УДК 518:517.944/.947

ПОЛНОСТЬЮ КОНСЕРВАТИВНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ

Ю. П. ПОПОВ, А. А. САМАРСКИЙ

(Москва)

1. Система уравнений газовой динамики выражает три закона сохранения — массы, импульса и энергии.

При численном расчете газодинамических задач методом конечных разностей система дифференциальных уравнений аппроксимируется разностной схемой, что эквивалентно введению вместо непрерывной среды некоторой ее дискретной модели. Эта модель должна отражать основные свойства среды. Поэтому естественно требовать, чтобы в ней в первую очередь выполнялись соответствующие разностные аналоги законов сохранения, т. е. чтобы разностная схема была консервативной. На важность этого обстоятельства в начале 50-х годов обратили внимание А. Н. Тихонов и А. А. Самарский. Построен пример [1], когда неконсервативная разностная схема, имеющая второй порядок аппроксимации на гладких решениях, расходится в случае разрывного решения дифференциального уравнения.

Обычно считается, что для получения консервативной разностной схемы достаточно аппроксимировать три основных закона сохранения (баланса) (см. [2, 3], гл. III книги [4], где дан обзор работ по численным методам газодинамики).

Однако здесь существует один принципиальный момент.

В системе уравнений газовой динамики уравнение энергии может быть записано в одном из двух видов — дивергентном и недивергентном. В дифференциальной форме эти виды полностью эквивалентны и с помощью остальных уравнений дифференциальной системы могут быть преобразованы друг в друга. Поэтому для системы уравнений газовой динамики в дифференциальной форме одновременно справедливы и следуют друг из друга как закон сохранения полной энергии, так и баланс внутренней энергии.

Для системы разностных уравнений положение иное. Недивергентное разностное уравнение энергии, вообще говоря, не может быть с использованием остальных разностных уравнений сведено к дивергентному разностному виду. В ходе преобразования из-за «рассогласованности» отдельных уравнений схемы появляются остаточные члены, приводящие к нарушению закона сохранения полной энергии.

Применение разностной схемы с дивергентным уравнением энергии приводит к аналогичным дефектам: при выполненном законе сохранения полной энергии оказываются нарушенными балансы для отдельных видов энергии — внутренней и кинетической.

Величина энергетических дисбалансов зависит от характера самого решения. На гладких решениях она невелика и уменьшается с измельчением временно́го шага сетки. На сильноменяющихся решениях величина дисбаланса может стать сравнимой с полной энергией и существенно исказить характер рассчитываемого явления.

Будем называть разностную схему полностью консервативной, если для нее справедливы как законы сохранения массы, импульса, полной энергии, так и детальный баланс энергии, т. е. баланс по отдельным видам энергии — внутренней и кинетической.

В работе построены полностью консервативные разностные схемы для системы уравнений газодинамики. Эти разностные схемы могут быть получены, например, с помощью известного [1] интегро-интерполяционного метода при соблюдении некоторого формального правила отбора. Это правило заключается в следующем: полностью консервативные разностные схемы должны обладать тем же свойством, что и система дифференциальных уравнений, т. е. недивергентное разностное уравнение энергии с использованием остальных разностных уравнений должно сводиться к дивергентному разностному уравнению, и наоборот.

Сильное влияние дисбаланса было отмечено при расчете системы магнитогидродинамических уравнений, где появляется еще один вид энергии — магнитной и где должно быть выполнено еще одно энергетическое балансное соотношение.

Однако, чтобы не загромождать изложения, в работе принципиальная сторона вопроса рассматривается на простейшем примере — схеме «крест» для одномерной газодинамики. По этой же причине рассуждения ограничены случаем равномерных сеток *).

2. Система уравнений газовой динамики (для плоского одномерного нестационарного случая) в лагранжевых массовых координатах имеет вид

$$\frac{\partial v}{\partial t}=-\frac{\partial p}{\partial x},\quad \frac{\partial r}{\partial t}=v,\quad \frac{\partial \eta}{\partial t}=\frac{\partial v}{\partial x},\quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}=-p\frac{\partial v}{\partial x}. \tag{I}$$

Обозначения: t — время, r — эйлерова координата, η — удельный объем, x ($dx=\eta^{-1}dr$) — лагранжева массовая координата, p — давление, ε — внутренняя энергия газа, v — скорость.

