



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

О повышении порядка аппроксимации бикомпактных схем

ЗНЧ, 2025, Шестаков А.А.

Определение компактных и бикомпактных схем



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

1972 год. Исторически понятие **предельно компактной аппроксимации** при численном решении ОДУ было введено **Крайсом** в 1972 году. Предельно компактной аппроксимацией он называет аппроксимацию дифференциального уравнения m порядка на $m+1$ узлах разностной сетки.

1991 год. В России термин **компактные схемы** был введен **А.И. Толстых** в 1991 году для решения задач аэрогидродинамики. А.И. Толстых дает определение компактных схем как схем, использующих трехточечные шаблоны третьего и более высокого порядка по пространству.

1963 год. В России **первая компактная** трёхточечная схема четвертого порядка аппроксимации по пространству для решения **уравнения теплопроводности** была предложена **А.А. Самарским** в 1963 году.

1964 год. И.В. Петуховым в 1964 году была предложена четырёхточечная схема четвертого порядка аппроксимации по пространству для решения двумерных течений в пограничном слое.

2008 год. Термин **бикомпактные схемы** на двухточечном шаблоне был введен **Н.Н. Калиткиным** в 2008 году для решения **уравнения теплопроводности**. Одновременно с этим в 2008 году **Б.В. Роговым** были предложены бикомпактные схемы с 4 порядком аппроксимации для решения **уравнения теплопроводности**, а в 2011 году – для гиперболических систем.

2015-2024 годы. За десять лет с 2015 года **Б.В. Роговым, М.Д. Брагиным, В.В. Остапенко** и др. было опубликовано более 20 работ по бикомпактным схемам 4 порядка аппроксимации для решения гиперболических систем.

Новое определение бикомпактности разностных схем

Старые понятия компактности.

1. **Предельно компактной** аппроксимацией **Крайс** называет аппроксимацию обыкновенного дифференциального уравнения m порядка на $m+1$ узлах разностной сетки.
2. **Компактными схемами А.И. Толстых** называет схемы третьего и более высокого порядков по пространству на **трёхточечном** шаблоне.
3. **Бикомпактными схемами Н.Н. Калиткин** называет схемы второго и более высокого порядков по пространству на **двухточечном** шаблоне.

Новое понятие бикомпактности.

В многомерных геометриях **двухточечный** шаблон заменяется одной ячейкой сетки. На разрывных решениях порядок схем высокого порядка падает до первого, поэтому в многомерных геометриях сейчас принято **бикомпактными схемами** называть схемы на **минимальном пространственном шаблоне**, занимающем одну ячейку сетки, независимо от величины порядка аппроксимации. Для **уравнения теплопроводности** возможно создание безусловно монотонной и устойчивой бикомпактной схемы второго порядка аппроксимации, для **уравнения переноса** – только первого порядка аппроксимации.



Популярность бикомпактных схем объясняется тем, что для данного класса выполняется ряд важных свойств:

1. это **самый простой шаблон**, поэтому сравнительно просто схемы обобщаются на многомерный случай без расширения шаблона (шаблон трехточечной схемы в двумерной геометрии требует 9 ячеек, в трехмерной - 27 ячеек);
1. схемы, записанные в дивергентной форме и построенные интегро-интерполяционным способом в рамках одноячеечного шаблона, будут всегда **консервативны**;
1. **порядок аппроксимации не меняется** при переходе от равномерных и ортогональных сеток к неравномерным и неортогональным;
1. легко аппроксимируются **граничные условия** (не надо вводить фиктивные ячейки на границах);
1. нет необходимости аппроксимировать решение через разрыв, как в многоточечных схемах;
1. естественным образом строится контур для доказательства локальной консервативности в системе.

Методы построения бикомпактных схем



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Основной вопрос рассматриваемый в докладе – смогут ли способы И.В. Петухова, помогающие строить бикомпактные схемы 4го порядка аппроксимации в работах Н.Н. Калиткина и Б.В. Рогова, повысить порядок аппроксимации бикомпактных схем **без потери свойств безусловной устойчивости и положительности?**

Практика расчетов уравнений теплопроводности с газодинамикой при рассмотрении всего диапазона изменений коэффициента теплопроводности требует использование **безусловно устойчивых и монотонных схем.**

Построение бикомпактных схем повышенного порядка аппроксимации для уравнения теплопроводности



Начнем с бикомпактных схем 2го порядка для уравнения теплопроводности:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

$$S + \kappa \frac{\partial T}{\partial x} = 0.$$

Неявная аппроксимация методом конечных объемов дает

$$\frac{T_{i+1/2}^{n+1} - T_{i+1/2}^n}{\tau} + \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_i^{n+1}}{h} = 0, \quad (2)$$

$$S_{i+1/2}^{n+1} + \kappa_{i+1/2}^{n+1} \frac{T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}}{h} = 0.$$

