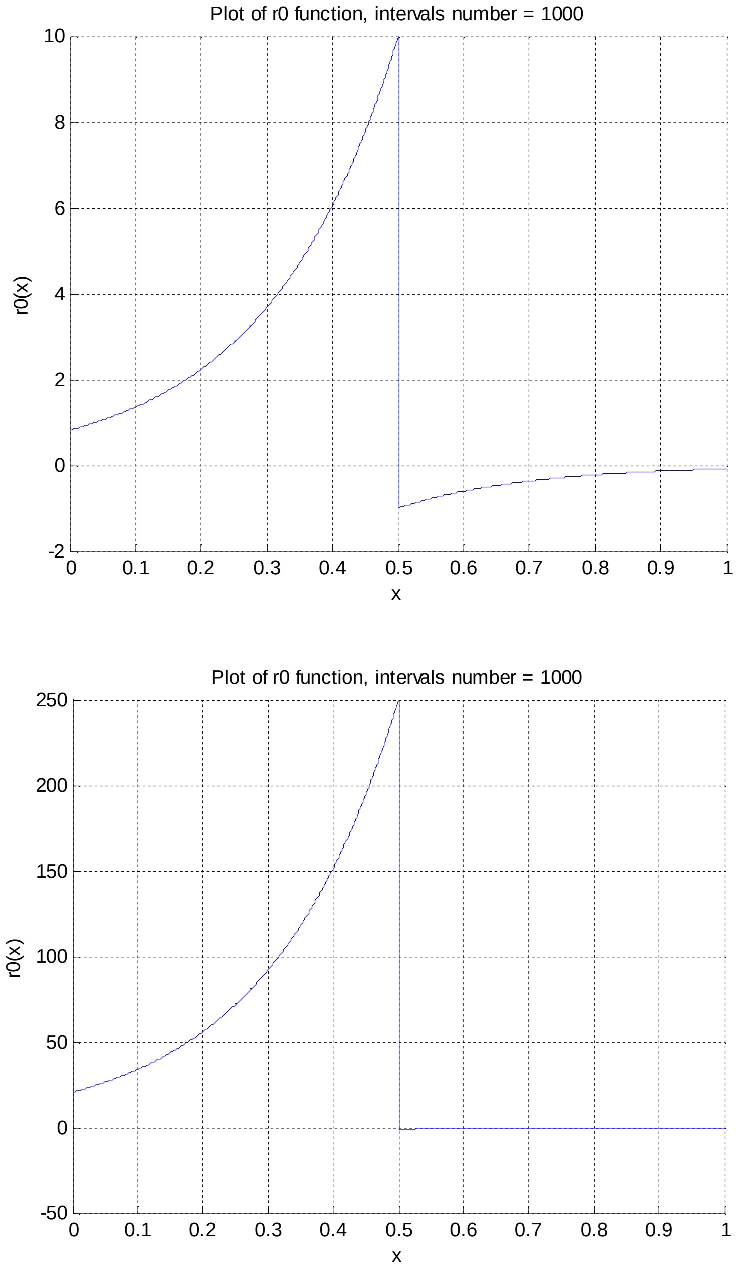
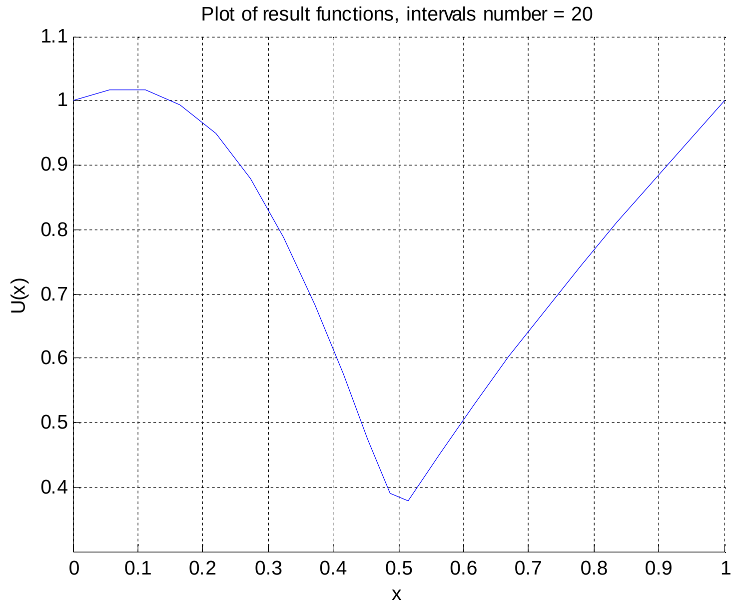


