Сибирский математический журнал
Ноябрь—декабрь, 2007. Том 48, № 6

УДК 519.633

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ ПО НЕЙМАНУ СИММЕТРИЧНЫХ СХЕМ ВЫСОКОГО ПОРЯДКА ДЛЯ ЗАДАЧ КОНВЕКЦИИ–ДИФФУЗИИ

О. В. Шишкина

Аннотация. Найден ряд достаточных условий устойчивости по Нейману схемы lepafrog-Эйлера любого четного порядка по пространственным координатам для трехмерного уравнения конвекции-диффузии.

Ключевые слова: устойчивость по Нейману, конвекция-диффузия, схемы высокого порядка, метод конечных объемов.

1. Введение

Устойчивость конечно-разностной, конечно-элементной или конечно-объемной схемы для численного решения некоторой задачи является ее основной характеристикой, позволяющей контролировать возможный рост ошибки с течением времени, и выражается в том, что при любых начальных условиях, задаваемых ограниченными функциями, полученное численное решение также ограничено. Исследованию устойчивости конечно-разностных схем посвящены монографии и главы учебников [1–4].

При моделировании сложных физических, биологических и инженерных процессов с использованием схем высокого порядка точности зачастую не представляется возможным получить достаточные условия ограниченности численного решения задачи, равно как и оценить энергетическую норму оператора перехода, связывающего численное решение на различных временных слоях. В таких случаях схема исследуется на устойчивость в смысле фон Неймана, где вместо ограниченности решения требуется невозрастание компонент его Фурье-разложения. Такой подход допускает, вообще говоря, умеренный рост по времени t численного решения задачи как $O(t)$, но исключает угрозу коллапса вычислений. Поэтому для сложных прикладных задач анализ устойчивости по Нейману играет исключительно важную роль.

Метод Неймана, описанный в монографиях [2–4], применим для анализа вычислительной устойчивости конечно-разностных, конечно-элементных и конечно-объемных схем для линейных дифференциальных уравнений в неограниченных областях. В случае нелинейных уравнений анализируются их линеаризованные варианты. Так, например, в случае уравнения конвекции-диффузии

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^{3} U_\alpha \frac{\partial\varphi}{\partial x_\alpha} = \mu \sum_{\alpha=1}^{3} \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_\alpha^2} \tag{1}$$

для φ — некоторой характеристики течения (например, температуры или компоненты скорости) — предполагаются постоянными коэффициент диффузии $\mu > 0$

и U_α — компонента скорости по координате x_α, $\alpha = 1, 2, 3$. Далее, точное решение линейного уравнения представляется в виде суммы частных решений, выраженных волновыми гармониками:

$$\varphi_j^n = A^n_{k_1,k_2,k_3} \exp\left(i \sum_{\alpha=1}^{3} j_\alpha \theta_\alpha\right), \tag{2}$$

где $\theta_\alpha = k_\alpha \Delta x_\alpha$, $\alpha = 1, 2, 3$, i — мнимая единица, $j = (j_1, j_2, j_3)$ — вектор пространственных координат, n — номер временного шага, k_α — вещественное волновое число, Δx_α — диаметр сетки по координате x_α и амплитуды $A^n_{k_1,k_2,k_3}$ решения на соседних по времени уровнях связаны соотношением

$$A^{n+1}_{k_1,k_2,k_3} = G A^n_{k_1,k_2,k_3}, \tag{3}$$

где G — комплексное число, называемое амплитудным множителем перехода. Уравнение для нахождения амплитудного множителя перехода G получается путем подстановки точного решения (2) в исследуемую схему. Если абсолютные значения амплитудных множителей перехода G не превосходят 1 для всех волновых чисел, то исследуемая схема устойчива по Нейману.

Для моделирования турбулентных течений особое значение имеют схемы высокого порядка точности. Из практики известно, что повышение порядка схемы вызывает, как правило, сужение области устойчивости, выраженной в величинах C_α и D_α. Здесь C_α — число Куранта,

$$C_\alpha = \frac{U_\alpha \Delta t}{\Delta x_\alpha}, \quad D_\alpha = \frac{\mu \Delta t}{\Delta x_\alpha^2}, \quad \alpha = 1, 2, 3, \tag{4}$$

и Δt — шаг по времени.

