

对流扩散方程的一种高精度特征差分格式

黄素珍¹, 张鲁明²

(1. 盐城工学院基础部 224003 江苏 盐城)

(2. 南京航空航天大学理学院 210016 江苏 南京)

[摘要] 根据已发展的二阶微商三次样条四阶逼近公式,提出了基于线性插值的求解对流扩散方程特征差分格式.通过 Fourier 方法讨论了文中格式的稳定性.数值结果表明,本文的格式明显优于基于线性插值的特征差分格式.

[关键词] 对流扩散方程,特征差分格式,线性插值,稳定性,高精度

[中图分类号] O241.8, [文献标识码] A, [文章编号] 1001-4616(2005)02-0038-05

A Class of High Accuracy Characteristic Difference Method for Convection-Diffusion Equations

Huang Suzhen^{1,2}, Zhang Luming²

(1. Department of Basic Science, Yancheng Institute of Technology, 224003, Yancheng, China)

(2. School of Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 210016, Nanjing, China)

Abstract : A new kind of characteristic-difference scheme is proposed for solving convection-diffusion equations with the linear interpolation method. The method is based on the cubic-spline difference formulae of fourth-order accuracy for second order derivatives developed by the other authors. The stability of the characteristic-difference scheme is studied. Numerical results show that our method is better than that of the ordinary characteristic-difference scheme with linear interpolation method.

Key words : convection-diffusion equations, characteristic-difference scheme, linear interpolation, stability, high accuracy

0 引言

对流扩散方程是一类基本的运动方程.它可以描述如质量、热量的输运过程及反应扩散过程等众多物理现象^[1~5].因此研究对流扩散方程的数值解法具有非常重要的理论和工程应用价值.

对流扩散问题最常用的数值方法之一是特征有限差分方法^[6],其中最具有代表性的当属基于线性插值的特征差分格式,但该格式在空间上的精度只能达到二阶,数值扩散较大.作为提高数值模拟可靠性保证的有效途径之一就是保持原有差分格式结构不变的前提下,改善数值方法的精度^[7~11].本文利用修正技术^[11],先对微分方程进行一定的修改,然后从修正的微分方程出发,根据已发展的二阶微商三次样条四阶逼近公式^[12],采用线性插值方法,提出了数值求解对流扩散方程的特征差分格式.数值结果表明,该方法可以很好地解决对流占优的扩散问题的数值计算.

1 差分格式及其收敛性

考虑如下的对流扩散问题

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & 0 \leq x \leq L, 0 < t < T, \\ u(x, 0) = f(x), & 0 < x < L, \\ u(0, t) = g_1(t), u(L, t) = g_2(t), & 0 < t < T. \end{cases} \quad (1)$$

收稿日期:2004-06-28.

作者简介:黄素珍,女,1975—,讲师,主要从事偏微分方程数值解的研究. E-mail: hszhszhsz2002@ychoo.com.cn

其中 $f(x)$ 、 $g_1(t)$ 和 $g_2(t)$ 为已知函数,为了确定起见,假设 $v > 0$.

首先建立差分网格 $x_j = jh$, $t_n = n\tau$, $j = 0, 1, \dots, J$, $n = 0, 1, \dots, N$, 满足 $Jh = L$, $N\tau = T$.

然后对对流扩散方程进行扩散摄动:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = \alpha \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (2)$$

其中 $\alpha = \frac{1}{1 + R_\Delta + \frac{1}{4}R_\Delta^2}$, $R_\Delta = \frac{vh}{2\varepsilon}$ 为网格 Reynolds 数.

当 $h \rightarrow 0$ 时,式(2)是逼近式(1)的.