Рис. 1: Вид функции $r_0(x)$ для $\alpha_1 = 10, 250$



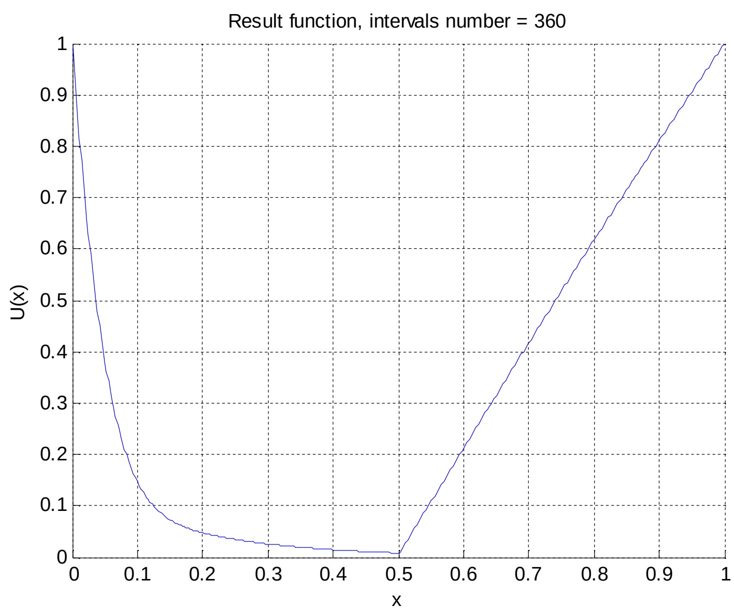


Рис. 2: Вид решения $u(x)$ на адаптивной сетке для $\alpha_1 = 10, 250$

Третий тестовый расчёт отличался от второго тем, что параметр $\alpha_1 = 10$, а функция $r_1 \equiv const = \gamma$. Параметр $\gamma = \pm 1, \pm 10$. В данном случае было важно подтвердить работоспособность разностной схемы и понять, как влияет конвекция на решение. На Рис. 3, 4 показан вид итогового решения. Из рисунков видно, что при данных значениях параметров адаптация сетки не требуется, а измельчение необходимо для второй серии расчётов. При этом отрицательные значения γ приводят к сглаживанию решения, а положительные – к увеличению особенности, вызванной разрывом функции r_0.

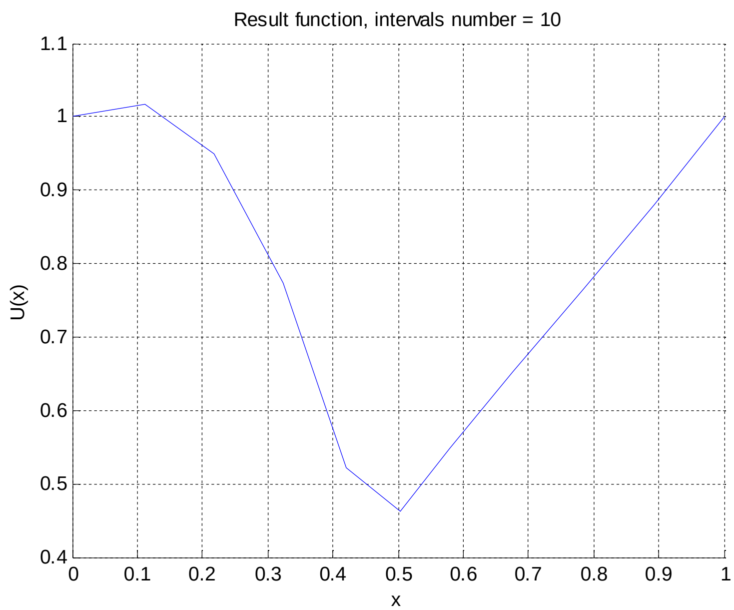
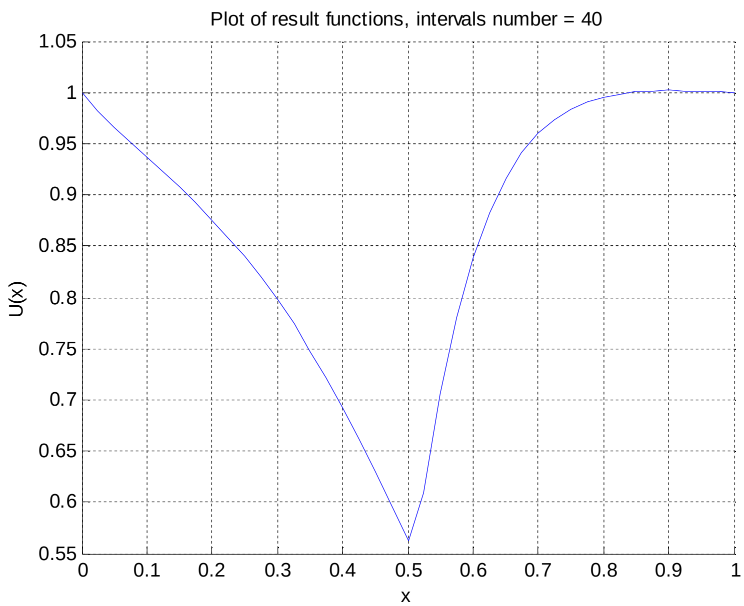


