РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М. В. КЕЛДЫША

М. Ю. Заславский, Д. Ю. Максимов

ПОЛОЖИТЕЛЬНАЯ ПО ТЕМПЕРАТУРЕ КОНСЕРВАТИВНАЯ РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ ЗАДАЧ ГОРЕНИЯ

Москва 2006

М. Ю. Заславский, Д. Ю. Максимов, Положительная по температуре консервативная разностная схема для задач горения.

Аннотация. Рассматривается диффузионная часть в схеме расщепления для задачи горения. Предложена специальная аппроксимация потока энергии, обеспечивающая выполнение дополнительного условия неотрицательности источника в уравнении теплопроводности. Строится разностная схема на основе этой аппроксимации[1].

M. Yu. Zaslavsky, D. Yu. Maksimov, Positive in temperature conservative difference scheme for combustion problems.

Abstract. The diffusive part in an operator splitting scheme is considered for a combustion problem. Special approximation of the energy flux is proposed providing fulfilment of the additional condition of the source non-negativeness in the heat conduction equation. Finite difference scheme is constructed from this approximation.

Содержание

[1]Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 03-01-00641).

1 Введение

Система уравнений, описывающих процесс горения, включает в себя уравнение неразрывности, уравнения баланса импульсов и полной энергии и уравнение конвекции–диффузии для описания переноса топлива [6]. Все эти уравнения могут быть расщеплены на «диффузионную» часть, т. е. учитывающую диссипативные процессы — вязкость, теплопроводность, диффузию, и систему уравнений адвекции, т. е. уравнения газодинамики и перенос топлива.

Известно, что для получения численного решения физических задач используются, в частности, дивергентная форма уравнений и соответствующая разностная аппроксимация. Каждое уравнение описывает закон сохранения и превращения одной величины. Могут существовать дополнительные соотношения, вытекающие из исходных уравнений и описывающие характерные физические свойства системы. Лишь узкий класс консервативных разностных схем может хорошо аппроксимировать эти соотношения. Известный пример — полностью консервативные схемы в газовой динамике, которые обеспечивают баланс как внутренней, так и полной энергии.

Наличие в схеме энергетических дисбалансов можно трактовать как наличие некоторых источников энергии чисто разностной природы, связанных с «рассогласованием» отдельных разностных уравнений схемы. Дисбалансы зависят от характера решения: на гладких функциях они малы, однако на решениях, сильно меняющихся во времени и пространстве, дисбалансные члены велики и могут быть сравнимы по величине с полной энергией системы [1].

В настоящей работе рассматривается соотношение, вытекающее из параболической части системы уравнений горения. При наличии диссипативных процессов часть кинетической энергии переходит в тепловую. Это приводит к появлению источника в уравнении теплопроводности, который положителен. Отсюда следует, в частности, что произвольный положительный начальный профиль температуры должен оставаться положительным в любой момент времени. Это равносильно выполнению принципа минимума для уравнения теплопроводности, т. е. условия достижения минимума решения либо в начальных данных, либо на границе при любых начальных условиях [3].

Описанные условия выполняются в дифференциальной постановке задачи, являясь следствиями уравнений системы, в разностном же случае это, вообще говоря, не так: проблема аппроксимации источника диссипации возникает в задачах размерности начиная со второй. Если условие положительности источника диссипации выполняется в разностной форме, то температура в системе остаётся положительной при переходе с одного временно́го слоя на другой. Такие схемы назовём положительными.

Это обеспечивает выполнение принципа минимума для уравнения теплопроводности. Консервативная положительная по температуре разностная схема является термодинамически обусловленной, поскольку обеспечивает корректное описание процесса превращения кинетической энергии в тепловую [9]. Ниже рассматривается вариант такой схемы для диссипативной части 2D системы уравнений, описывающей динамику горения.

2 Постановка задачи

Рассмотрим постановку задачи, приведённую в [4]. Это 2D двухкомпонентная задача, включающая перенос, теплопроводность, вязкость, диффузию горючего вещества, рассматриваемая в общем случае в поле тяжести:

$$
\left\{
\begin{aligned}
&\text{уравнение неразрывности: } \partial_t\rho + \partial_x(\rho v_x) + \partial_y(\rho v_y) = 0, && \text{(2.1а)}\\
&\qquad\text{уравнения сохранения импульсов:}\\
&\partial_t(\rho v_x) + \partial_x(\rho v_x^2 + p - \tau^{xx}) + \partial_y(\rho v_x v_y - \tau^{xy}) = \rho g^x, && \text{(2.1б)}\\
&\partial_t(\rho v_y) + \partial_x(\rho v_x v_y - \tau^{yx}) + \partial_y(\rho v_y^2 + p - \tau^{yy}) = \rho g^y, && \text{(2.1в)}\\
&\text{уравнение сохранения энергии: } \partial_t(\rho[e + \frac{1}{2}(v_x^2 + v_y^2)]) +\\
&+ \partial_x(\rho v_x[e + \frac{1}{2}(v_x^2 + v_y^2)] + p v_x - v_x\tau^{xx} - v_y\tau^{xy} + q^x) +\\
&+ \partial_y(\rho v_y[e + \frac{1}{2}(v_x^2 + v_y^2)] + p v_y - v_x\tau^{yx} - v_y\tau^{yy} + q^y) =\\
&\qquad = \rho v_x g^x + \rho v_y g^y, && \text{(2.1г)}\\
&\qquad\text{уравнение химической кинетики: } \partial_t(\rho Y) +\\
&+ \partial_x(\rho v_x Y - \eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial_x Y) + \partial_y(\rho v_y Y - \eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial_y Y) = -Z, && \text{(2.1д)}
\end{aligned}
\right.
$$

где ρ — плотность, v_x, v_y — скорости, $p = p(\rho, T)$ — давление, T — температура, τ^{xx}, τ^{xy}, τ^{yx}, τ^{yy} — компоненты тензора вязких напряжений, g^x, g^y — компоненты ускорения свободного падения, e — внутренняя энергия на единицу массы, q^x, q^y — компоненты вектора теплового потока, Y — объёмная концентрация топлива, η — первая вязкость, называемая также динамической, $\mathrm{Sc} = \eta/\rho D$ — число Шмидта (D — коэффициент диффузии горючей смеси), Z — скорость реакции.

Расчётная область — прямоугольник $\{(x, y) : 0 \leqslant x \leqslant L_x,\ 0 \leqslant y \leqslant L_y\}$. Граничные условия: $\boldsymbol{v} = 0$, $\partial_n T = 0$, $Y(x{=}0) = 0$, $Y(x{=}1) = 1$, $\partial_n Y(y{=}0, y{=}1) = 0$.

Метод, предложенный для решения этой задачи, предполагает расщепление на конвективную и диффузионную части, которые решаются отдельно. Подобный подход был также применён для 1D задачи в работе [2].

