

求解对流扩散方程的四种差分格式的比较*

何文平¹⁾ 封国林^{1)2)†} 董文杰³⁾ 李建平²⁾

¹⁾ (扬州大学物理科学与技术学院, 扬州 225009)

²⁾ (中国科学院大气物理研究所, 北京 100029)

³⁾ (国家气候中心, 北京 100081)

(2003 年 12 月 19 日收到; 2004 年 2 月 19 日收到修改稿)

利用对流扩散方程, 在边界和参数存在随机扰动的情况下, 考察四种差分格式的优劣, 为求解对流扩散方程提供一种可靠的差分格式, 并得到通过空间加密网格的方法可以控制边界、参数随机影响的结论.

关键词: 对流扩散方程, 差分格式, 随机扰动

PACC: 0340G, 9260X

1. 引 言

对流扩散方程是一类基本的运动方程, 它可描述质量、热量的输运以及反应扩散等众多物理现象, 许多物理问题的数学模型都可以归结为对流扩散方程(组). 对流扩散方程被广泛应用于流体力学、化学、生物、气象等领域, 如化学反应过程、液体在生物膜两边的渗透等问题都涉及到扩散过程, 因此, 为对流扩散方程寻找一种快速、稳定、实用的数值方法有着重要的理论和实际意义^[1,2]. 这方面的研究已取得了不少进展, 刘星等^[3]利用数值方法对采用均分网格的一维线性无源对流扩散方程在各种边界条件下的稳定性进行了分析, 通过计算得出结论, 认为格式的稳定性主要取决于计算区域下游侧的边界条件类型, 随后, 许多学者针对对流扩散方程的数值求解, 相继提出了简单和复杂的格点模型, 高精度直线法, 格子 Boltzmann 方法, 新型逼近格式的特征-修正差分格式以及经济差分格式^[4-10], 这些方法丰富和推动了对流扩散方程的数值计算, 在研究质量、热量的输运和反应扩散过程中得出了很好的结果. 近年来, Feng 等针对历史演变资料有用信息的利用, 提出了多往值的回溯时间积分格式^[11-13], 突破了传统求解常(偏)微分方程单一初值的理论框架. 陆君安等^[14]在自记忆动力学的基础上推导了对流扩散方程的单

参数自忆回溯时间积分格式, 并应用差分理论讨论了其稳定性.

数值方法是一种离散化方法, 常用于解决初值问题的微分方程(组), 利用这一方法可以在一系列离散化点 x_1, x_2, \dots, x_N 上求出未知函数 $u(x)$ 在各点的近似值 u_1, u_2, \dots, u_N , 自变量的离散值是事先确定的, x_j 称为节点, 通常取为等间距, 即 $x_j = jh, j = 1, 2, \dots, N$, 其中 N 为空间网格点总数, h 称为空间步长, 必要时可以改变它的大小, u_1, u_2, \dots, u_N 通常称为初值问题的一个数值解, 它们还与积分时间长度 t_n 有关, 因此可用 u_j^n 来表示未知函数 u 在离散点 (x_j, t_n) 的近似值. 差分法的核心是将微分方程化成差分方程, 采用不同的离散化途径会得到不同的差分格式, 对于同一微分方程而言, 采用不同的差分格式又会得到不同的差分方程, 从而得到不同的近似解. 利用差分法对某些偏微分方程(例如抛物型偏微分方程)进行数值求解时, 为了满足截断误差小于一定值的要求, 时间步长 τ 需要取得很小, 以致不能有效发挥隐式格式稳定性好的优点, 因此设法提高稳定时间步长是有意义的, 文献[15]讨论了两个不同步长的相应问题; 文献[16]提出了一种用 m 个 $(m-2)$ 变步长来提高稳定时间步长的方法; 文献[17]通过调节时间步长构造了一种新的格式——变步长显式完全平方守恒差分格式. 一般情况下, 偏微分方程很难得到理论解, 对数值计算格式精度的评

*国家自然科学基金(批准号:40325015, 40275031 和 40231006)和中国科学院创新项目(批准号:ZKXC2-SW-210)资助的课题.