令 $\phi = (v^2 + 1)^{1/2}$ 与算子 $\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x}$ 相伴的特征方向为: $\frac{\partial}{\partial \lambda} = \frac{1}{\phi} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{v}{\phi} \frac{\partial}{\partial x}$. 于是,式(2)中的方程可化为

$$\phi \frac{\partial u}{\partial \lambda} = \alpha \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (3)$$

根据二阶微商三次样条四阶逼近公式^[3],则有

$$(U_{xx})_{j-1} + 10(U_{xx})_j + (U_{xx})_{j+1} = \frac{12}{h^2}(U_{j-1} - 2U_j + U_{j+1}), \quad (4)$$

其中 $(U_{xx})_j$ 表示二阶偏导数 u_{xx} 在点 (jh, t) 处的近似值.

由于方程(1)在整个求解区域内成立,故在点 $x = (j-1)h$, $x = jh$, $x = (j+1)h$ 等三点上也成立,即

$$\left(\phi \frac{\partial u}{\partial \lambda}\right)_{j-1} = \alpha \varepsilon \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{j-1}, \quad (5)$$

$$\left(\phi \frac{\partial u}{\partial \lambda}\right)_j = \alpha \varepsilon \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j, \quad (6)$$

$$\left(\phi \frac{\partial u}{\partial \lambda}\right)_{j+1} = \alpha \varepsilon \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{j+1}, \quad (7)$$

在第 n 时间层上,将式(5)、(6)和式(7)相加,并考虑到式(4),可得

$$\left(\phi \frac{\partial U}{\partial \lambda}\right)_{j-1}^n + 10\left(\phi \frac{\partial U}{\partial \lambda}\right)_j^n + \left(\phi \frac{\partial U}{\partial \lambda}\right)_{j+1}^n = \frac{12\alpha\varepsilon}{h^2}(U_{j-1}^n - 2U_j^n + U_{j+1}^n). \quad (8)$$

设由点 $A_1(x_{j-1}, t_{n+1})$, $A_2(x_j, t_{n+1})$ 和 $A_3(x_{j+1}, t_{n+1})$ 出发,沿反特征方向与直线 $t = t_n$ 交点分别为 $B_1(\bar{x}, t_n)$, $B_2(\bar{\bar{x}}, t_n)$ 和 $B_3(\bar{\bar{\bar{x}}}, t_n)$, 其中 $\bar{x} = x_{j-1} - \tau v$, $\bar{\bar{x}} = x_j - \tau v$, $\bar{\bar{\bar{x}}} = x_{j+1} - \tau v$ (如图1所示).

对式(8)中的沿特征线的方向导数用向后差商逼近,得:

$$\frac{U_{j-1}^{n+1} - \bar{U}_{j-1}^n}{\tau} + 10\frac{U_j^{n+1} - \bar{\bar{U}}_j^n}{\tau} + \frac{U_{j+1}^{n+1} - \bar{\bar{\bar{U}}}_{j+1}^n}{\tau} = 12\alpha\varepsilon \frac{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}}{h^2}, \quad (9)$$

式中 \bar{U}_{j-1}^n , $\bar{\bar{U}}_j^n$, $\bar{\bar{\bar{U}}}_{j+1}^n$ 分别为对 $u(\bar{x}, t_n)$, $u(\bar{\bar{x}}, t_n)$, $u(\bar{\bar{\bar{x}}}, t_n)$ 用 $u(x, t_n)$ 的近似值 $\{U_l^n\}$ 插值逼近得到的值.

有时,自 A_1 逆着特征方向到前一时间层之前,可能已到边界(如图2所示),这时候有:

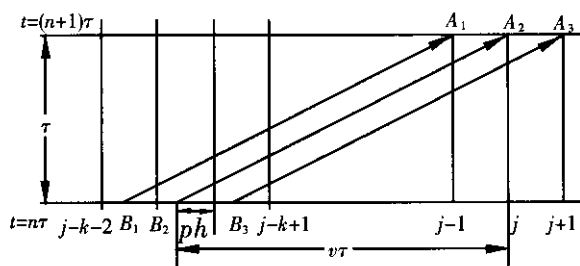


图1 特征差分网格

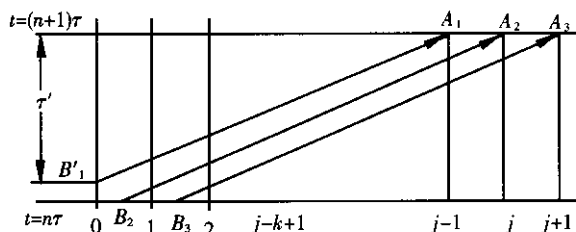


图2 边界结构一

$$\frac{U_{j-1}^{n+1} - u(B'_1)}{\tau'_1} + 10\frac{U_j^{n+1} - \bar{\bar{U}}_j^n}{\tau} + \frac{U_{j+1}^{n+1} - \bar{\bar{\bar{U}}}_{j+1}^n}{\tau} = 12\alpha\varepsilon \frac{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}}{h^2}, \quad (10)$$

其中 $\tau'_1 = \frac{(j-1)h}{v}$, $u(B'_1)$ 由边值条件给出 $u(B'_1) = g_1\left((n+1)\tau - \frac{(j-1)h}{v}\right)$.

有时,自 A_1, A_2 逆着特征方向到前一时间层之前,可能已到边界(如图3所示)这时候有:

$$\frac{U_{j-1}^{n+1} - u(B'_1)}{\tau'_{-1}} + 10 \frac{U_j^{n+1} - u(B'_2)}{\tau'_2} + \frac{U_{j+1}^{n+1} - \bar{U}_{j+1}^n}{\tau} = 12\alpha\varepsilon \frac{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}}{h^2}, \tag{11}$$

其中 $\tau'_{-1} = \frac{(j-1)h}{v}$ $\tau'_2 = \frac{jh}{v}$ $u(B'_1), u(B'_2)$ 由边值条件给出 $u(B'_1) = g_1((n+1)\tau - \frac{(j-1)h}{v})$ $u(B'_2) = g_1((n+1)\tau - \frac{jh}{v})$.

有时,自 A_1, A_2, A_3 逆着特征方向到前一时间层之前,可能已到边界(如图4所示)这时候有:

$$\frac{U_{j-1}^{n+1} - u(B'_1)}{\tau'_{-1}} + 10 \frac{U_j^{n+1} - u(B'_2)}{\tau'_2} + \frac{U_{j+1}^{n+1} - u(B'_3)}{\tau'_3} = 12\alpha\varepsilon \frac{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}}{h^2}, \tag{12}$$

其中 $\tau'_{-1} = \frac{(j-1)h}{v}$ $\tau'_2 = \frac{jh}{v}$ $\tau'_3 = \frac{(j+1)h}{v}$ $u(B'_1), u(B'_2), u(B'_3)$ 由边值条件给出 $u(B'_1) = g_1((n+1)\tau - \frac{(j-1)h}{v})$ $u(B'_2) = g_1((n+1)\tau - \frac{jh}{v})$ $u(B'_3) = g_1((n+1)\tau - \frac{(j+1)h}{v})$.

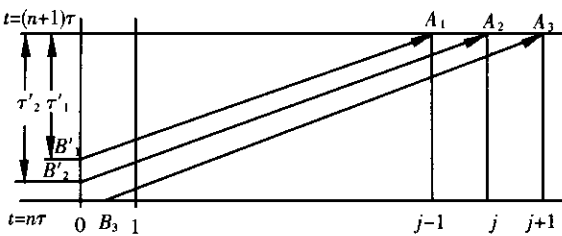


图3 边界结构二

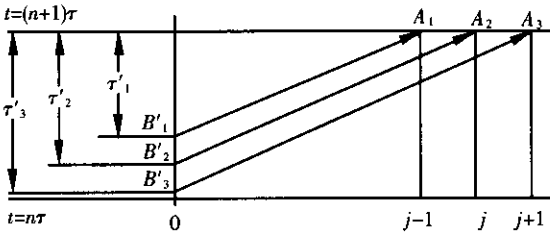


图4 边界结构三

$u(\bar{x}, t_n), u(\bar{x}, t_n), u(\bar{x}, t_n)$ 用线性插值来逼近,就得到如下特征差分格式:

$$\frac{U_{j-1}^{n+1} - [pU_{j-k-2}^n + (1-p)U_{j-k-1}^n]}{t} + 10 \frac{U_j^{n+1} - [pU_{j-k-1}^n + (1-p)U_{j-k}^n]}{\tau} + \frac{U_{j+1}^{n+1} - [pU_{j-k}^n + (1-p)U_{j-k+1}^n]}{\tau} = 12\alpha\varepsilon \frac{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}}{h^2} \quad j = 2, \dots, J-2. \tag{13}$$

式中 $p = \frac{v\tau}{h} - k$ $k = \left[\frac{v\tau}{h} \right]$ 显然 $0 \leq p < 1$ 这里 $\left[\frac{v\tau}{h} \right]$ 表示 $\frac{v\tau}{h}$ 的整数部分.

设 $r = \alpha\varepsilon \frac{\tau}{h^2}$ 式(13)也可以写成:

$$(1 - 12r)U_{j-1}^{n+1} + (10 + 24r)U_j^{n+1} + (1 - 12r)U_{j+1}^{n+1} = pU_{j-k-2}^n + (1 + 9p)U_{j-k-1}^n + (10 - 9p)U_{j-k}^n + (1 - p)U_{j-k+1}^n \quad j = 2, \dots, J-2. \tag{14}$$

下面用 Fourier 方法来分析上述差分格式的稳定性. 格式(14)的增长因子可以表示成如下形式:

$$G_s = e^{-ik\beta} \frac{M_s}{10 + 2\cos\beta + 24r(1 - \cos\beta)}, \tag{15}$$

式中 i 为虚数单位, M_s 为对 $u(\bar{x}, t_n), u(\bar{x}, t_n)$ 和 $u(\bar{x}, t_n)$ 进行插值计算时 Fourier 变换的因子. 不难求得:

$$M_s = pe^{-2i\beta} + (1 + 9p)e^{-i\beta} + (10 - 9p) + (1 - p)e^{i\beta}. \tag{16}$$

由式(15),有

$$|G_s| = \frac{|M_s|}{|10 + 2\cos\beta + 24r(1 - \cos\beta)|}. \tag{17}$$

因为 $0 \leq p < 1$ 不难得出:

$$|M_s| = |pe^{-2i\beta} + 10pe^{-i\beta} + (10 - 9p) + (1 - p)(e^{i\beta} + e^{-i\beta})| \leq |pe^{-2i\beta}| + |10pe^{-i\beta}| + |10 - 9p| + 2(1 - p)\cos\beta$$

= 10 + 2cosβ + 2p(1 - cosβ) ,

欲使|G_s| ≤ 1 ,只要 r > $\frac{p}{12}$. 格式(14)稳定的条件为 :

r > $\frac{p}{12}$. (18)

其中 0 ≤ p < 1.

2 数值实验

为了说明本文给出的方法可用于对流扩散方程的计算 ,并有据可比 ,我们选用了与文献 [3] 相同的算例. 定解问题

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + k \frac{\partial u}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} , & 0 < x < 1 , 0 < t < T , \varepsilon > 0 , \\ u(x, 0) = 0 , 0 < x < 1 , \\ u(0, t) = 0 , u(1, t) = 1 , 0 < t < T. \end{cases}$$
 (19)

的精确解是^[4]

$$u(x, t) = \frac{e^{kx/\varepsilon} - 1}{e^{k/\varepsilon} - 1} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m m \pi}{(m \pi)^2 + \left(\frac{k}{2\varepsilon}\right)^2} e^{k(x-1)/2\varepsilon} \sin(m \pi x) e^{-[(m \pi)^2 \varepsilon + k^2/4\varepsilon]t}.$$
 (20)

以下我们把直接根据二阶微商三次样条四阶逼近公式基于线性插值的特征差分格式称为格式(A) ,把一般的基于线性插值的特征差分格式称为格式(B) ,把本文的格式(14)即先采用修正技术再根据二阶微商三次样条四阶逼近公式基于线性插值构造的特征差分格式称为格式(C) . 对此分别采用格式(A)、格式(B)和格式(C)进行了计算 ,计算结果分别列在表 1 和表 2 中.