Простейшая бикомпактная схема 2го порядка использует следующие формулы

$$u_{i+1/2} = \frac{u_{i+1} + u_i}{2}, \quad \frac{\partial u_{i+1/2}}{\partial x} = \frac{u_{i+1} - u_i}{h}, \quad \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} u dx = \frac{u_{i+1} + u_i}{2}.$$

Подставляя интерполяционные формулы в систему (2), получаем

$$\frac{T_{i+1}^{n+1} + T_i^{n+1}}{2\tau} + \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_i^{n+1}}{h} = \frac{T_{i+1}^n + T_i^n}{2\tau}, \quad (3)$$

$$\frac{S_{i+1}^{n+1} + S_i^{n+1}}{2\tau} + \kappa_{i+1/2}^{n+1} \frac{T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}}{h} = 0,$$

которые решаются методом потоковой прогонки. К сожалению, полученная схема немонотонна и неположительна.

Построение бикомпактных схем



Для получения схем более высокого порядка аппроксимации используем выражения, полученные из разложения в ряд Тейлора в точке $(i+1/2)$:

$$u_{i+1} + u_i = 2u_{i+1/2} + \frac{h^2}{4} \frac{\partial^2 u_{i+1/2}}{\partial x^2} + O(h^4),$$

$$u_{i+1} - u_i = h \frac{\partial u_{i+1/2}}{\partial x} + \frac{h^3}{24} \frac{\partial^3 u_{i+1/2}}{\partial x^3} + O(h^5),$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(u_{i+1} + u_i) = 2 \frac{\partial u_{i+1/2}}{\partial x} + \frac{h^2}{4} \frac{\partial^3 u_{i+1/2}}{\partial x^3} + O(h^4).$$

Из этих соотношений получаем искомую функцию и её производную в центральной точке:

$$u_{i+1/2} = \frac{u_{i+1} + u_i}{2} - \frac{h}{8} \left(\frac{\partial u_{i+1}}{\partial x} - \frac{\partial u_i}{\partial x} \right) - \text{значения искомых величин в центре из ряда Тейлора, (4)}$$

$$\frac{\partial u_{i+1/2}}{\partial x} = \frac{3}{2} \frac{u_{i+1} - u_i}{h} - \frac{1}{4} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x} + \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x} \right) - \text{производная в центре из ряда Тейлора, (5)}$$

$$\frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} u dx = \frac{u_{i+1} + u_i}{2} - \frac{h}{12} \left(\frac{\partial u_{i+1}}{\partial x} - \frac{\partial u_i}{\partial x} \right) - \text{первообразная по формуле Эйлера-Маклорена. (6)}$$

Для решения системы (1) методом потоковой прогонки приведем её к виду:

$$\begin{aligned} a_i^0 T_i + b_i^0 T_{i+1} + c_i^0 S_i + d_i^0 S_{i+1} &= f_i^0, \\ a_i^1 T_i + b_i^1 T_{i+1} + c_i^1 S_i + d_i^1 S_{i+1} &= f_i^1, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\text{где } a_i^0 = b_i^0 = 1, \quad c_i^0 = -\frac{2\tau}{h} - \frac{h}{9\kappa_i}, \quad d_i^0 = \frac{2\tau}{h} + \frac{h}{9\kappa_{i+1}}, \quad f_i^0 = T_i^n + T_{i+1}^n + \frac{h}{9} \left(\frac{S_{i+1}^n}{\kappa_{i+1}^n} - \frac{S_i^n}{\kappa_i^n} \right),$$

$$a_i^1 = -b_i^1 = -\frac{h}{6\tau} - \frac{3\kappa_{i+1/2}}{h}, \quad c_i^1 = 1 + \frac{\kappa_{i+1/2}}{2\kappa_i}, \quad d_i^1 = 1 + \frac{\kappa_{i+1/2}}{2\kappa_{i+1}}, \quad f_i^1 = \frac{h}{6\tau} (T_{i+1}^n - T_i^n).$$

Проверка устойчивости и положительности



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Для устойчивости потоковой прогонки необходимо, чтобы выполнялись условия:

$$\langle cb \rangle \geq 0, \quad \langle ba \rangle \geq 0, \quad \langle cd \rangle \geq 0, \quad \langle da \rangle \geq 0, \quad \langle cf \rangle \geq 0, \quad \langle fa \rangle \geq 0, \quad \langle ac \rangle \geq 0, \quad (12)$$

где $\langle ab \rangle = a^1 b^0 - a^0 b^1$, $\langle ca \rangle = c^1 a^0 - c^0 a^1$ и т.д.

Требование положительности температуры приводит к условиям $\langle bd \rangle_i \geq 0$, $\langle df \rangle_i \geq 0$.