Рис. 3: Вид решения $u(x)$ на крупной равномерной сетке для $\gamma = +1, -1$



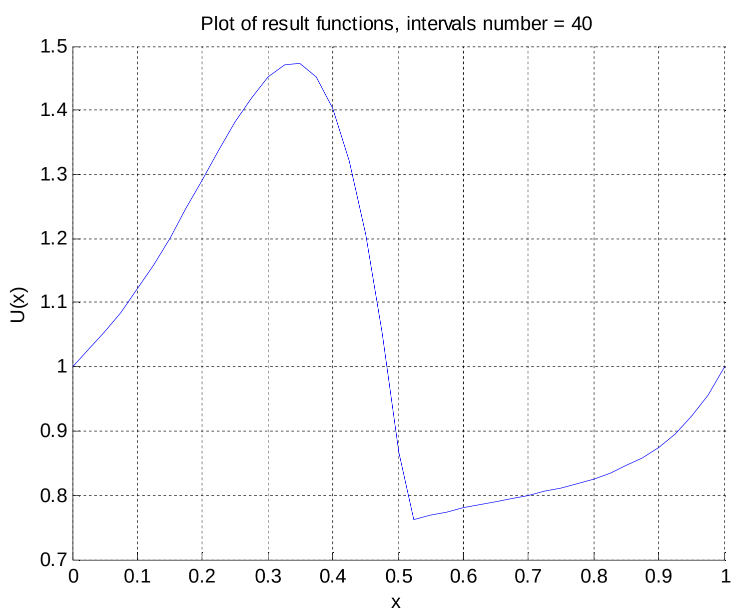


Рис. 4: Вид решения $u(x)$ на подробной равномерной сетке для $\gamma = +10, -10$

Четвёртый расчёт касался прикладной задачи, связанной с моделированием электронных процессов в полупроводниковой структуре с двойным гетеропереходом, использующейся для реализации явления сверхинжекции в гетеролазерах [11]. Функция $r_0(x)$ в этом случае совпадает с распределением электрического поля в гетеропереходе (см. Рис. 5). Искомая функция $u(x)$ совпадает с концентрацией неравновесных носителей заряда. Проведённые модельные расчёты показали, что разработанная разностная схема позволяет рассчитать распределение носителей заряда (Рис. 6) с высокой точностью.

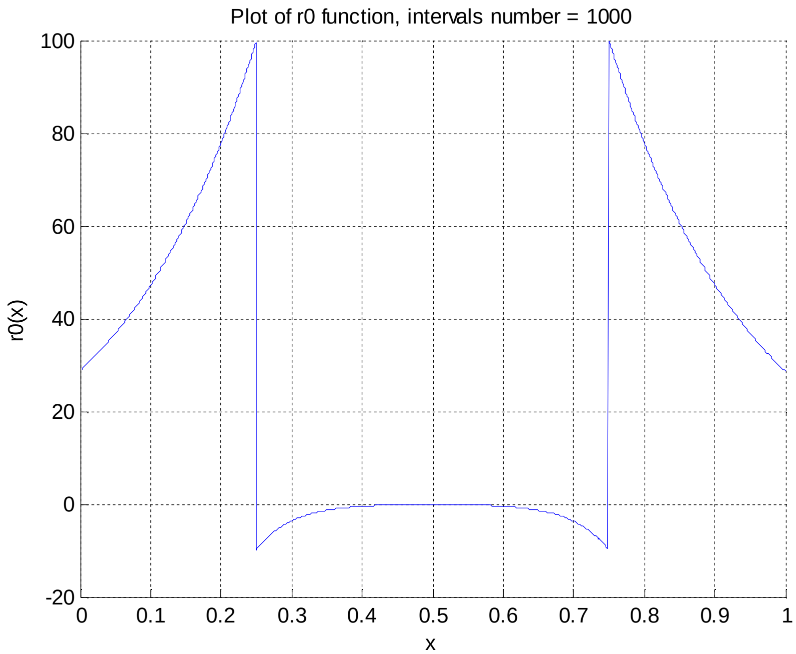


Рис. 5: Вид функции $r_0(x)$ – распределение электрического поля в двойном гетеропереходе