Разностная схема «крест» для системы (I) записывается следующим образом [5, 6] (схема (II)):

$$\frac{v_i^{j+1}-v_i^j}{\tau}=-\frac{p_{i+1/2}^{j+1/2}-p_{i-1/2}^{j+1/2}}{m}, \tag{2.1}$$

$$\frac{r_i^{j+1}-r_i^j}{\tau}=v_i^{j+1}, \tag{2.2}$$

$$\frac{\eta_{i+1/2}^{j+3/2}-\eta_{i+1/2}^{j+1/2}}{\tau}=\frac{v_{i+1}^{j+1}-v_i^{j+1}}{m}, \tag{2.3}$$

$$\frac{\varepsilon_{i+1/2}^{j+3/2}-\varepsilon_{i+1/2}^{j+1/2}}{\tau}=-p_{i+1/2}^{j+3/2}\frac{v_{i+1}^{j+1}-v_i^{j+1}}{m}. \tag{2.4}$$

Схема (II) записана на равномерной сетке $\{x_i, t^j\}$, $x_{i+1}=x_i+m$, $i=0, 1, \ldots$ $\ldots, N$, $t^{j+1}=t^j+\tau$, $j=0, 1, \ldots$, которая введена в рассматриваемой области пространства x, t. Значения сеточных функций r_i^j, v_i^j относятся к узлам сетки (x_i, t^j), значения сеточных функций $p_{i+1/2}^{j+1/2}$, $\varepsilon_{i+1/2}^{j+1/2}$, $\eta_{i+1/2}^{j+1/2}$ — к полуцелым точкам $(x_{i+1/2}, t^{j+1/2})$.

Разностные уравнения (2.2), (2.3) эквивалентны очевидному с физической точки зрения соотношению

$$\eta_{i+1/2}^{j+3/2}=\frac{r_{i+1}^{j+1}-r_i^j}{m}, \tag{2.5}$$

которое гарантирует для схемы (II) выполнение разностного аналога закона сохранения массы. В расчетах равенство (2.5) часто используется вместо уравнения неразрывности для определения удельного объема.

Для разностной схемы (II) справедлив также закон сохранения импульса, что следует из дивергентного вида записи уравнения движения (2.1).

Уравнение энергии (2.4) является недивергентным. Рассмотрим для схемы (II) вопрос о сохранении полной энергии.

Будем пользоваться для удобства проведения выкладок для сеточных функций безындексными обозначениями [7]

$$y_i^j=y,\qquad y_{i+1/2}^{j+1/2}=\bar{y},\qquad y_i^{j+1}=\hat{y},\qquad y_{i+1/2}^{j+3/2}=\hat{\bar{y}}, \tag{2.6}$$

$$\frac{\hat{y}-y}{\tau}=y_t,\qquad \frac{y_{i+1}-y_i}{m}=y_x,\qquad \frac{y_i-y_{i-1}}{m}=y_{\bar{x}}, \tag{2.7}$$

*) Аналогичные вопросы рассматривали В. Я. Гольдин и Н. Н. Калиткин.

$$\sum_{i=1}^{N-1} y_i u_i m = (y, u), \qquad \sum_{i=0}^{N-1} y_i u_i m = [y, u), \qquad \sum_{i=0}^{N} y_i u_i m = [y, u]. \tag{2.8}$$

Для разностного суммирования справедлива формула

$$[y, u_x] = -[y_{\bar{x}}, u] + y_N u_N - y_{-1} u_0. \tag{2.9}$$

В обозначениях (2.6), (2.7) схема (II) имеет более компактный вид (схема III):

$$v_t = -\bar{p}_{\bar{x}}, \tag{2.10}$$

$$r_t = \hat{v}, \tag{2.11}$$

$$\bar{\eta}_t = \hat{v}_x, \tag{2.12}$$

$$\bar{\varepsilon}_t = -\hat{\bar{p}}\,\hat{v}_x. \tag{2.13}$$

Используя обозначения (2.8), просуммируем по полуцелым точкам уравнение энергии (2.13) и применим формулу (2.9):

$$[\bar{\varepsilon}_t, 1) = -[\hat{\bar{p}}, \hat{v}_x] = [\hat{\bar{p}}_{\bar{x}}, \hat{v}] - \hat{\bar{p}}_N \hat{v}_N + \hat{\bar{p}}_{-1} \hat{v}_0, \tag{2.14}$$

где под формально введенными величинами $\bar{p}_N$ и $\bar{p}_{-1}$ понимаются значения давления в граничных узлах сетки.