Система уравнений диффузионной части имеет следующий вид

$$
\begin{cases}
\partial_t \rho = 0, & (2.2а)\\
\partial_t(\rho v_x) + \partial_x(-\tau^{xx}) + \partial_y(-\tau^{xy}) = 0, & (2.2б)\\
\partial_t(\rho v_y) + \partial_x(-\tau^{yx}) + \partial_y(-\tau^{yy}) = 0, & (2.2в)\\
\partial_t(\rho[e + \frac{1}{2}(v_x^2 + v_y^2)]) + \\
+ \partial_x(-v_x\tau^{xx} - v_y\tau^{xy} + q^x) + \partial_y(-v_x\tau^{yx} - v_y\tau^{yy} + q^y) = 0, & (2.2г)\\
\partial_t(\rho Y) + \partial_x(-\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial_x Y) + \partial_y(-\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial_y Y) = 0. & (2.2д)
\end{cases}
$$

Все источники, что важно, отнесены к конвективной части. Граничные условия те же.

Определяющие соотношения:

$$\tau^{xx} = (\xi - \frac{2}{3}\eta)(\partial_x v_x + \partial_y v_y) + 2\eta\partial_x v_x, \tag{2.3}$$

$$\tau^{xy} = \tau^{yx} = 2\eta\frac{1}{2}(\partial_x v_y + \partial_y v_x), \tag{2.4}$$

$$\tau^{yy} = (\xi - \frac{2}{3}\eta)(\partial_x v_x + \partial_y v_y) + 2\eta\partial_y v_y, \tag{2.5}$$

$$\xi = \xi(T),\ \eta = \eta(T), \tag{2.6}$$

$$e = QY + c_v T, \tag{2.7}$$

$$q^x = -c_p\eta/\mathrm{Pr}\cdot\partial_x T - Q\,\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial_x Y, \tag{2.8}$$

$$q^y = -c_p\eta/\mathrm{Pr}\cdot\partial_y T - Q\,\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial_y Y, \tag{2.9}$$

где ξ — вторая вязкость, $\mathrm{Pr} = \eta c_p/\varkappa$ — число Прандтля ($\varkappa$ — коэффициент теплопроводности), Q — теплотворная способность топлива, также называемая энергией выхода реакции (на единицу массы), c_p, c_v — теплоёмкости на единицу массы при постоянном давлении и объёме соответственно.

3 Свойство положительной определённости

Вычтем из уравнения (2.2г) уравнения (2.2б), (2.2в), (2.2д), умноженные на v_x, v_y и Q соответственно. Учитывая (2.2а), получим

$$\rho\partial_t([c_v T]) + \partial_x(-c_p\eta/\mathrm{Pr}\cdot\partial_x T) + \partial_y(-c_p\eta/\mathrm{Pr}\cdot\partial_y T) = A_{\boldsymbol{v}}, \tag{3.1}$$

где $A_{\boldsymbol{v}}$ — квадратичная диссипативная форма относительно производных скоростей, равная

$$\mathrm{div}(\boldsymbol{v}\cdot\underset{\sim}{\tau}) - \boldsymbol{v}\cdot\mathrm{div}\,\underset{\sim}{\tau} = \tau^{xx}\partial_x v_x + \tau^{xy}\partial_x v_y + \tau^{yx}\partial_y v_x + \tau^{yy}\partial_y v_y =$$

$$= [(\xi - \frac{2}{3}\eta)(\operatorname{div}\boldsymbol{v})^2] + [2\eta((\partial_x v_x)^2 + (\partial_y v_y)^2)] + [\eta(\partial_x v_y + \partial_y v_x)^2]. \tag{3.2}$$

Нетрудно убедиться в том, что $A_{\boldsymbol{v}}$ неотрицательно определена, т. е.

$$A_{\boldsymbol{v}} \geqslant 0. \tag{3.3}$$

Более точно $A_{\boldsymbol{v}}$ положительно определена по $\partial_x v_x$ и $\partial_y v_y$ и неотрицательно определена по $\partial_x v_y$ и $\partial_y v_x$. Неравенство (3.3) выражает собой переход энергии из кинетической в тепловую, т. е. диссипацию. Это означает, что изначально неотрицательная температура, в силу принципа минимума, никогда не будет меньше нуля.

4 Разностная схема внутри области

Будем строить разностную схему с весами, вводя источники, которые будут использоваться для численной проверки правильности и точности получаемой схемы. Будем считать для простоты, что коэффициенты постоянные, сетка равномерная по x (шаги h_x) и y (шаги h_y). Узлы нумеруются индексами $m = 0, \ldots, M$, $k = 0, \ldots, K$. Предполагается, что неизвестные находятся в узлах сетки.

1 Уравнение для ρ:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \tag{4.1}$$

Разностная схема для этого уравнения очевидна:

$$\frac{\hat{\rho}_{m,k} - \rho_{m,k}}{\tau} = 0. \tag{4.2}$$

В реальных задачах источник для ρ равен 0. Если потребуется учесть ненулевой источник T^{ρ}, то для остальных уравнений нужно воспользоваться формулой

$$\frac{\partial \rho f}{\partial t} \approx \frac{\hat{\rho}\hat{f} - \rho f}{\tau} = f^{(\sigma)}\frac{\hat{\rho} - \rho}{\tau} + \rho^{(1-\sigma)}\frac{\hat{f} - f}{\tau}, \tag{4.3}$$

которая верна для любых σ, и положить в ней $\sigma = 0$.

2 Введём обозначения $u := v_x$, $v := v_y$, $\vec{w} = (u, v)$. Тогда уравнения для u и v запишутся в виде

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = \frac{\partial \tau^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau^{xy}}{\partial y} + T^{\rho u}, \tag{4.4}$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} = \frac{\partial \tau^{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau^{yy}}{\partial y} + T^{\rho v}, \tag{4.5}$$

где

$$\tau^{xx} = \left(\xi + \frac{4}{3}\eta\right)\frac{\partial u}{\partial x} + \left(\xi - \frac{2}{3}\eta\right)\frac{\partial v}{\partial y}, \tag{4.6}$$

$$\tau^{xy} = \tau^{yx} = \eta\frac{\partial u}{\partial y} + \eta\frac{\partial v}{\partial x}, \tag{4.7}$$

$$\tau^{yy} = \left(\xi - \frac{2}{3}\eta\right)\frac{\partial u}{\partial x} + \left(\xi + \frac{4}{3}\eta\right)\frac{\partial v}{\partial y}, \tag{4.8}$$

$\xi, \eta \geqslant 0$. Напишем консервативную схему с весом σ_1 для u:

$$\hat{\rho}_{m,k}\frac{\hat{u}_{m,k} - u_{m,k}}{\tau} =$$

$$= (1-\sigma_1)\left\{\frac{\tau^{xx}_{m+\frac{1}{2},k} - \tau^{xx}_{m-\frac{1}{2},k}}{h_x} + \frac{\tau^{xy}_{m,k+\frac{1}{2}} - \tau^{xy}_{m,k-\frac{1}{2}}}{h_y}\right\} + \sigma_1\{\}\hat{} + T^{\rho u}_{m,k}{}^{(\sigma_1)}, \tag{4.9}$$

$$\tau^{xx}_{m+\frac{1}{2},k} = \left(\xi + \frac{4}{3}\eta\right)\frac{u_{m+1,k} - u_{m,k}}{h_x} +$$

$$+ \left(\xi - \frac{2}{3}\eta\right)\frac{1}{2}\left(\frac{v_{m,k+1} - v_{m,k-1}}{2h_y} + \frac{v_{m+1,k+1} - v_{m+1,k-1}}{2h_y}\right), \tag{4.10}$$

$$\tau^{xy}_{m,k+\frac{1}{2}} = \eta\left(\frac{u_{m,k+1} - u_{m,k}}{h_y} + \frac{1}{2}\left(\frac{v_{m+1,k} - v_{m-1,k}}{2h_x} + \frac{v_{m+1,k+1} - v_{m-1,k+1}}{2h_x}\right)\right), \tag{4.11}$$