В данной работе исследуется устойчивость по Нейману схемы leapfrog-Эйлера [5], популярной в моделировании сложных прикладных задач, благодаря ее применимости к решению задач конвекции-диффузии с большим числом Пекле

$$\mathrm{Pe}_\alpha = C_\alpha / D_\alpha.$$

Доказывается достаточное условие устойчивости схемы, использующей центральные аппроксимации произвольного четного порядка по пространственным координатам. В случае схемы leapfrog-Эйлера второго порядка по пространственным координатам полученные достаточное условие и критерий устойчивости совпадают с результатами Шуманна [5], Чана [6] и Весселинга [7]. Установленные в работе оценки критического шага по времени, гарантирующего устойчивость по Нейману схемы с центральными аппроксимациями второго и четвертого порядков, успешно использовались при моделировании таких сложных турбулентных процессов, как течение в трубе при больших числах Рейнольдса [8] и конвекция Рэлея — Бенара при больших числах Рэлея [9].

2. Анализ устойчивости схемы leapfrog-Эйлера

Рассмотрим схему leapfrog-Эйлера для решения уравнения конвекции-диффузии (1), записываемую в общем виде следующим образом:

$$\frac{\varphi_j^{n+1} - \varphi_j^{n-1}}{2} + \sum_{\alpha=1}^{3} C_\alpha \big(\varphi^n_{j+0.5e_\alpha} - \varphi^n_{j-0.5e_\alpha}\big) = \sum_{\alpha=1}^{3} D_\alpha \Delta x_\alpha \big(\big(\varphi^{n-1}_{j+0.5e_\alpha}\big)' - \big(\varphi^{n-1}_{j-0.5e_\alpha}\big)'\big), \tag{5}$$

$$D_\alpha \geq 0, \quad \alpha = 1,2,3, \tag{6}$$

где $\varphi^n_{j+0.5e_\alpha}$ и $\big(\varphi^{n-1}_{j+0.5e_\alpha}\big)'$ — некоторые аппроксимации соответственно решения и его частной производной по x_α в точке, расположенной между узлами j и $j+e_\alpha$ и равноудаленной от них, $e_1 = (1,0,0)$, $e_2 = (0,1,0)$, $e_3 = (0,0,1)$. Величины C_α и D_α, $\alpha = 1,2,3$, заданы (4).

Для аппроксимации величин $\varphi^n_{j+0.5e_\alpha}$ и $\big(\varphi^{n-1}_{j+0.5e_\alpha}\big)'$ рассмотрим следующие симметричные схемы порядка $2m$, $m \in \mathbb{N}$:

$$\varphi^n_{j+0.5e_\alpha} = \sum_{\beta=1}^{m} a_\beta \big(\varphi^n_{j+\beta e_\alpha} + \varphi^n_{j-(\beta-1)e_\alpha}\big), \tag{7}$$

$$\big(\varphi^{n-1}_{j+0.5e_\alpha}\big)' = \sum_{\beta=1}^{m} \frac{b_\beta}{\Delta x_\alpha} \big(\varphi^{n-1}_{j+\beta e_\alpha} - \varphi^{n-1}_{j-(\beta-1)e_\alpha}\big),$$

с наборами коэффициентов $\{a_\beta\}_{\beta=1}^m$ и $\{b_\beta\}_{\beta=1}^m$, ограниченных условием

$$\sum_{\beta=1}^{m} b_\beta (\cos((\beta-1)\theta_\alpha) - \cos(\beta\theta_\alpha)) \geq 0 \quad \forall \theta_\alpha \in [-\pi, \pi] \tag{8}$$

(здесь под порядком понимается число вовлеченных значений $\varphi^n_{j\pm\beta e_\alpha}$ для вычисления $\varphi^n_{j+0.5e_\alpha}$).

Схема (7), (8) охватывает широкий класс симметричных схем. Так, например, в методе конечных объемов схема второго порядка ($m = 1$) для аппроксимации решения и его частных производных на границе между конечными объемами j и $j + e_\alpha$ определяется следующим образом: $a_1 = 1/2$, $b_1 = 1$,

$$\varphi^n_{j+0.5e_\alpha} = \frac{\varphi^n_{j+e_\alpha} + \varphi^n_j}{2}, \quad \big(\varphi^{n-1}_{j+0.5e_\alpha}\big)' = \frac{\varphi^{n-1}_{j+e_\alpha} - \varphi^{n-1}_j}{\Delta x_\alpha}, \tag{9}$$