Из (2.10) после умножения на $\hat{v}$ и суммирования по узлам следует

$$[\hat{v}, v_t] = -[\bar{p}_{\bar{x}}, \hat{v}] = -[(\hat{\bar{p}} - 0.5\,\tau p_t)_{\bar{x}}, \hat{v}] = -[\hat{\bar{p}}_{\bar{x}}, \hat{v}] + 0.5\,\tau\,[\bar{p}_{t\bar{x}}, \hat{v}]. \tag{2.15}$$

Подставляя (2.15) в (2.14) с учетом тождества

$$\hat{v} v_t = 0.5(v^2)_t + 0.5\tau v_t^2 \tag{2.16}$$

и суммируя далее получающееся равенство по времени на интервале $[t^{j_1}, t^{j_2}]$, приходим к разностному аналогу интегрального закона сохранения полной энергии

$$[\bar{\varepsilon}, 1)\,|_{j_1}^{j_2} + 0.5\,[v^2, 1]\,|_{j_1}^{j_2} + \tau \sum_{j=j_1}^{j_2} \{\hat{\bar{p}}_N \hat{v}_N - \hat{\bar{p}}_{-1} \hat{v}_0\} = \Delta E, \tag{2.17}$$

$$\Delta E = 0.5\,\tau^2 \sum_{j=j_1}^{j_2} \{[\bar{p}_{t\bar{x}}, \hat{v}] - [v_t^2, 1]\}. \tag{2.18}$$

Отсюда видно, что этот закон нарушается. Дисбаланс полной энергии ΔE накапливается со временем и на гладких решениях имеет порядок $O(\tau)$.

При этом баланс внутренней энергии строго выполнен:

$$[\bar{\varepsilon}, 1)_t + \tau \sum_{j=j_1}^{j_2} [\hat{\bar{p}}, \hat{v}_x) = 0,$$

что можно получить, суммируя по времени и пространству уравнение энергии (2.13).

Отметим, что величина ΔE не зависит от шага сетки по массе m, поэтому измельчение пространственной сетки не приводит к заметному уменьшению дисбаланса.

Появление в схеме (III) дисбаланса полной энергии связано с недивергентностью уравнения энергии (2.13). Однако использование в схеме дивергентного уравнения энергии, например, в виде

$$\bar{\varepsilon}_t + 0.25(v^2 + v(+1)^2)_t = (\hat{\bar{p}}_* v)_x, \quad v(+1) = v_{i+1}, \quad \bar{p}_* = 0.5(\bar{p}_{i+1/2} + \bar{p}_{i-1/2})$$

приводит к подобным же трудностям. Конечно, закон сохранения полной энергии будет теперь выполнен, но нарушится баланс внутренней энергии, в чем нетрудно убедиться, проводя выкладки, подобные (2.14) — (2.18).

Несмотря на сохранение полной энергии, баланс внутренней, а следовательно, и кинетической энергии по отдельности не соблюдается. Это означает, в частности, что в схеме (III) плохо аппроксимируется температура. Последнее обстоятельство может оказаться существенным, если, например, в рассчитываемой задаче присутствуют процессы, сильно зависящие от температуры (электропроводность, теплопроводность и т. д.).

Наличие в разностной схеме энергетического дисбаланса можно трактовать как присутствие в схеме некоторых источников и стоков энергии чисто разностного происхождения. На гладких решениях «мощность» этих источников невелика и их влияние на ход изучаемого процесса мало. Однако на сильноменяющихся решениях интегральный вклад этих фиктивных источников может стать сравнимым с полной энергией и существенно исказить характер явления.

Эффекты, связанные с дисбалансами, проявляются и для других разностных схем, широко применяющихся для расчетов задач газовой динамики, например [2, 3].

3. Рассмотрим семейство разностных схем, аппроксимирующих систему уравнений газовой динамики (I) (схема IV)):

$$v_t = -p_{\bar x}^{(\sigma_1)}, \tag{3.1}$$

$$r_t = v^{(\sigma_2)}, \tag{3.2}$$

$$\eta_t = v_x^{(\sigma_3)}, \tag{3.3}$$

$$\varepsilon_t = -p^{(\sigma_1)} v_x^{(\sigma_4)}. \tag{3.4}$$

Использовано обозначение $f^{(\sigma)} = \sigma \hat f + (1-\sigma) f$, $f = f_i^j$, $\hat f = f_i^{j+1}$. Все сеточные функции берутся на одних и тех же временных слоях. Функции r, v по-прежнему относятся к узлам сетки, p, ε, η — к полуцелым точкам.