† E-mail: feng-gl@sina.com

估常常通过对数值格式稳定性分析来间接进行,文献[18]指出 Burgers 方程在一定的初值边界条件下存在理论解,运用这种理论解检验数值格式的精度也不失为一种有效的方法.

在数值求解的过程中,常常由于边界的不确定性或边界处理的不妥当,可能会影响差分格式的稳定性,鉴于此,本文利用对流扩散方程研究在边界和参数存在随机扰动的影响,对四种差分格式的影响,旨在比较不同差分格式的性能,为数值求解对流扩散方程提供一种可靠的差分格式.

2. 数值计算

不失一般性,对流扩散方程写为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, x \in [0, 2], t > 0, \quad (1)$$

其中 a, c 为常数,且 $a > 0$. 对方程 (1) 给定初始条件: $u(x, 0) = \sin 2x, x \in [0, 2]$.

对于 (1) 式,分别应用中心显式格式、修正中心显式格式、指数型格式、迎风格式得到以下 4 个对应的差分方程:

$$\begin{aligned} & \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + c \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2h} \\ & = a \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h^2}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} & \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + c \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2h} \\ & = \left(a + \frac{c^2}{2} \right) \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h^2}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + c \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2h} \\ & = a \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h^2}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + c \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{h} \\ & = a \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h^2}, \end{aligned} \quad (5)$$

其中 σ 为拟合因子,且 $\sigma = \frac{ch}{2a} \cotg \left(\frac{ch}{2a} \right)$, $\Delta t, h$ 分别为时间步长和空间步长. 为满足 4 种差分格式的稳定性条件,在本测试中取参数 c 为 5.0.

在数值计算中,取时间和空间网格点等间隔. 本文在空间网格点数为 21 时,空间步长 $h = 0.1$,时间步长 $\Delta t = 0.01$;空间网格点数为 41 时,空间步长 $h =$

0.05,时间步长 $\Delta t = 0.0025$;空间网格点数为 81 时,空间步长 $h = 0.025$,时间步长 $\Delta t = 0.001$. 用以下五种指标来衡量四种差分格式的优劣.

- 1) $e_1 = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N |e_i| \right)$,
- 2) $e_2 = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N e_i^2 \right)^{0.5}$,
- 3) $e_3 = \max_{i=1, N} |e_i|$,
- 4) $d_1 = \min(x_i)$,
- 5) $d_2 = \max(x_i)$,

其中 $e_i = x_i - \bar{x}, \bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$,与前面不同,此处 x_i 为 $u(x)$ 在第 i 个格点某一时刻的近似解, N 为空间网格点的总数. 若某种格式计算得到的以上某个指标越小,表明该格式就该指标而言越好.

离散化后的初始条件为 $u(n) = 1.0 \times \sin(2 \times 3.1415926 \times x_n)$,其中, $x_n = (n - 1) \times h, n = 1, 2, \dots, N$. 下文将在固定边界、随机边界、随机参数三种不同情形下分别考察四种差分格式的稳定性.

2.1. 固定边界

设边界条件为 $u(1) = 0.0, u(N) = 0.0$;参数 a 取 0.2.

图 1 为四种差分格式的 e_2 和 e_3 在 N 分别取 21, 41, 81 时随积分时间的演化曲线. 其中 (a), (b), (c) 分别为 N 取 21, 41, 81 时 e_2 随积分时间的演化曲线, (d), (e), (f) 分别为 N 取 21, 41, 81 时 e_3 随积分时间的演化曲线.