для v:

$$\hat{\rho}_{m,k}\frac{\hat{v}_{m,k} - v_{m,k}}{\tau} =$$

$$= (1-\sigma_1)\left\{\frac{\tau^{yx}_{m+\frac{1}{2},k} - \tau^{yx}_{m-\frac{1}{2},k}}{h_x} + \frac{\tau^{yy}_{m,k+\frac{1}{2}} - \tau^{yy}_{m,k-\frac{1}{2}}}{h_y}\right\} + \sigma_1\{\}\hat{} + T^{\rho v}_{m,k}{}^{(\sigma_1)}, \tag{4.12}$$

$$\tau^{yx}_{m+\frac{1}{2},k} = \eta\left(\frac{1}{2}\left(\frac{u_{m,k+1} - u_{m,k-1}}{2h_y} + \frac{u_{m+1,k+1} - u_{m+1,k-1}}{2h_y}\right) + \frac{v_{m+1,k} - v_{m,k}}{h_x}\right), \tag{4.13}$$

$$\tau^{yy}_{m,k+\frac{1}{2}} = \left(\xi - \frac{2}{3}\eta\right)\frac{1}{2}\left(\frac{u_{m+1,k} - u_{m-1,k}}{2h_x} + \frac{u_{m+1,k+1} - u_{m-1,k+1}}{2h_x}\right) +$$

$$+ \left(\xi + \frac{4}{3}\eta\right)\frac{v_{m,k+1} - v_{m,k}}{h_y}. \tag{4.14}$$

Уравнения (4.9) и (4.12) составляют систему линейных уравнений для вектора скоростей с симметричной и положительно определённой матрицей. Аппроксимация $\underset{\sim}{\tau}$ симметрична и естественна на данном шаблоне.

3 Уравнение для Y:

$$\frac{\partial \rho Y}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\eta}{\mathrm{Sc}}\frac{\partial Y}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\eta}{\mathrm{Sc}}\frac{\partial Y}{\partial y}\right) + T^{\rho Y}, \tag{4.15}$$

$\mathrm{Sc} > 0$. Разностное уравнение с весом σ_3:

$$\hat{\rho}_{m,k}\frac{\hat{Y}_{m,k} - Y_{m,k}}{\tau} = (1-\sigma_3)\left\{\frac{(\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial Y/\partial x)_{m+\frac{1}{2},k} - (\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial Y/\partial x)_{m-\frac{1}{2},k}}{h_x} + \right.$$

$$\left. + \frac{(\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial Y/\partial y)_{m,k+\frac{1}{2}} - (\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial Y/\partial y)_{m,k-\frac{1}{2}}}{h_y}\right\} + \sigma_3\,\{\}\hat{} + T^{\rho Y\,(\sigma_3)}_{m,k}, \tag{4.16}$$

$$\left(\frac{\eta}{\mathrm{Sc}}\frac{\partial}{\partial x}Y\right)_{m+\frac{1}{2},k} = \frac{\eta}{\mathrm{Sc}}\frac{Y_{m+1,k} - Y_{m,k}}{h_x}, \tag{4.17}$$

$$\left(\frac{\eta}{\mathrm{Sc}}\frac{\partial}{\partial y}Y\right)_{m,k+\frac{1}{2}} = \frac{\eta}{\mathrm{Sc}}\frac{Y_{m,k+1} - Y_{m,k}}{h_y}. \tag{4.18}$$

4 Уравнение для T:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho[e + \frac{1}{2}(u^2+v^2)]\right) = \frac{\partial}{\partial x}(u\tau^{xx} + v\tau^{xy} - q^x) + \frac{\partial}{\partial x}(u\tau^{yx} + v\tau^{yy} - q^y) + T^w, \tag{4.19}$$

где

$$e = c_v T + QY, \tag{4.20}$$

$$q^x = -\gamma c_v\frac{\eta}{\mathrm{Pr}}\frac{\partial T}{\partial x} - Q\frac{\eta}{\mathrm{Sc}}\frac{\partial Y}{\partial x}, \qquad q^y = -\gamma c_v\frac{\eta}{\mathrm{Pr}}\frac{\partial T}{\partial y} - Q\frac{\eta}{\mathrm{Sc}}\frac{\partial Y}{\partial y}, \tag{4.21}$$

$\gamma = c_p/c_v$ — показатель адиабаты, $\mathrm{Pr} > 0$. Введено обозначение $w = \rho(e+ +\frac{1}{2}(u^2+v^2))$. Уравнение будем решать относительно $c_v T$, поэтому перепишем его в виде

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho c_v T = \left[\frac{\partial}{\partial x}\gamma\frac{\eta}{\mathrm{Pr}}\frac{\partial}{\partial x}c_v T + \frac{\partial}{\partial y}\gamma\frac{\eta}{\mathrm{Pr}}\frac{\partial}{\partial y}c_v T + T^w\right] -$$

$$-\frac{\partial}{\partial t}\rho\frac{1}{2}(u^2+v^2) + \frac{\partial}{\partial x}(u\tau^{xx} + v\tau^{xy}) + \frac{\partial}{\partial y}(u\tau^{yx} + v\tau^{yy}) +$$

$$+ Q\frac{\partial}{\partial t}\rho Y + Q\frac{\partial}{\partial x}\frac{\eta}{\mathrm{Sc}}\frac{\partial Y}{\partial x} + Q\frac{\partial}{\partial y}\frac{\eta}{\mathrm{Sc}}\frac{\partial Y}{\partial y}. \tag{4.22}$$