в то время как схема четвертого порядка ($m = 2$) задается соотношениями

$$\begin{gathered} a_1 = 7/12,\ a_2 = -1/12,\ b_1 = 15/12,\ b_2 = -1/12, \\ \varphi^n_{j+0.5e_\alpha} = \frac{1}{12}\big(-\varphi^n_{j+2e_\alpha} + 7\varphi^n_{j+e_\alpha} + 7\varphi^n_j - \varphi^n_{j-e_\alpha}\big); \\ \big(\varphi^{n-1}_{j+0.5e_\alpha}\big)' = \frac{1}{12\Delta x_\alpha}\left(-\varphi^{n-1}_{j+2e_\alpha} + 15\varphi^{n-1}_{j+e_\alpha} - 15\varphi^{n-1}_j + \varphi^{n-1}_{j-e_\alpha}\right). \end{gathered} \tag{10}$$

Заметим, что методы конечных разностей и конечных объемов дают одинаковые коэффициенты аппроксимационных схем только в случае схем второго порядка. Подробнее о построении аппроксимационных схем высокого порядка в методе конечных объемов можно найти, например, в работе [8].

Далее при исследовании устойчивости схем leapfrog-Эйлера (5), (6) с аппроксимациями вида (7), (8) нам потребуются следующие леммы.

Лемма 1. *Пусть G_1, G_2 — корни уравнения $G^2 + 2iCG + 2D = 1$, где коэффициенты C и D вещественны и $D \geq 0$. Тогда условие $|C| + D \leq 1$ эквивалентно $|G_1| \leq 1$, $|G_2| \leq 1$.*

Лемма 2. *Для любых вещественных a, b и ϕ справедливо*

$$|a\sin\phi| + |b\cos\phi| \leq \sqrt{a^2 + b^2}.$$

Теорема 1. *Следующее условие является достаточным для устойчивости по Нейману схемы* (5), (6), *использующей аппроксимации* (7), (8)*:*

$$2\sum_{\alpha=1}^{3}\left\{D_\alpha b_1+\sqrt{C_\alpha^2 a_1^2+D_\alpha^2 b_1^2}+2\sum_{\beta=2}^{m}\sqrt{C_\alpha^2 a_\beta^2+D_\alpha^2 b_\beta^2}\right\}\le 1. \tag{11}$$

Доказательство. Для произвольных наборов вещественных коэффициентов $\{a_\beta\}_{\beta=1}^m$ и $\{b_\beta\}_{\beta=1}^m$ определим на $[-\pi,\pi]$ функции $A(\theta_\alpha)$ и $B(\theta_\alpha)$ следующим образом:

$$A(\theta_\alpha)=-2\sum_{\beta=1}^{m}a_\beta(\sin((\beta-1)\theta_\alpha)-\sin(\beta\theta_\alpha)), \tag{12}$$

$$B(\theta_\alpha)=2\sum_{\beta=1}^{m}b_\beta(\cos((\beta-1)\theta_\alpha)-\cos(\beta\theta_\alpha)),\quad \theta_\alpha\in[-\pi,\pi].$$

Далее, подставляя частное решение (2) для произвольного θ_α в схему (7), получаем равенства

$$\varphi_{j+0.5e_\alpha}^n-\varphi_{j-0.5e_\alpha}^n=\sum_{\beta=1}^{m}a_\beta(e^{i\beta\theta_\alpha}+e^{-i(\beta-1)\theta_\alpha}-e^{i(\beta-1)\theta_\alpha}-e^{-i\beta\theta_\alpha})\varphi_j^n,$$

$$\left(\varphi_{j+0.5e_\alpha}^n\right)'-\left(\varphi_{j-0.5e_\alpha}^n\right)'=\sum_{\beta=1}^{m}\frac{b_\beta}{\Delta x_\alpha}(e^{i\beta\theta_\alpha}-e^{-i(\beta-1)\theta_\alpha}-e^{i(\beta-1)\theta_\alpha}+e^{-i\beta\theta_\alpha})\varphi_j^n,$$

которые можно записать в виде

$$\varphi_{j+0.5e_\alpha}^n-\varphi_{j-0.5e_\alpha}^n=iA(\theta_\alpha)\varphi_j^n, \tag{13}$$

$$\left(\varphi_{j+0.5e_\alpha}^n\right)'-\left(\varphi_{j-0.5e_\alpha}^n\right)'=-\frac{B(\theta_\alpha)}{\Delta x_\alpha}\varphi_j^n,$$

где функции $A(\theta_\alpha)$ и $B(\theta_\alpha)$ определены равенствами (12).