在图 1(a) 中,在 $t = 1.0$ 以前,指数型差分格式的 e_2 曲线明显高于其他三种差分格式,并且其曲线一直保持下降的趋势,其值由 0.1517 减小到 0.00382. 在 $t = 1.0$ 到 $t = 2.0$ 的过程中,指数型差分格式的 e_2 曲线变化十分缓慢,几乎水平. 其他三种格式的 e_2 曲线的变化趋势类似于指数型格式. 在积分时间由 $t = 0.0$ 增加到 $t = 0.5$ 的过程中,迎风格式、修正中心显式格式、中心显式格式的 e_2 曲线均一直下降,在这一过程中,中心显式格式的 e_2 曲线处在另外两种格式的上方,迎风格式的 e_2 曲线位于最下方;在 $t = 0.5$ 到 $t = 2.0$ 过程中,迎风格式、修正中心显式格式、中心显式格式的 e_2 曲线重合,趋于水平,且在 $t = 1.0$ 到 $t = 2.0$ 的过程中,指数型格式的 e_2 曲线与这三种格式也逐渐重合. 由图 1(b) 和图 1(c) 可以看出,



随着空间网格点的加密,四种差分格式的计算结果的差别越来越小,其计算结果趋于一致所需要的时间变短.时间分别约为 1.25,0.45,0.45.由评价标准 1) 所得到的结果与评价标准 2) 类似,在此不再赘述.

由图 1(d)中可以看出,从积分开始到 $t = 1.0$ 的过程中,指数型差分格式的 e_3 曲线明显处于其他三种格式的 e_3 曲线之上.在 $t = 0.37$ 以前,指数型差分格式的 e_3 曲线一直保持上升趋势,其值由 1.02569 增大到 1.52512,而后到 $t = 1.0$ 的过程中,曲线迅速下降,其值急剧减小到 0.05289.在 $t = 1.0$ 到 $t = 2.0$ 的过程中,指数型差分格式的

e_3 曲线趋于水平,且渐渐与其他三种格式的 e_3 曲线重合.在积分时间由 $t = 0.0$ 增加到 $t = 0.5$ 的过程中,迎风格式、修正中心显式格式、中心显式格式的 e_2 曲线均一直下降,在此过程中,中心显式格式的 e_2 曲线一直处在迎风格式、修正中心显式格式的上方,而迎风格式的 e_2 曲线处在最下方;在 $t = 0.5$ 到 $t = 2.0$ 的过程中,这三种差分格式的曲线重合且趋于水平.从图 1(e)和图 1(f)可以发现,随着 N 的增大,在积分时间内,四种差分格式计算结果之间的差别越来越小,其趋于一致所需要的时间也变短,时间分别为 1.25,0.5,0.45.由评价标准 5) 所得到的结果与由评价标准 3)