Пространственную производную в правой части берём с весом σ_2:

$$\hat{\rho}_{m,k}\frac{c_v\hat{T}_{m,k} - c_v T_{m,k}}{\tau} =$$

$$= (1-\sigma_2)\left\{\frac{(\gamma\eta/\mathrm{Pr}\cdot\partial c_vT/\partial x)_{m+\frac12,k}-(\gamma\eta/\mathrm{Pr}\cdot\partial c_vT/\partial x)_{m-\frac12,k}}{h_x}+\right.$$

$$\left.+\frac{(\gamma\eta/\mathrm{Pr}\cdot\partial c_vT/\partial y)_{m,k+\frac12}-(\gamma\eta/\mathrm{Pr}\cdot\partial c_vT/\partial y)_{m,k-\frac12}}{h_y}\right\}+\sigma_2\,\{\}\hat{}+T^{w\,(\sigma_2)}_{m,k}-$$

$$-\frac{1}{\tau}\left(\hat\rho_{m,k}\frac12(\hat u^2_{m,k}+\hat v^2_{m,k})-\rho_{m,k}\frac12(u^2_{m,k}+v^2_{m,k})\right)+\mathrm{div}(\vec w\cdot\underset{\sim}{\mathcal{T}})^{(\sigma_2)}_{m,k}-$$

$$-\frac{1}{\tau}Q(\hat\rho_{m,k}\hat Y_{m,k}-\rho_{m,k}Y_{m,k})+$$

$$+Q\left\{\frac{(\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial Y/\partial x)_{m+\frac12,k}-(\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial Y/\partial x)_{m-\frac12,k}}{h_x}+\right.$$

$$\left.+\frac{(\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial Y/\partial y)_{m,k+\frac12}-(\eta/\mathrm{Sc}\cdot\partial Y/\partial y)_{m,k-\frac12}}{h_y}\right\}^{(\sigma_2)}, \tag{4.23}$$

$$\left(\gamma\frac{\eta}{\mathrm{Pr}}\frac{\partial}{\partial x}c_vT\right)_{m+\frac12,k}=\gamma\frac{\eta}{\mathrm{Pr}}\frac{c_vT_{m+1,k}-c_vT_{m,k}}{h_x}, \tag{4.24}$$

$$\left(\gamma\frac{\eta}{\mathrm{Pr}}\frac{\partial}{\partial y}c_vT\right)_{m,k+\frac12}=\gamma\frac{\eta}{\mathrm{Pr}}\frac{c_vT_{m,k+1}-c_vT_{m,k}}{h_y}. \tag{4.25}$$

5 Разностное свойство положительной определённости

Выведем разностный аналог условия (3.3). Вычтем из уравнения (4.23) уравнения (4.9), (4.12), (4.16), умноженные на $\tilde u = (\hat u + u)/2$, $\tilde v = (\hat v + v)/2$ и Q соответственно. Примем веса σ_1, σ_2 и σ_3 равными 0.5. Получим условие на пространственный оператор в полуцелом слое по времени:

$$\mathrm{div}(\vec w\cdot\underset{\sim}{\mathcal{T}})_{m,k}-\vec w_{m,k}\cdot\mathrm{div}_h\,\underset{\sim}{\mathcal{T}}\geqslant 0. \tag{5.1}$$

Несмотря на неявность разностной схемы, условие (5.1) является локальным для каждого узла сетки. Выполнение этого условия можно обеспечить за счёт выбора аппроксимации члена $\mathrm{div}(\vec w\cdot\underset{\sim}{\mathcal{T}})_{m,k}$ в уравнении (4.23).

Проблема выполнения условия (5.1) возникает в задачах размерности 2 и более: в одномерном случае, как легко увидеть, стандартной аппроксимации оказывается достаточно.

Для консервативной схемы аппроксимация $\operatorname{div}(\vec{w}\cdot\underset{\sim}{\tau})_{m,k}$ должна быть представлена в виде

$$\operatorname{div}(\vec{w}\cdot\underset{\sim}{\tau})_{m,k}=\frac{A_{m+\frac{1}{2},k}-A_{m-\frac{1}{2},k}}{h_x}+\frac{B_{m,k+\frac{1}{2}}-B_{m,k-\frac{1}{2}}}{h_y}. \tag{5.2}$$

Аппроксимация $\operatorname{div}(\vec{w}\cdot\underset{\sim}{\tau})_{m,k}$ потоками вида

$$A_{m+\frac{1}{2},k}=(u\tau^{xx}+v\tau^{yx})_{m+\frac{1}{2},k}=\frac{u_{m,k}+u_{m+1,k}}{2}\tau^{xx}_{m+\frac{1}{2},k}+\frac{v_{m,k}+v_{m+1,k}}{2}\tau^{yx}_{m+\frac{1}{2},k} \tag{5.3}$$

и

$$B_{m,k+\frac{1}{2}}=(u\tau^{xy}+v\tau^{yy})_{m,k+\frac{1}{2}}=\frac{u_{m,k}+u_{m,k+1}}{2}\tau^{xy}_{m,k+\frac{1}{2}}+\frac{v_{m,k}+v_{m,k+1}}{2}\tau^{yy}_{m,k+\frac{1}{2}} \tag{5.4}$$

не приводит к выполнению (5.1). Рассмотрим следующий вариант:

$$A_{m+\frac{1}{2},k}=\left(\left(\xi+\frac{4}{3}\eta\right)u\frac{\partial u}{\partial x}+\left(\xi-\frac{2}{3}\eta\right)u\frac{\partial v}{\partial y}+\eta v\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\right)_{m+\frac{1}{2},k}=$$

$$=\left(\xi+\frac{4}{3}\eta\right)\frac{u_{m+1,k}+u_{m,k}}{2}\frac{u_{m+1,k}-u_{m,k}}{h_x}+$$

$$+\left(\xi-\frac{2}{3}\eta\right)\frac{1}{2}\left(u_{m,k}\frac{v_{m+1,k+1}-v_{m+1,k-1}}{2h_y}+u_{m+1,k}\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k-1}}{2h_y}\right)+$$

$$+\eta\frac{1}{2}\left(v_{m,k}\frac{u_{m+1,k+1}-u_{m+1,k-1}}{2h_y}+v_{m+1,k}\frac{u_{m,k+1}-u_{m,k-1}}{2h_y}\right)+$$

$$+\eta\frac{v_{m+1,k}+v_{m,k}}{2}\frac{v_{m+1,k}-v_{m,k}}{h_x}, \tag{5.5}$$

$$B_{m,k+\frac{1}{2}}=\left(\left(\xi+\frac{4}{3}\eta\right)v\frac{\partial v}{\partial y}+\left(\xi-\frac{2}{3}\eta\right)v\frac{\partial u}{\partial x}+\eta u\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\right)_{m,k+\frac{1}{2}}=$$

$$=\left(\xi+\frac{4}{3}\eta\right)\frac{v_{m,k+1}+v_{m,k}}{2}\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k}}{h_y}+$$

$$+\left(\xi-\frac{2}{3}\eta\right)\frac{1}{2}\left(v_{m,k}\frac{u_{m+1,k+1}-u_{m-1,k+1}}{2h_x}+v_{m,k+1}\frac{u_{m+1,k}-u_{m-1,k}}{2h_x}\right)+$$

$$+\eta\frac{u_{m,k+1}+u_{m,k}}{2}\frac{u_{m,k+1}-u_{m,k}}{h_y}+$$

$$+\eta\frac{1}{2}\left(u_{m,k}\frac{v_{m+1,k+1}-v_{m-1,k+1}}{2h_x}+u_{m,k+1}\frac{v_{m+1,k}-v_{m-1,k}}{2h_x}\right). \tag{5.6}$$

Как легко видеть, основной момент в предложенной аппроксимации — это особая аппроксимация «сложных» производных вида $u\,\partial v/\partial y$, которая записывается в точке $(m+\frac{1}{2},k)$ как $\frac{1}{2}(u_{m,k}\,\partial v/\partial y_{m+1,k}+u_{m+1,k}\,\partial v/\partial y_{m,k})$. Следует специально отметить, что сам член $\operatorname{div}(\vec{w}\cdot\underset{\sim}{\tau})^{(\sigma_2)}_{m,k}$ должен вычисляться как оператор от величин $u^{(\sigma_2)}$, $v^{(\sigma_2)}$.