Параметры $0 \leqslant \sigma_k \leqslant 1$, $k = 1, 2, 3, 4$, суть весовые множители, при помощи которых можно осуществить тот или иной вид интерполяции по времени для соответствующих членов разностных уравнений.

Исследуем вопрос, при каких значениях параметров σ_k в схеме (IV) будут выполняться разностные аналоги газодинамических законов сохранения.

А. Закон сохранения массы.

Продифференцируем разностно по x уравнение (3.2) и воспользуемся очевидным соотношением

$$f^{(\alpha)} = f^{(\beta)} + (\beta - \alpha)\tau f_t.$$

Получим равенство

$$r_{tx} = v_x^{(\sigma_2)} = v_x^{(\sigma_3)} + (\sigma_3 - \sigma_2)\tau v_{xt} = \eta_t + (\sigma_3 - \sigma_2)\tau v_{xt},$$

из которого вытекает, что только при условии $\sigma_3 = \sigma_2$ справедлива формула $\eta = r_x$, которая обеспечивает соблюдение закона сохранения массы.

Б. Выполнение закона сохранения импульса следует непосредственно из дивергентного вида записи уравнения движения (3.1).

В. Для выяснения вопроса о законе сохранения полной энергии последовательно повторим выкладки, проведенные в п. 2:

$$[\varepsilon, 1)_t = -[p^{(\sigma_1)}, v_x^{(\sigma_4)}) = [p_{\bar x}^{(\sigma_1)}, v^{(\sigma_4)}] - p_N^{(\sigma_1)} v_N^{(\sigma_4)} + p_{-1}^{(\sigma_1)} v_0^{(\sigma_4)}. \tag{3.5}$$

Из уравнения (3.1) после умножения на $v^{(\sigma_4)}$ и суммирования по узлам имеем

$$-[p_{\bar x}^{(\sigma_1)} v^{(\sigma_4)}] = [v^{(\sigma_4)}, v_t] = 0.5[v^2, 1]_t - (0.5 - \sigma_4)\tau[v_t^2, 1]. \tag{3.6}$$

Подставляя (3.6) в (3.5), получим для промежутка времени $[t^{j_1}, t^{j_2}]$ следующий баланс полной энергии:

$$[\varepsilon, 1)\,|_{j_1}^{j_2} + 0.5\,[v^2, 1]\,|_{j_1}^{j_2} + \tau \sum_{j=j_1}^{j_2} \{p_N^{(\sigma_1)} v_N^{(\sigma_4)} - p_{-1}^{(\sigma_1)} v_0^{(\sigma_4)}\} = \Delta E_1, \tag{3.7}$$

$$\Delta E_1 = (0.5 - \sigma_4)\,\tau^2 \sum_{j=j_1}^{j_2} [v_t^2, 1]. \tag{3.8}$$

Таким образом, чтобы обеспечить в схеме (IV) строгое выполнение закона сохранения полной энергии, нужно наложить требование $\sigma_4 = 0.5$.

Кроме того, из самого процесса вывода (3.8) ясно, что интерполяция по времени сеточной функции давления в уравнениях (3.1) и (3.4) должна быть одинаковой. В противном случае в (3.7) появится дополнительный дисбалансный член.

Г. Баланс внутренней энергии соблюдается в силу использования в схеме (IV) недивергентного вида уравнения энергии.

Будем называть разностную схему, аппроксимирующую систему уравнений газовой динамики, полностью консервативной, если для нее выполнены законы сохранения массы, импульса, полной энергии, а также детальный баланс энергии, т. е. баланс для отдельных видов энергии — внутренней и кинетической.

Для того чтобы схема (IV) была полностью консервативной, достаточно выполнения условий

$$\sigma_4 = 0.5, \qquad \sigma_3 = \sigma_2. \tag{3.9}$$

Таким образом, существует двухпараметрическое семейство (со свободными параметрами σ_1, σ_2) полностью консервативных схем IV. Все эти схемы имеют аппроксимацию $O(\tau + m^2)$.

Имеется только одна полностью консервативная схема второго порядка аппроксимации по τ и m. Она определяется условиями (3.9) и условиями

$$\sigma_1 = 0.5, \quad \sigma_2 = 0.5. \tag{3.10}$$

4. Заменим в схеме IV при условии (3.9) последнее уравнение дивергентным уравнением энергии

$$\varepsilon_t + 0.25(v^2 + v(+1)^2)_t = -(p_*^{(\sigma_1)} v^{(0.5)})_x, \tag{4.1}$$

где использованы обозначения $f(+1) = f_{i+1}$, $f(-1) = f_{i-1}$, $p_* = 0.5(p_{i+1/2} + p_{i-1/2})$.