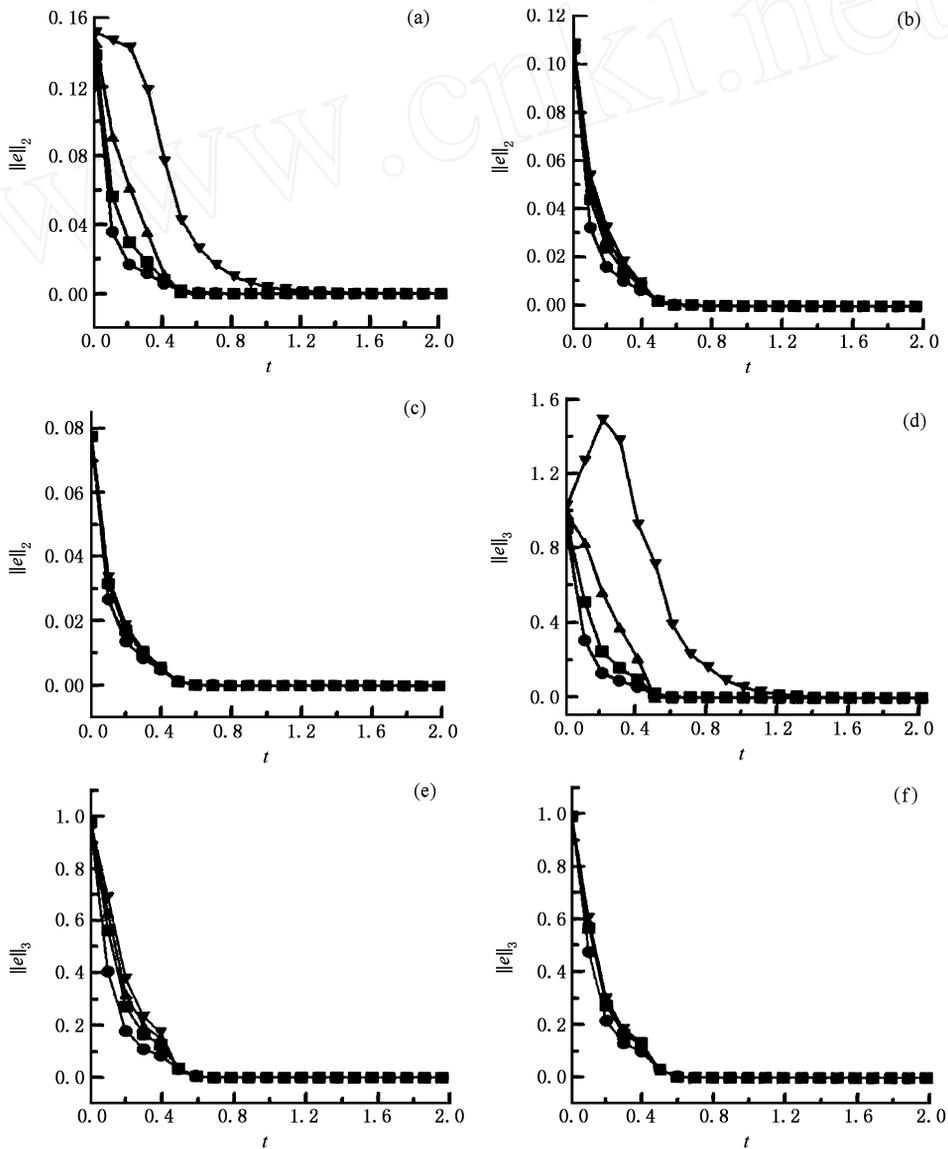


图 1 空间格点 N 分别取 21,41,81 时四种差分格式对应的 e_2 和 e_3 随时间的演化图(, , , , \blacktriangledown 分别为修正中心显式格式、迎风格式、中心显式格式、指数型格式)

得到的结果类似,这里不再详述.

图 2 为四种差分格式的 d_1 在 N 分别取 21, 41, 81 时随积分时间的演化曲线. 由图 2(a), 可以发现, 在积分时间由 $t = 0.0$ 增加到 $t = 1.20$ 的过程中, 指数型格式的 d_1 曲线一直处在其他三种格式 d_1 曲线的下方, 在此演化过程中, 指数型格式的 d_1 曲线时而下降, 时而上升, 但一直保持上升的趋势, 此后到 $t = 2.0$ 的过程中, 该曲线渐渐与其他三种差分格式的 d_1 曲线重合, 且趋于水平. 其他三种格式的 d_1 曲线中, 在 $t = 0.28$ 以前, 迎风格式的 d_1 曲线一直处在最上方, 其次是修正中心显式格式, 中心显式格式的 d_1 曲线处在二者下方, 在此过程中, 这三种格式的 d_1 曲线均随着积分时间的增加而上升; 此后到 $t = 2.0$ 的过程中, 修正中心显式格式、迎风格式、中心显式格式的 d_1 曲线趋于水平, 且渐渐重合. 在图 2(b) 中, 四种差分格式的 d_1 曲线随时间的变化类似, 其变化规律均是先急剧上升, 而后趋于水平, 其中迎风格式的 d_1 曲线在 $t = 0.28$ 以前稍微高于其他三种差分格式, 其次是修正中心显式格式, 指数型格式的 d_1 曲线处在其他三种格式的最下方, 而后在积分时间由 $t = 0.28$ 增加到 $t = 2.0$ 的过程中, 四种格式的曲线渐渐重合. 由图 2(c) 可以看出, 除迎风格式外其他三种差分格式的曲线在积分时间内几乎重合, 迎风格式的 d_1 曲线在积分刚开始的一小段时间内仍然稍稍高于其他三种差分格式, 而其他三种差分格式的 d_1 曲线在积分时间内, 几乎完全重合. 由图 2 不难发现, 指数型格式的计算结果趋于稳定所需要的时间随着空间网格点的加密而逐渐变短, 其时间分别约为 1.25, 0.28, 0.28.