Можно также для обеспечения выполнения условия (5.1) исходить непосредственно из аппроксимации конечного выражения $A_{\boldsymbol{v}}$, однако в этом случае представляется затруднительным записать исходную аппроксимацию $\operatorname{div}(\vec{w}\cdot\underset{\sim}{\tau})$ в виде (5.2).

6 Граничные условия

Поскольку неизвестные задаются в узлах сетки, проблему составляют только граничные условия второго рода.

Для аппроксимации граничных условий вида $\partial u/\partial x=0$ остановимся на аппроксимации по двум значениям u_0 и u_1 с первым порядком. Это приводит к разностному уравнению $u_1-u_0=0$ (на левой границе). Саму аппроксимацию производной естественно брать с того же слоя, что и в неграничных точках, т. е. с соответствующим весом σ. Таким образом, для граничного условия $\partial T/\partial x=0$ при $m=0$ имеем

$$\frac{\tau\sigma_2}{\hat\rho_{0,k}}\cdot\gamma\frac{\eta}{\mathrm{Pr}}\frac{1}{h_x^2}\cdot c_v\hat T^{(\sigma_2)}_{0,k}-\frac{\tau\sigma_2}{\hat\rho_{0,k}}\cdot\gamma\frac{\eta}{\mathrm{Pr}}\frac{1}{h_x^2}\cdot c_v\hat T^{(\sigma_2)}_{1,k}=0. \tag{6.1}$$

При σ_2 или σ_3, равных 0, для граничных значений T или Y получается строка нулей и граничное условие необходимо удовлетворить явно. В угловой точке, например, $(0,0)$, при выбранном способе аппроксимации граничных условий естественно положить $\hat T^{(\sigma_2)}_{0,0}=\hat T^{(\sigma_2)}_{1,1}$. Тогда $\hat T^{(\sigma_2)}_{0,0}=\hat T^{(\sigma_2)}_{1,0}=\hat T^{(\sigma_2)}_{0,1}$.

Отметим, что сам выбор и реализация граничных условий не связаны с выполнением рассматриваемого свойства.

7 Результаты расчётов

7.1 Проверка сходимости

Для проверки сходимости и положительности по температуре построенной разностной схемы (4.2), (4.9), (4.12), (4.16), (4.23) на основе аппроксимаций (5.5), (5.6) с весами $\sigma_1=\sigma_2=\sigma_3=0.5$ рассмотрим следующий тест. В качестве параметров среды возьмём обезразмеренные значения характерных величин, приведённых в [2]. Обезразмеривание производится, согласно [2], на основе характерных масштабов по длине, скорости, плотности и температуре L_n, U_n, ρ_n, T_n.

Значения параметров: $T_n = 300\,K$, $R = 8.31434\,\textit{Дж}\cdot(\textit{моль}\cdot K)^{-1}$ — универсальная газовая постоянная, $M = 2.9\cdot 10^{-3}\,\textit{кг}\cdot\textit{моль}^{-1}$ — молярная масса смеси, $U_n = \sqrt{R/M\cdot T_n} = 927.418\,\textit{м}\cdot\textit{сек}^{-1}$, $\gamma = 1.4$, $\xi = 0\,\textit{кг}\cdot(\textit{м}\cdot\textit{сек})^{-1}$, $\eta = 0.0018192\,\textit{кг}\cdot(\textit{м}\cdot\textit{сек})^{-1}$, $\mathrm{Pr} = 1$, $\rho_n = 0.116265\,\textit{кг}\cdot\textit{м}^{-3}$, $L_n = 0.001426\,\textit{м}$; $\mathrm{Sc} = 1$, $Q = 12041457.9310345\,\textit{м}^2\cdot\textit{сек}^{-2}$. По формулам обезразмеривания $\bar{\xi} = \xi/\rho_n U_n L_n = 0$, $\bar{\eta} = \eta/\rho_n U_n L_n = 0.0118314$, $\bar{Q} = Q/U_n^2 = 14$. Значения $\bar{c}_v$, $\bar{c}_p$ вычисляются из формул $c_v = (R/M)/(\gamma-1)$, $c_p = c_v\cdot\gamma$, $\bar{c}_v = c_v/(R/M) = 2.5$, $\bar{c}_p = c_p/(R/M) = 3.5$.

Для проверки, в частности, правильности программы параметры $\bar{\xi}$, Pr и Sc были произвольно заменены: $\bar{\xi} = 0.21$, $\mathrm{Pr} = 1.11$, $\mathrm{Sc} = 1.22$.

Для теста на сходимость возьмём произвольные обезразмеренные функции ρ, u, v, T, Y, удовлетворяющие граничным условиям,

$$\rho = 1.2, \tag{7.1}$$

$$u = \sin(x)\sin(y)\exp(-t/3), \tag{7.2}$$

$$v = \sin(x)\sin(y)\exp(-t/4), \tag{7.3}$$

$$T = (\cos(x)\cos(y)+2)\exp(-t), \tag{7.4}$$

$$Y = (\cos(x)+2)\exp(-2t), \tag{7.5}$$

и соответствующие им источники.

Параметры области: $L_x = L_y = \pi$, счёт до $t_{\max} = 0.2$ с сеткой $M = 100$, $K = 130$, $N = 50$ и $M = 200$, $K = 260$, $N = 100$, где $N = t_{\max}/\tau$ — число шагов по времени.

Свойство симметричности и положительной определённости получаемых матриц позволяет использовать метод сопряжённых градиентов для их обращения. Расчёты показали, что требование уменьшения невязки в 10^5 раз недостаточно, чтобы приемлемо удовлетворить граничному условию на поток, например $\partial Y/\partial n(y{=}0, y{=}1) = 0$. Для обращения матрицы брался критерий уменьшения невязки в 10^{15} раз по сравнению с начальным приближением, которое берётся с предыдущего слоя. Число итераций в тесте $100\times130\times50$ по u и v, Y, T составило соответственно 8, 9, 15, в тесте $200\times260\times100$ — 10, 10, 16.

В таблице 7.1 выписаны значения ошибок на конечный момент времени в норме пространства C по всем узлам и всем узлам за исключением приграничных, в данном случае находящихся не ближе чем на расстоянии $\Delta = 0.15$ от границы.

По результатам расчётов имеем сходимость со вторым порядком для ρu, ρv, ρY — $O(h^2+\tau^2)$, и первым для w. Если отступить от границы на расстояние 0.15, т. е. около 5% длины стороны, то для w также будет наблюдаться сходимость со вторым порядком.