表 1 k = 1.0 ε = 1.0 σ = 0.004 h = 0.02 R_Δ = $\frac{kh}{2\varepsilon}$ = 0.01 t = 0.4 时的数值结果

j (x _j)	格式(A)			格式(B)			精确解
	数值解	绝对误差	相对误差	数值解	绝对误差	相对误差	
5	0.060 430	0.000 291	0.004 839	0.060 431	0.000 292	0.004 855	0.060 139
10	0.127 26	0.000 54	0.004 261	0.127 26	0.000 54	0.004 261	0.126 72
15	0.201 28	0.000 76	0.003 790	0.201 28	0.000 76	0.003 790	0.200 52
20	0.283 33	0.000 92	0.003 258	0.283 33	0.000 92	0.003 258	0.282 41
25	0.374 33	0.001 01	0.002 705	0.374 34	0.001 02	0.002 732	0.373 32
30	0.475 27	0.001 04	0.002 193	0.475 28	0.001 05	0.002 214	0.474 23
35	0.587 18	0.000 97	0.001 655	0.587 18	0.000 97	0.001 655	0.586 21
40	0.711 15	0.000 8	0.001 126	0.711 15	0.000 8	0.001 126	0.710 35
45	0.848 34	0.000 48	0.000 566	0.848 35	0.000 49	0.000 578	0.847 86

表 2 k = 1.0 ε = 0.01 σ = 0.004 h = 0.02 R_Δ = $\frac{kh}{2\varepsilon}$ = 1 t = 0.4 时的数值结果

j (x _j)	数值解			精确解
	格式(A)	格式(B)	格式(C)	
5	2.233 6e - 028	1.169 1e - 024	2.959 2e - 040	4.120 6e - 040
10	1.746 4e - 024	1.449 6e - 021	6.552 6e - 036	9.024 8e - 036
15	8.181 2e - 021	1.368 4e - 018	1.443 7e - 031	1.988 7e - 031
20	2.207 4e - 017	9.673 9e - 016	3.179 9e - 027	4.446 5e - 027
25	3.395 1e - 014	5.083 9e - 013	6.997 7e - 023	1.111 7e - 022
30	3.059 5e - 011	2.009 7e - 010	1.746 7e - 018	3.279 9e - 018
35	1.760 1e - 008	6.250 4e - 008	6.956 8e - 014	8.866 7e - 014
40	7.548 7e - 006	1.659 2e - 005	2.148 0e - 009	2.053 0e - 009
45	0.002 863 8	0.004 107 9	5.379 7e - 005	4.539 7e - 005

数值结果表明 :用格式(A)求解非对流占优扩散问题时 ,无数值振荡 ,数值扩散小 ,具有较高的精度. 而对于对流占优扩散问题 ,采用本文的格式(14)即格式(C)是有效的 ,无数值振荡 ,由于利用了修正技术 ,减少了数值扩散 ,提高了计算的精度. 本文对对流扩散方程给出的特征差分格式明显优于一般的基于线性插值的特征差分格式. (下转第 70 页)

拟合和预测能力都很相近,这说明基于分子全息的 QSAR 模型具有很好的预测能力和稳健度.

3 结论

本文应用分子全息结构描述子表征 69 种苯的衍生物并建立相应 QSAR 模型,并应用 LOO 与 LNO 交叉验证方法检验模型质量.结果表明所建立模型具有良好的预测能力与稳健度.分子全息 QSAR 技术的特点决定其在环境科学领域研究构效关系方面必将拥有广阔的应用前景.