Таким образом, подставляя в схему (5) частное решение φ_j^n (2) и учитывая (3) и (13), получим следующее соотношение для амплитудного множителя перехода G:

$$\frac{G-G^{-1}}{2}+i\sum_{\alpha=1}^{3}C_\alpha A(\theta_\alpha)+G^{-1}\sum_{\alpha=1}^{3}D_\alpha B(\theta_\alpha)=0. \tag{14}$$

Из (12), (8) и (6) следует, что

$$\sum_{\alpha=1}^{3}D_\alpha B(\theta_\alpha)\ge 0.$$

Отсюда, из уравнения (14) и леммы 1 вытекает, что абсолютное значение амплитудного множителя перехода, связывающего частное решение φ_j^n (2) на соседних временных слоях, не превосходит 1, если выполнено условие

$$\left|\sum_{\alpha=1}^{3}C_\alpha A(\theta_\alpha)\right|+\sum_{\alpha=1}^{3}D_\alpha B(\theta_\alpha)\le 1.$$

Последнее неравенство справедливо в силу определения (12), леммы 2 и условий (6), (11):

$$\left|\sum_{\alpha=1}^{3} C_\alpha A(\theta_\alpha)\right| + \sum_{\alpha=1}^{3} D_\alpha B(\theta_\alpha) \leq \sum_{\alpha=1}^{3}(|C_\alpha A(\theta_\alpha)| + D_\alpha B(\theta_\alpha))$$
$$\leq 2\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{m}\{|C_\alpha a_\beta \sin((\beta-1)\theta_\alpha)| + |C_\alpha a_\beta \sin(\beta\theta_\alpha)|$$
$$+ |D_\alpha b_\beta \cos((\beta-1)\theta_\alpha)| + |D_\alpha b_\beta \cos(\beta\theta_\alpha)|\}$$
$$\leq 2\sum_{\alpha=1}^{3}\left\{D_\alpha b_1 + \sqrt{C_\alpha^2 a_1^2 + D_\alpha^2 b_1^2} + 2\sum_{\beta=2}^{m}\sqrt{C_\alpha^2 a_\beta^2 + D_\alpha^2 b_\beta^2}\right\} \leq 1.$$

Таким образом, доказано, что для произвольного θ_α абсолютное значение амплитудного множителя перехода, связывающего частное решение φ_j^n (2) на соседних временных слоях, не превосходит 1. Следовательно, схема устойчива по Нейману. □

Следствие 1. *Следующее условие является достаточным для устойчивости по Нейману схемы* (5)–(8)*:*

$$\sum_{\alpha=1}^{3}\left(|C_\alpha|\left(2|a_1| + 4\sum_{\beta=2}^{m}|a_\beta|\right) + 4D_\alpha\sum_{\beta=1}^{m}|b_\beta|\right) \leq 1.$$

Следствие 2. *Для схемы* (5), (6) *с центральными аппроксимациями второго порядка* (9) *условие*

$$\sum_{\alpha=1}^{3}(|C_\alpha| + 4D_\alpha) \leq 1 \tag{15}$$

является достаточным, а условие

$$\sum_{\alpha=1}^{3}\left(2D_\alpha + \sqrt{4D_\alpha^2 + C_\alpha^2}\right) \leq 1 \tag{16}$$

— необходимым и достаточным для ее устойчивости.

Доказательство. Достаточность условий (15) и (16) вытекает из следствия 1 и теоремы 1 соответственно. Покажем необходимость условия (16) для устойчивости схемы (5), (6), (9).

Подставим частное решение (2) в схему (5), (6), (9). Учитывая (3), находим уравнение для амплитудного множителя перехода G:

$$G^2 + 2iG\sum_{\alpha=1}^{3} C_\alpha \sin\theta_\alpha + 4\sum_{\alpha=1}^{3} D_\alpha(1-\cos\theta_\alpha) = 1.$$

Используя условие (6) и лемму 1, заключаем, что условие устойчивости схемы (5), (6), (9) эквивалентно тому, что

$$\left|\sum_{\alpha=1}^{3} C_\alpha \sin\theta_\alpha\right| + 2\sum_{\alpha=1}^{3} D_\alpha(1-\cos\theta_\alpha) \leq 1 \quad \forall\theta_\alpha \in [-\pi, \pi]. \tag{17}$$

Возьмем такие θ_α, $\alpha = 1, 2, 3$, что

$$\sin\theta_\alpha = \frac{C_\alpha}{\sqrt{C_\alpha^2 + 4D_\alpha^2}}, \quad \cos\theta_\alpha = -\frac{2D_\alpha}{\sqrt{C_\alpha^2 + 4D_\alpha^2}}.$$