	$\Delta = 0.0$		$\Delta = 0.15$	
	100×130×50	200×260×100	100×130×50	200×260×100
ρ	0.0	0.0	0.0	0.0
ρu	9.59683e-06	2.4029e-06	9.58992e-06	2.40235e-06
ρv	9.41097e-06	2.3576e-06	9.41097e-06	2.35563e-06
w	8.26336e-04	3.48002e-04	10.121e-05	2.53048e-05
ρY	6.18226e-06	1.55571e-06	6.17877e-06	1.54332e-06

Таблица 7.1: Скорость сходимости

7.2 Проверка положительной определённости

Для проверки положительной определённости возьмём те же начальные функции (7.1)–(7.5), но без источников, причём дополнительно рассмотрим случайную поправку для скоростей u и v:

$$u = \mathrm{rnd}()\sin(x)\sin(y)\exp(-t/3), \tag{7.2$'$}$$

$$v = \mathrm{rnd}()\sin(x)\sin(y)\exp(-t/4), \tag{7.3$'$}$$

где функция rnd() — случайная величина, равномерно распределённая на отрезке $[0, 1]$.

Рассмотрим разностные схемы на основе аппроксимаций (5.5), (5.6) и (5.3), (5.4), полуявные с весами $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = 0.5$ и явные с весами $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = 0$. Число шагов по времени N в явной схеме было увеличено до 500, так чтобы удовлетворить условию устойчивости

$$\tau \leqslant \frac{\min^2(h_x, h_y)\min\rho_{m,k}}{4\max(\max(2\xi + \frac{2}{3}\eta, 2\eta), \eta/\mathrm{Sc}, \eta\gamma/\mathrm{Pr})}. \tag{7.6}$$

Все остальные параметры расчёта те же.

Отметим, что для переменной w в данной задаче порядок сходимости явной схемы меньше чем $O(h^2 + \tau)$.

В случае явной схемы условие (5.1) следует переписать в общем виде. Вычтем из уравнения (4.23) уравнение (4.16), умноженное на Q. Получим разностное уравнение теплопроводности с источником диссипации d, так что должно быть

$$d = -\frac{1}{\tau}\left(\hat{\rho}_{m,k}\frac{1}{2}(\hat{u}^2_{m,k} + \hat{v}^2_{m,k}) - \rho_{m,k}\frac{1}{2}(u^2_{m,k} + v^2_{m,k})\right) + \mathrm{div}(\vec{w}\cdot\mathcal{T})^{(\sigma_2)}_{m,k} \geqslant 0. \tag{7.7}$$

Условие (5.1) есть частный случай (7.7) при весах σ_1, σ_2 и σ_3, равных 0.5.

В таблице 7.2 выписаны минимальные по всем узлам значения d, посчитанные по предложенным тестам. На гладких решениях величина d мала и везде порядка 10^{-5}. В явной схеме критерий (7.7) выполняется лишь с аппроксимациями (5.5), (5.6). В полуявной схеме (7.7) с аппроксимациями (5.3), (5.4) не выполняется. В тестах со случайно заданным распределением скоростей (7.2′), (7.3′) условие (7.7) не выполняется, значения d отрицательны и порядка 10^{-1}. Учитывая, что расчёт проводился до времени $t_{\max} = 0.2$, можно заключить, что на решениях, сильно меняющихся во времени и пространстве, «дисбалансные» члены могут быть велики и сравнимы по величине с полной энергией системы. Как и следовало ожидать, в главном тесте — расчётах по полунеявной схеме с аппроксимациями (5.5), (5.6) — условие (7.7) выполняется.

	$\sigma = 0.5$		$\sigma = 0$	
	(5.5), (5.6)	(5.3), (5.4)	(5.5), (5.6)	(5.3), (5.4)
(7.1)–(7.5)	8.35269e-06	-1.59312e-05	8.15233e-06	-1.75893e-05
(7.1)–(7.5), rnd	2.68202e-06	-0.10258	-0.10542	-0.764097

Таблица 7.2: Минимальные значения источника диссипации

8 Доказательство

Докажем выполнение условия (5.1) для аппроксимаций (5.5), (5.6). Левая часть (5.1) есть аппроксимация положительно определённой квадратичной формы $A_{\boldsymbol{v}}$, которая в двумерном случае равна $[\xi(\operatorname{div}\vec{w})^2] + [-\frac{2}{3}\eta \times$ $\times (\operatorname{div}\vec{w})^2 + 2\eta((\partial u/\partial x)^2 + (\partial v/\partial y)^2)] + [\eta(\partial v/\partial x + \partial u/\partial y)^2] \equiv A^{\xi}_{\boldsymbol{v}} + A^{\eta}_{\boldsymbol{v}}$. Доказывать можно независимо — для ξ и η. Сначала докажем для η, т. е. положим $\xi = 0$. По формулам (4.10), (4.11), (4.13), (4.14) $\vec{w} \cdot \operatorname{div} \underset{\sim}{\tau}(\vec{w})_{m,k}$ равно

$$u_{m,k}\left(\underline{\frac{4\eta}{3}\frac{u_{m+1,k} - 2u_{m,k} + u_{m-1,k}}{h_x^2}} + \underline{\underline{\eta\frac{u_{m,k+1} - 2u_{m,k} + u_{m,k-1}}{h_y^2}}} + \right.$$
$$\left. + \ \frac{\eta}{3}\frac{v_{m+1,k+1} + v_{m-1,k-1} - v_{m+1,k-1} - v_{m-1,k+1}}{4h_x h_y}\right) +$$
$$+ v_{m,k}\left(\underline{\eta\frac{v_{m+1,k} - 2v_{m,k} + v_{m-1,k}}{h_x^2}} + \ \underline{\frac{4\eta}{3}\frac{v_{m,k+1} - 2v_{m,k} + v_{m,k-1}}{h_y^2}} + \right.$$
$$\left. + \frac{\eta}{3}\frac{u_{m+1,k+1} + u_{m-1,k-1} - u_{m+1,k-1} - u_{m-1,k+1}}{4h_x h_y}\right). \qquad (8.1)$$

Из (5.5), (5.6) $\operatorname{div}(\vec{w} \cdot \underset{\sim}{\tau}(\vec{w}))$ равно

$$\left[\underline{\frac{4\eta}{3}\left(\frac{u_{m+1,k} + u_{m,k}}{2}\frac{u_{m+1,k} - u_{m,k}}{h_x^2} - \frac{u_{m,k} + u_{m-1,k}}{2}\frac{u_{m,k} - u_{m-1,k}}{h_x^2}\right) -}\right.$$