[参考文献]

- [1] Topliss J G, Edwards R P. Chance factors in studies of quantitative structure-activity relationships[J]. J Med Chem, 1979, 22(10): 1238—1246.
- [2] David A W, Frank R B. Holographic QSAR of benzodiazepines[J]. Quant Struct Act Relat, 1998, 17(3): 224—251.
- [3] 崔世海, 刘树深, 王晓栋, 等. 雌二醇衍生物的 HQSAR 研究[J]. 科学通报, 2003, 48(3): 239—242.
- [4] Cui S, Wang X, Liu S, *et al.* Predicting toxicity of benzene derivatives by molecular hologram derived quantitative structure-activity relationships (QSARS) [J]. SAR and QSAR in Environmental Research, 2003, 14(3): 223—231.
- [5] Subhash C, Basak Brian D Gute, *et al.* A comparative QSAR study of benzamides complement inhibitory activity and benzene derivatives acute toxicity [J]. Computers and Chemistry, 2000, 24(2): 181—191.
- [6] Leming M S, Hong F, Weida T, *et al.* QSAR models using a large diverse set of estrogen [J]. J Chem Inf Comput Sci, 2001, 41(1): 186—195.
- [7] 王连生. 有机污染物化学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2004.
- [8] Wolfgang S. Receptor based 3D QSAR analysis of estrogen receptor ligands-merging the accuracy of receptor-based alignment with the computational efficiency of ligand-based method [J]. Journal of Computer-Aided Molecular Design, 2000, 14(16): 559—572.

[责任编辑: 孙德泉]

(上接第41页)

[参考文献]

- [1] Chatwin P C, Allen C M. Mathematical models of dispersion in rivers and estuaries [J]. Ann Rev Fluid Mech, 1985, 17: 119—149.
- [2] Chaudhry M H, Cass D E, Edinger J E. Modelling of unsteady-flow water temperatures [J]. J Hydraul Eng, 1983, 109(5): 657—669.
- [3] Fattah Q N, Hoopes J A. Dispersion in anisotropic homogeneous porous media [J]. J Hydraul Eng, 1985, 111: 810—827.
- [4] Gane C R, Stephenson P L. An explicit numerical method for solving transient combined heat conduction and convection problems [J]. Int J Numer Meth Engrg, 1979, 14: 1141—1163.
- [5] Guvanasen V, Volker R E. Numerical solutions for solute transport in unconfined aquifers [J]. Int J Numer Meth Fluids, 1983, 3: 103—123.
- [6] Douglas J, Russell T F. Numerical methods for convection-dominated diffusion problem based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedure [J]. SIAM J, Numer Anal, 1982, 19(5): 871—885.
- [7] Rigal A. Numerical analysis of two-level finite difference schemes for unsteady diffusion-convection problems [J]. Int J Numer Methods Engrg, 1989, 28(2): 1001—1021.
- [8] 陆金甫, 张宝琳, 徐涛. 求解对流扩散方程的交替分段显-隐式方法 [J]. 数值计算与计算机应用, 1998, 19(3): 161—167.
- [9] 张宝琳, 符鸿源. 一类交替块 Crank-Nicolson 方法的差分图 [J]. 科学通报, 1999, 40(11): 1148—1152.
- [10] 王文治. 求解扩散方程的一类交替分组显式方法 [J]. 山东大学学报(理学版), 2002, 37(3): 194—199.
- [11] 陆金甫, 杜正平, 刘晓遇. 对流占优扩散问题的一种特征差分方法 [J]. 清华大学学报(自然科学版), 2002, 42(8): 35—37.
- [12] 田振夫. 泊松方程的高精度三次样条差分方法 [J]. 西北师范大学学报(自然科学版), 1996, 32(2): 13—17.
- [13] Evans D J, Abdullah A R. A new explicit method for the diffusion-convection equations [J]. Comput Math Appl, 1985, 11: 145—154.

[责任编辑: 陆炳新]