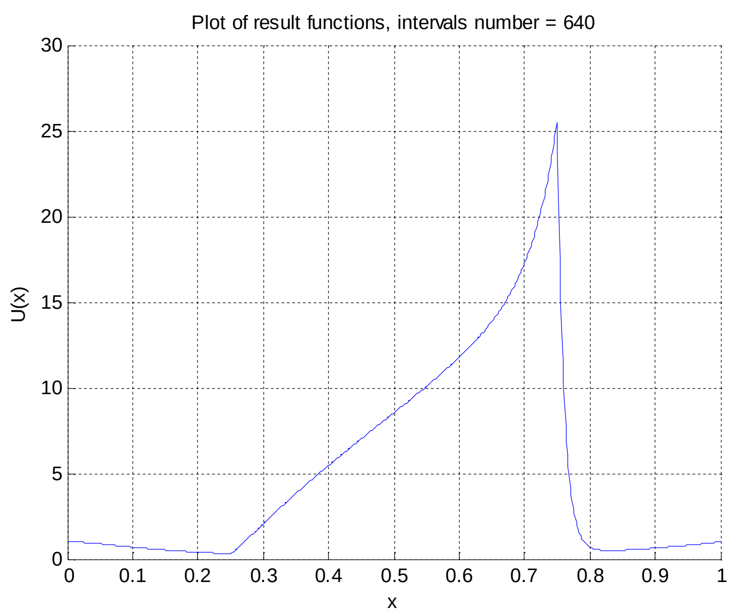


Рис. 6: Вид решения $u(x)$ (концентрация носителей заряда в гетеропереходе) на адаптивной сетке

6 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- На примере пространственно-одномерной задачи предложено новое семейство экспоненциальных схем с двойным интегральным преобразованием.
- Предложенные схемы обладают консервативностью, слабой монотонностью и сходимостью к решению дифференциальной задачи со вторым порядком точности при использовании равномерных и квазиравномерных сеток.

- Проведено тестирование предложенных схем на примере стационарных модельных краевых задач, подтвердившее заявляемые свойства.

ЛИТЕРАТУРА

[1] А.А. Самарский, А.П. Михайлов, *Математическое моделирование*, Физматлит (1997).

[2] А.А. Самарский, *О монотонных разностных схемах для эллиптических и параболических уравнений в случае несамосопряженного эллиптического оператора*, ЖВМиМФ, **5**(3), 548-551 (1965).

[3] Е.И. Голант, *О сопряженных семействах разностных схем для уравнений параболического типа с младшими членами*, ЖВМиМФ, **18**(5), 1162-1169 (1978).

[4] Н.В. Кареткина, *Безусловно устойчивая разностная схема для параболических уравнений, содержащих первые производные*, ЖВМиМФ, **20**(1), 236-240 (1980).

[5] И.В. Фрязинов, *Метод баланса и вариационно-разностные схемы*, Диф. уравнения, **16**(7), 1332-1343 (1980).

[6] С.В. Поляков, В.А. Сабликов, *Латеральный перенос фотоиндуцированных носителей заряда в гетероструктурах с двумерным электронным газом*, Математическое моделирование, **9**(12), 76-86 (1997).

[7] Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков, *О некоторых методах решения краевых задач на многопроцессорных вычислительных системах*, Труды четвертой международной конференции по математическому моделированию (под ред. Л.А. Уваровой), Изд-во "СТАНКИН", **2**, 134-145 (2001).

[8] С.В. Поляков, *Экспоненциальные схемы для решения эволюционных уравнений на нерегулярных сетках*, Ученые записки казанского государственного университета, Серия "Физико-математические науки, **149**(4), 121-131 (2007).

[9] Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков, *Экспоненциальные конечно-объёмные схемы для решения эллиптических и параболических уравнений общего вида на нерегулярных сетках*, Сеточные методы для краевых задач и приложения, Материалы Восьмой Всероссийской конференции, посвященной 80-летию со дня рождения А.Д. Ляшко, Изд-во Казанского гос. университета, 234-248 (2010).

[10] А.А. Самарский, *Введение в теорию разностных схем*, Наука (1971).

[11] Р.Ф. Казаринов, Р.А. Сурис, *Сверхинжекция носителей в варизонных* p-n-*структурах*, ФТП, **9**(1), 12-16 (1975)

ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМ. М.В. КЕЛДЫША РАН
МОСКВА, РОССИЯ

E-mail address: polyakov@imamod.ru, web page: http://www.imamod.ru/~serge

Received September 3, 2012