Для проверки этих условий раскроем угловые скобки:

1. $\langle cb \rangle = 1 + \frac{\kappa_{i+1/2}}{2\kappa_i} + \left(\frac{2\tau}{h} + \frac{h}{9\kappa_i} \right) \left(\frac{h}{6\tau} + \frac{3\kappa_{i+1/2}}{h} \right) \geq 0$,
2. $\langle ba \rangle = \frac{h}{3\tau} + \frac{6\kappa_{i+1/2}}{h} \geq 0$,
3. $\langle cd \rangle = \left(1 + \frac{\kappa_{i+1/2}}{2\kappa_i} \right) \left(\frac{2\tau}{h} + \frac{h}{9\kappa_{i+1}} \right) + \left(1 + \frac{\kappa_{i+1/2}}{2\kappa_{i+1}} \right) \left(\frac{2\tau}{h} + \frac{h}{9\kappa_i} \right) \geq 0$,
4. $\langle da \rangle = 1 + \frac{\kappa_{i+1/2}}{2\kappa_{i+1}} + \left(\frac{2\tau}{h} + \frac{h}{9\kappa_{i+1}} \right) \left(\frac{h}{6\tau} + \frac{3\kappa_{i+1/2}}{h} \right) \geq 0$,
5. $\langle ac \rangle = \left(\frac{2\tau}{h} + \frac{h}{9\kappa_i} \right) \left(\frac{h}{6\tau} + \frac{3\kappa_{i+1/2}}{h} \right) - \left(1 + \frac{\kappa_{i+1/2}}{2\kappa_i} \right) = \frac{6\tau\kappa_{i+1/2}}{h^2} + \frac{h^2}{54\tau\kappa_i} - \frac{2}{3} - \frac{\kappa_{i+1/2}}{6\kappa_i} \geq 0$,
6. $\langle bd \rangle = \left(\frac{2\tau}{h} + \frac{h}{9\kappa_{i+1}} \right) \left(\frac{h}{6\tau} + \frac{3\kappa_{i+1/2}}{h} \right) - \left(1 + \frac{\kappa_{i+1/2}}{2\kappa_{i+1}} \right) = \frac{6\tau\kappa_{i+1/2}}{h^2} + \frac{h^2}{54\tau\kappa_{i+1}} - \frac{2}{3} - \frac{\kappa_{i+1/2}}{6\kappa_{i+1}} \geq 0$,
7. $\langle cf \rangle = \left(1 + \frac{\kappa_{i+1/2}}{2\kappa_i} \right) f^0 + \left(\frac{2\tau}{h} + \frac{h}{9\kappa_i} \right) f^1 \geq 0$,
8. $\langle df \rangle = \left(1 + \frac{\kappa_{i+1/2}}{2\kappa_{i+1}} \right) f^0 - \left(\frac{2\tau}{h} + \frac{h}{9\kappa_{i+1}} \right) f^1 \geq 0$,
9. $\langle fa \rangle = f^1 + f^0 \left(\frac{h}{6\tau} + \frac{3\kappa_{i+1/2}}{h} \right) \geq 0$.

Проверка устойчивости и положительности



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Видно, что первые четыре неравенства выполняются всегда, пятое и шестое – дают условие на тепловой курант $0 < K \leq \frac{1}{36}$, $K \geq \frac{1}{9}$, $K = \frac{\kappa\tau}{h^2}$, остальные неравенства зависят от поведения решения, что оценить в общем случае достаточно сложно.

Неравенства 7 и 8 выполняются при условии $f^0 \geq \frac{2h}{27\kappa}(18K+1)|f^1| = \frac{18K+1}{81K}|T_{i+1}^n - T_i^n|$.

Неравенство 9 выполняется при условии $f^0 \geq -\frac{6}{1+18K} \cdot \frac{\tau}{h} f^1 = \frac{1}{1+18K}(T_i^n - T_{i+1}^n)$.

Отсюда следует вывод, что в данной схеме нет безусловной устойчивости потоковой прогонки и положительности температуры.

Попробуем применить по аналогии с разложением в ряд Тейлора следующую аппроксимацию системы (1):

$$\begin{aligned} T_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{T_{i+1} + T_i}{2} - \frac{\delta h}{8} \left(\frac{\partial T_{i+1}}{\partial x} - \frac{\partial T_i}{\partial x} \right), \\ S_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{S_{i+1} + S_i}{2} - \frac{\theta h}{8} \left(\frac{\partial S_{i+1}}{\partial x} - \frac{\partial S_i}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial T_{i+\frac{1}{2}}}{\partial x} &= \frac{T_{i+1} - T_i}{h}, \quad \frac{\partial S_{i+\frac{1}{2}}}{\partial x} = \frac{S_{i+1} - S_i}{h}, \end{aligned} \tag{15}$$

где δ , θ - некоторые параметры.