$$
\begin{aligned}
&-\frac{2\eta}{3}\frac{1}{2}\left(u_{m,k}\frac{v_{m+1,k+1}-v_{m+1,k-1}}{2h_xh_y}+u_{m+1,k}\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k-1}}{2h_xh_y}-\right.\\
&\left.-u_{m,k}\frac{v_{m-1,k+1}-v_{m-1,k-1}}{2h_xh_y}-u_{m-1,k}\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k-1}}{2h_xh_y}\right)+\\
&+\eta\frac{1}{2}\left(v_{m,k}\frac{u_{m+1,k+1}-u_{m+1,k-1}}{2h_xh_y}+\boxed{v_{m+1,k}\frac{u_{m,k+1}-u_{m,k-1}}{2h_xh_y}}-\right.\\
&\left.-v_{m,k}\frac{u_{m-1,k+1}-u_{m-1,k-1}}{2h_xh_y}-\boxed{v_{m-1,k}\frac{u_{m,k+1}-u_{m,k-1}}{2h_xh_y}}\right)+\\
&+\eta\left(\frac{v_{m+1,k}+v_{m,k}}{2}\frac{v_{m+1,k}-v_{m,k}}{h_x^2}-\frac{v_{m,k}+v_{m-1,k}}{2}\frac{v_{m,k}-v_{m-1,k}}{h_x^2}\right)\Bigg]+\\
&+\Bigg[\eta\left(\frac{u_{m,k+1}+u_{m,k}}{2}\frac{u_{m,k+1}-u_{m,k}}{h_y^2}-\frac{u_{m,k}+u_{m,k-1}}{2}\frac{u_{m,k}-u_{m,k-1}}{h_y^2}\right)+\\
&+\eta\frac{1}{2}\left(u_{m,k}\frac{v_{m+1,k+1}-v_{m-1,k+1}}{2h_xh_y}+\boxed{u_{m,k+1}\frac{v_{m+1,k}-v_{m-1,k}}{2h_xh_y}}-\right.\\
&\left.-u_{m,k}\frac{v_{m+1,k-1}-v_{m-1,k-1}}{2h_xh_y}-\boxed{u_{m,k-1}\frac{v_{m+1,k}-v_{m-1,k}}{2h_xh_y}}\right)-\\
&-\frac{2\eta}{3}\frac{1}{2}\left(v_{m,k}\frac{u_{m+1,k+1}-u_{m-1,k+1}}{2h_xh_y}+v_{m,k+1}\frac{u_{m+1,k}-u_{m-1,k}}{2h_xh_y}-\right.\\
&\left.-v_{m,k}\frac{u_{m+1,k-1}-u_{m-1,k-1}}{2h_xh_y}-v_{m,k-1}\frac{u_{m+1,k}-u_{m-1,k}}{2h_xh_y}\right)+\\
&+\frac{4\eta}{3}\left(\frac{v_{m,k+1}+v_{m,k}}{2}\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k}}{h_y^2}-\frac{v_{m,k}+v_{m,k-1}}{2}\frac{v_{m,k}-v_{m,k-1}}{h_y^2}\right)\Bigg]. \qquad (8.2)
\end{aligned}
$$

Рассмотрим разность уравнений (8.2) и (8.1). Слагаемые без обозначений сокращаются. Остальные члены сворачиваются так, что $A_{\boldsymbol{v}}^{\eta}$ равно

$$
\begin{aligned}
&\frac{4\eta}{3}\frac{1}{2}\left(\left(\frac{u_{m+1,k}-u_{m,k}}{h_x}\right)^2+\left(\frac{u_{m,k}-u_{m-1,k}}{h_x}\right)^2\right)-\\
&-\frac{2\eta}{3}2\frac{u_{m+1,k}-u_{m-1,k}}{2h_x}\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k-1}}{2h_y}+\\
&+\frac{4\eta}{3}\frac{1}{2}\left(\left(\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k}}{h_y}\right)^2+\left(\frac{v_{m,k}-v_{m,k-1}}{h_y}\right)^2\right)+\\
&+\eta\frac{1}{2}\left(\left(\frac{u_{m,k+1}-u_{m,k}}{h_y}\right)^2+\left(\frac{u_{m,k}-u_{m,k-1}}{h_y}\right)^2\right)+
\end{aligned}
$$

$$+\boxed{\eta 2\frac{u_{m,k+1}-u_{m,k-1}}{2h_y}\frac{v_{m+1,k}-v_{m-1,k}}{2h_x}}+$$

$$+\underset{\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim}{\eta\frac{1}{2}\left(\left(\frac{v_{m+1,k}-v_{m,k}}{h_x}\right)^2+\left(\frac{v_{m,k}-v_{m-1,k}}{h_x}\right)^2\right)}. \tag{8.3}$$

Нетрудно видеть, что первые три слагаемых в этой сумме соответствуют выражению $-\frac{2}{3}\eta(\operatorname{div}\vec{w})^2+2\eta((\partial u/\partial x)^2+(\partial v/\partial y)^2)$, а остальные три — слагаемому $\eta(\partial v/\partial x+\partial u/\partial y)^2$. Их неотрицательная определённость доказывается независимо. Пусть $a=(u_{m+1,k}-u_{m,k})/h_x$, $b=(u_{m,k}-u_{m-1,k})/h_x$, $c=(v_{m,k+1}-v_{m,k})/h_y$, $d=(v_{m,k}-v_{m,k-1})/h_y$. Тогда имеем

$$\frac{4\eta}{3}\frac{a^2+b^2+c^2+d^2-2(a+b)/2\cdot(c+d)/2}{2}=$$

$$=\frac{4\eta}{3}\frac{a^2+c^2+a^2+d^2+b^2+c^2+b^2+d^2-ac-bc-ad-bc}{4}>0, \tag{8.4}$$

поскольку $\alpha^2+\beta^2-\alpha\beta=(\alpha-\beta/2)^2+3\beta^2/4$. Пусть $a=(u_{m,k+1}-u_{m,k})/h_y$, $b=(u_{m,k}-u_{m,k-1})/h_y$, $c=(v_{m+1,k}-v_{m,k})/h_x$, $d=(v_{m,k}-v_{m-1,k})/h_x$. Тогда

$$\eta\frac{a^2+b^2+c^2+d^2+4(a+b)/2\cdot(c+d)/2}{2}=$$

$$=\eta\frac{a^2+c^2+a^2+d^2+b^2+c^2+b^2+d^2+2ac+2bc+2ad+2bc}{4}\geqslant 0. \tag{8.5}$$

Докажем, что $A_{\boldsymbol{v}}^{\xi}\geqslant 0$.

$$\vec{w}\cdot\operatorname{div}\underset{\sim}{\tau}(\vec{w})_{m,k}=u_{m,k}\left(\underline{\xi\frac{u_{m+1,k}-2u_{m,k}+u_{m-1,k}}{h_x^2}}+\right.$$

$$\left.+\xi\frac{v_{m+1,k+1}+v_{m-1,k-1}-v_{m+1,k-1}-v_{m-1,k+1}}{4h_xh_y}\right)+$$

$$+v_{m,k}\left(\underline{\xi\frac{v_{m,k+1}-2v_{m,k}+v_{m,k-1}}{h_y^2}}+\right.$$

$$\left.+\xi\frac{u_{m+1,k+1}+u_{m-1,k-1}-u_{m+1,k-1}-u_{m-1,k+1}}{4h_xh_y}\right); \tag{8.6}$$

$$\operatorname{div}(\vec{w}\cdot\underset{\sim}{\tau}(\vec{w}))=\left[\xi\left(\underline{\frac{u_{m+1,k}+u_{m,k}}{2}\frac{u_{m+1,k}-u_{m,k}}{h_x^2}}-\right.\right.$$