Разностное уравнение (4.1) полностью эквивалентно разностному уравнению (3.4) и может быть сведено к нему с помощью остальных уравнений схемы (IV). Действительно, умножая (3.1) на $v^{(0.5)}$, имеем

$$-p_{\bar{x}}^{(\sigma_1)} v^{(0.5)} = v^{(0.5)}\, v_t = 0.5\, v_t^2, \tag{4.2}$$

$$-p_{\bar{x}}^{(\sigma_1)}(+1)\, v^{(0.5)}(+1) = 0.5\, v_t(+1)^2. \tag{4.3}$$

Беря полусумму равенств (4.2) и (4.3) и складывая ее с (4.1), получаем уравнение (3.4).

Нетрудно видеть, что схема (IV), где (3.4) заменено на (4.1), также будет полностью консервативна *).

Формальное требование, предъявляемое к полностью консервативным схемам для решения уравнений газодинамики, состоит в том, чтобы недивергентное разностное уравнение энергии с помощью остальных уравнений схемы преобразовывалось к дивергентному виду, и наоборот **).

---

*) Аналогичная схема была получена В. Я. Гольдиным и Н. Н. Калиткиным из других соображений. К подобной же полностью консервативной схеме сводится приведенная в [4], стр. 426, схема, основанная на идее «предиктор-корректор». (Прим. при корр.)

**) Подобные соображения высказывал Харлоу применительно к методу частиц в ячейках [8]. (Прим. при корр.)

Дивергентное уравнение (4.1) может быть получено с помощью интегро-интерполяционного метода [1]. Сущность этого метода состоит в том, что разностные уравнения строятся на основе интегральных соотношений, выражающих законы сохранения для элементарной ячейки сетки. При этом на сетке вводится определенная интерполяция искомого решения и коэффициентов уравнения, меняя которую можно получать различные разностные схемы.

Сформулированное выше формальное требование можно рассматривать как правило для отбора полностью консервативных схем из класса схем, даваемых интегро-интерполяционным методом.

В частности, интегро-интерполяционный метод позволяет построить еще два дивергентных разностных уравнения:

$$(\varepsilon + 0.5v^2)_t = -(p^{(\sigma_1)}(-1)\,v^{(0.5)})_x, \tag{4.4}$$

$$(\varepsilon + 0.5v(+1)^2)_t = -(p^{(\sigma_1)}v^{(0.5)})_x, \tag{4.5}$$

которые эквивалентны (3.4).

Из эквивалентности (4.4) и (4.5) уравнению (3.4) вытекает любопытный факт: уравнения (4.4) и (4.5) имеют второй порядок аппроксимации по пространству $O(m^2)$, в то время как отдельные члены этих уравнений аппроксимируются с первым порядком.

5. Для суждения о качестве разностных схем для уравнений газодинамики часто используют модельные уравнения акустики. Заметим, что эффекты, связанные с неполной консервативностью схем, не могут быть выявлены в этом приближении, так как в нем фактически отсутствует уравнение энергии.

Мы не останавливаемся на исследовании устойчивости полученных схем, так как устойчивость этих схем очевидна в силу их неявности.

Авторы благодарны П. П. Волосевичу и С. П. Курдюмову за полезные обсуждения.

Поступила в редакцию 25.03.1969

Цитированная литература

1. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. Об однородных разностных схемах. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1961, 1, № 1, 5—63.
2. С. К. Годунов. Разностный метод численного расчета разрывных решений гидродинамики. Матем. сб., 1959, 47(89), 271—306.
3. В. Ф. Куропатенко. О разностных методах для уравнений гидродинамики. Тр. Матем. ин-та АН СССР, 1966, 74.
4. Б. Л. Рождественский, Н. Н. Яненко. Системы квазилинейных уравнений. М., «Наука», 1968.
5. J. Von Neumann, R. D. Richtmyer. A method for numerical calculation of hydrodynamic shocks. J. Appl. Phys., 1949, 21, 232—237.
6. Р. Д. Рихтмайер. Разностные методы решения краевых задач. М., Изд-во ин. лит., 1960.
7. А. А. Самарский. Априорные оценки для решения разностного аналога дифференциального уравнения параболического типа. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1961, 1, № 3, 441—460.
8. Ф. Х. Харлоу. Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики. В сб. «Вычисл. методы в гидродинамике». М., «Мир», 1967, 316—342.