Возникает вопрос, что нужно сделать, чтобы

гарантировать безусловную устойчивость потоковой



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

прогонки и положительность температуры?

Для этого приходится снижать порядок аппроксимации до второго по пространству.

Первые четыре неравенства выполняются при $\delta \geq 0, \theta \geq 0$.

Пятое и шестое неравенства выполняются при условии $\sqrt{\delta} + \sqrt{\theta} \geq \sqrt{2}$ и если рассмотреть аппроксимацию температуры в центре ячейки в виде

$$T_{i+1/2} = \frac{T_{i+1} + T_i}{2} + \frac{\delta h}{8\kappa_{i+1/2}} (S_{i+1} - S_i). \text{ Неравенства 7-9 всегда выполняются только при } \theta=0.$$

Отсюда следует, что при рассмотрении аппроксимации в виде

$$T_{i+1/2} = \frac{T_{i+1} + T_i}{2} + \frac{h}{4\kappa_{i+1/2}} (S_{i+1} - S_i),$$

$$S_{i+1/2} = \frac{S_{i+1} + S_i}{2},$$

$$\frac{\partial T_{i+1/2}}{\partial x} = \frac{T_{i+1} - T_i}{h},$$

$$\frac{\partial S_{i+1/2}}{\partial x} = \frac{S_{i+1} - S_i}{h}$$

можно построить безусловно устойчивую и положительную разностную схему.

Полученная схема совпадает со схемой ‘РОМБ’ А.Д. Гаджиева и В.Н. Писарева при $\kappa =$

const.

Построение безусловно устойчивой и положительной бикompактной схемы



РФАЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

В результате исследований, проведенных в данной работе, можно сделать вывод, что использование способов И.В. Петухова, позволяющих строить бикompактные схемы 4го порядка аппроксимации, **не помогают** повысить порядок аппроксимации без потери свойств безусловной устойчивости и положительности. Поэтому использование способов И.В. Петухова при неявной аппроксимации уравнения теплопроводности **не желательно**, так как приводит к потере положительности схемы. А потеря безусловной положительности схемы снимает все достоинства повышения порядка аппроксимации.

Бикompактная схема 4го порядка по пространству

$$T_{i+1/2} = \frac{T_{i+1} + T_i}{2} - \frac{h}{12} \left(\frac{\partial T_{i+1}}{\partial x} - \frac{\partial T_i}{\partial x} \right),$$

$$S_{i+1/2} = \frac{S_{i+1} + S_i}{2} - \frac{h}{12} \left(\frac{\partial S_{i+1}}{\partial x} - \frac{\partial S_i}{\partial x} \right),$$

$$\frac{\partial T_{i+1/2}}{\partial x} = \frac{3}{2} \frac{T_{i+1} - T_i}{h} - \frac{1}{4} \left(\frac{\partial T_i}{\partial x} + \frac{\partial T_{i+1}}{\partial x} \right),$$

$$\frac{\partial S_{i+1/2}}{\partial x} = \frac{3}{2} \frac{S_{i+1} - S_i}{h} - \frac{1}{4} \left(\frac{\partial S_i}{\partial x} + \frac{\partial S_{i+1}}{\partial x} \right).$$

Безусловно устойчивая и положительная бикompактная схема 2го порядка по пространству

$$T_{i+1/2} = \frac{T_{i+1} + T_i}{2} + \frac{h}{4\kappa_{i+1/2}} (S_{i+1} - S_i),$$

$$S_{i+1/2} = \frac{S_{i+1} + S_i}{2},$$

$$\frac{\partial T_{i+1/2}}{\partial x} = \frac{T_{i+1} - T_i}{h},$$

$$\frac{\partial S_{i+1/2}}{\partial x} = \frac{S_{i+1} - S_i}{h}.$$

Выводы



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

1. Исследования, проведенные в данном докладе, показали, что способы И.В. Петухова, позволяющие строить бикомпактные схемы 4го порядка аппроксимации, **не помогают повысить порядок аппроксимации бикомпактных схем** без потери свойств безусловной устойчивости и положительности.
1. Использование формулы Эйлера-Маклорена при неявной аппроксимации уравнения теплопроводности **нарушает положительности схемы.**
1. При решении уравнения теплопроводности потеря безусловной положительности схемы **снимает все достоинства** от повышения порядка аппроксимации.

4. Многочисленные публикации **не подтверждают сохранение безусловной положительности и монотонности** высокоточных бикомпактных схем и для гиперболических уравнений.

5. Можно найти параметры аппроксимационных соотношений, позволяющих строить безусловно устойчивые и положительные бикомпактные схемы первого порядка аппроксимации по времени и второго - по пространству без потери свойств безусловной устойчивости и положительности. **Только такие бикомпактные схемы рекомендуются для использования при решении уравнения теплопроводности.**

**Спасибо
за внимание**