Тогда

$$\sum_{\alpha=1}^{3} 2D_\alpha + \sqrt{C_\alpha^2 + 4D_\alpha^2} = \left|\sum_{\alpha=1}^{3} C_\alpha \sin\theta_\alpha\right| + 2\sum_{\alpha=1}^{3} D_\alpha(1 - \cos\theta_\alpha).$$

Отсюда и из (17) следует необходимость условия (16) для устойчивости схемы (5), (9). □

Ранее критерий (16) был доказан различными более сложными способами в работах Чана [6] (для одномерного уравнения) и Весселинга [7] (для трехмерного уравнения). Достаточность условия (15) была показана в работе Шуманна [5].

Следствие 3. *Для схемы* (5), (6) *с центральными аппроксимациями четвертого порядка* (10) *каждое из следующих условий является достаточным для ее устойчивости:*

$$\sum_{\alpha=1}^{3}\left(\frac{3}{2}|C_\alpha| + \frac{16}{3}D_\alpha\right) \le 1, \quad \frac{1}{6}\sum_{\alpha=1}^{3}\left(15D_\alpha + \sqrt{225D_\alpha^2 + 49C_\alpha^2} + 2\sqrt{D_\alpha^2 + C_\alpha^2}\right) \le 1.$$

3. Оценка критического шага по времени

Подставляя числа Куранта и диффузии (4) в достаточные условия теоремы 1 и следствий 1–3, можно вычислять критические шаги по времени, гарантирующие устойчивость вычислений. Так, например, согласно следствию 2 в схеме (5), (6) с центральными аппроксимациями второго порядка (9) достаточным для устойчивости вычислений является выбор шага по времени

$$\Delta t \le \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{|U_\alpha|}{\Delta x_\alpha} + 4\mu\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{1}{\Delta x_\alpha^2}\right)^{-1}. \tag{18}$$

Аналогично из следствия 3 для схемы (5), (6) с центральными аппроксимациями четвертого порядка (10) заключаем, что достаточным для ее устойчивости является следующий выбор шага по времени:

$$\Delta t \le \left(\frac{3}{2}\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{|U_\alpha|}{\Delta x_\alpha} + \frac{16}{3}\mu\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{1}{\Delta x_\alpha^2}\right)^{-1}. \tag{19}$$

Для оценки критического шага по времени в схеме (5), (6), использующей аппроксимации вида (7), (8) произвольно высокого порядка, следует использовать теорему 1 и следствие 1.

Полученные оценки критического шага по времени (18), (19) были успешно использованы при моделировании трехмерных турбулентных течений в трубе при больших числах Рейнольдса [8] и турбулентной конвекции Рэлея — Бенара при больших числах Рэлея [9] с использованием схем второго и четвертого порядков по пространственным координатам.

Автор выражает благодарность К. Вагнеру и А. Д. Шишкину за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Самарский А. А., Гулин А. В.* Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973.
2. *Годунов С. К., Рябенький В. С.* Разностные схемы. Введение в теорию. М.: Наука, 1977.
3. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1989.
4. *Рихтмайер Р., Мортон К.* Разностные методы решения краевых задач. М.: Мир, 1972.
5. *Schumann U.* Linear stability of finite difference equations for three-dimensional flow problems // J. Comput. Phys. 1975. V. 18, N 4. P. 465–470.
6. *Chan T. F.* Stability analysis of finite difference schemes for the advection-diffusion equation // SIAM J. Numer. Anal. 1984. V. 21, N 2. P. 272–284.
7. *Wesseling P.* Von Neumann stability conditions for the convection-diffusion equations // IMA J. Numer. Anal. 1996. V. 16. P. 583–598.
8. *Shishkina O., Wagner C.* A fourth order finite volume scheme for turbulent flow simulations in cylindrical domains // Comput. & Fluids. 2006. V. 36, N 2. P. 484–497.
9. *Shishkina O., Wagner C.* Analysis of thermal dissipation rates in turbulent Rayleigh–Bénard convection // J. Fluid Mech. 2006. V. 564. P. 51–60.

Статья поступила 18 июня 2006 г.

Шишкина Ольга Викторовна
Институт аэродинамики и технологии потоков,
Немецкий аэрокосмический центр (DLR),
Бунзенштрассе 10, 37073 Геттинген, Германия
Institute for Aerodynamics and Flow Technology,
German Aerospace Center (DLR),
Bunsenstrasse 10, 37073 Göttingen, Germany
Olga.Shishkina@dlr.de