$$\left.\underline{-\frac{u_{m,k}+u_{m-1,k}}{2}\frac{u_{m,k}-u_{m-1,k}}{h_x^2}}\right)+\xi\frac{1}{2}\left(u_{m,k}\frac{v_{m+1,k+1}-v_{m+1,k-1}}{2h_xh_y}+\right.$$

$$
\begin{aligned}
&+ u_{m+1,k}\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k-1}}{2h_xh_y} - u_{m,k}\frac{v_{m-1,k+1}-v_{m-1,k-1}}{2h_xh_y} - \\
&- u_{m-1,k}\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k-1}}{2h_xh_y}\Bigg)\Bigg] + \Bigg[\xi\frac{1}{2}\Bigg(v_{m,k}\frac{u_{m+1,k+1}-u_{m-1,k+1}}{2h_xh_y} + \\
&+ v_{m,k+1}\frac{u_{m+1,k}-u_{m-1,k}}{2h_xh_y} - v_{m,k}\frac{u_{m+1,k-1}-u_{m-1,k-1}}{2h_xh_y} - \\
&- v_{m,k-1}\frac{u_{m+1,k}-u_{m-1,k}}{2h_xh_y}\Bigg) + \\
&+ \xi\left(\frac{v_{m,k+1}+v_{m,k}}{2}\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k}}{h_y^2} - \frac{v_{m,k}+v_{m,k-1}}{2}\frac{v_{m,k}-v_{m,k-1}}{h_y^2}\right)\Bigg]. \qquad (8.7)
\end{aligned}
$$

Рассмотрим разность (8.7) и (8.6). Нетрудно видеть, что, как и в случае с $A^{\eta}_{\boldsymbol{v}}$, неподчёркнутые слагаемые сократятся. В итоге получаем, что $A^{\xi}_{\boldsymbol{v}}$ равно

$$
\begin{aligned}
&\xi\frac{1}{2}\left(\left(\frac{u_{m+1,k}-u_{m,k}}{h_x}\right)^2 + \left(\frac{u_{m,k}-u_{m-1,k}}{h_x}\right)^2\right) + \\
&+ \xi 2\frac{u_{m+1,k}-u_{m-1,k}}{2h_x}\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k-1}}{2h_y} + \\
&+ \xi\frac{1}{2}\left(\left(\frac{v_{m,k+1}-v_{m,k}}{h_y}\right)^2 + \left(\frac{v_{m,k}-v_{m,k-1}}{h_y}\right)^2\right).
\end{aligned}
$$

Эта сумма соответствуют выражению $\xi(\operatorname{div}\vec{w})^2$. Её неотрицательная определённость доказывается аналогично описанному (формула (8.5)). Доказательство окончено.

9 Заключение

Реализация основного условия (3.3) выполнена в разностном случае за счёт специального выбора пространственного оператора $\operatorname{div}(\vec{w}\cdot\underset{\sim}{\tau})_{m,k}$, на который налагается условие (5.1) и на основе которого строится разностная схема в полуцелом слое по времени. Рассмотренная на примере 2D аппроксимация члена $\operatorname{div}(\vec{w}\cdot\underset{\sim}{\tau})_{m,k}$ не ограничивает общности и легко обобщается на случай 3D.

Алгоритм построения схемы для случая коэффициентов, отнесённых к ячейкам, абсолютно идентичен рассмотренному. Это же относится к неравномерным и нерегулярным сеткам. Однако следует отметить, что он опирается на уже построенную аппроксимацию члена $\operatorname{div}\underset{\sim}{\tau}$ в уравнении для скоростей. Если коэффициенты отнесены к узлам сетки, в частности, если они зависят от решения, то его аппроксимация интегро-интерполяционным методом представляет известную сложность: в скалярном случае (для неизвестных T, Y) возможно применение ИИМ, но в векторном (для $\vec{w}$) его использование остаётся под вопросом. Это связано с тем, что на разрыве с нормалью (n_x, n_y) должны быть целиком непрерывными выражения $\tau^{xx}n_x + \tau^{xy}n_y$ и $\tau^{yx}n_x + \tau^{yy}n_y$. В связи с этим для случая расположения коэффициентов в узлах данный алгоритм неприменим.

Отметим, что можно рассматривать случай постоянных коэффициентов, если имеется только одна смесь.

В общем случае, при применении другого способа аппроксимации по времени (например, при применении регуляризации [1, 7, 8]), требуется также изменить аппроксимацию члена

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\frac{1}{2}(u^2 + v^2) \tag{9.1}$$

и исследовать на положительность всё выражение, соответствующее скоростям в уравнении (4.23). При этом уже нельзя говорить, что источник диссипации имеет вид квадратичной формы. В случае рассмотренной разностной схемы (4.2), (4.9), (4.12), (4.16), (4.23) на решениях системы было выполнено условие (7.7).

Как показали расчёты, основное условие выполняются для построенной схемы на основе предложенных аппроксимаций (5.5), (5.6) и выбранных весов $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = 0.5$ и в общем случае не выполняется для других произвольных модификаций схемы. Также показано, что на решениях, сильно меняющихся во времени и пространстве, «дисбалансные» члены могут быть сравнимы по величине с полной энергией системы. Таким образом, при построении, в первую очередь — экономичных, разностных схем, в частности, на основе предложенных аппроксимаций, нужно учитывать условие положительности температуры (3.3) в разностной форме и явно показывать выполнение условия типа (7.7).

Авторы благодарят Б. Д. Плющенкова за предложенную тему для исследования и А. Х. Пергамент за полезные обсуждения данной работы.

Список литературы

[1] А. А. Самарский, Теория разностных схем, 1983. М.: Наука.

[2] М. Ю. Заславский, А. Х. Пергамент, Б. Д. Плющенков, Динамика и устойчивость одномерных задач горения, 2002. Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, N21.

[3] Л. К. Эванс, Уравнения с частными производными, 2003. Новосибирск: Тамара Рожковская.

[4] Д. Ю. Максимов, А. Х. Пергамент, Б. Д. Плющенков, О некоторых схемах расщепления в задачах газодинамики с теплопроводностью, 2005. Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, N70.

[5] M. A. Liberman, S. M. Golberg, V. V. Bychkov, L. E. Eriksson, 1998. Combin. Sci. Technol. 136, 221.

[6] V. V. Bychkov, M. A. Liberman, 2000. Phys. Rep. 4–5, 325.

[7] A. Kh. Pergament, S. B. Popov, Yu. B. Radvogin, M. Yu. Zaslavsky, The regularization IMPES algorithms of the reservoir simulation in inhomogeneous media, September 2002. Proc. 8th Euro. Conf. Math. Oil Recov., Freiberg, Germany, E21.

[8] M. Yu. Zaslavsky, Algorithms of solution of parabolic equations on curvilinear grids, 2003. KIAM Preprint N2.

[9] A. Kh. Pergament, S. B. Popov, M. F. Yambaev, V. D. Yepishin, The thermodynamically conditioned difference schemes for multi-phase flow, August–September 2004. Proc. 9th Euro. Conf. Math. Oil Recov., Cannes, France, P007.