由图 1 和图 2 可以看出, 随着空间网格点的加密, 四种格式计算结果趋于一致所需要的时间变短, 因此, 在实际运用差分格式进行数值计算时, 要充分考虑空间网格步长, 既要考虑差分格式的稳定性, 又要考虑到经济实用.

2.2. 随机边界

设边界条件为: $u(0) = r_1 / 10.0,$

$$u(N) = r_2 / 10.0.$$

参数 a 仍取为 0.2; r_1, r_2 分别为 0 到 1 之间的随机数.

为了充分考虑随机边界的影响, 图 3 给出了 N 分别取 21, 41, 81 时, 四种差分格式在随机边界条件

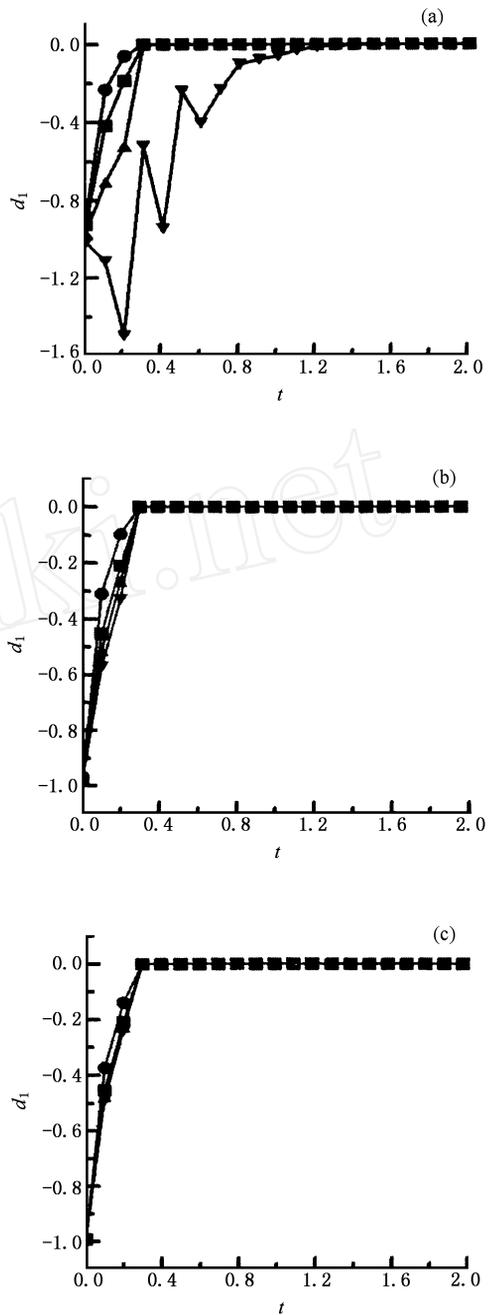


图 2 空间格点 N 分别取 21, 41, 81 时四种差分格式对应的 d_1 随时间的演化图($\circ, \triangle, \square, \blacklozenge$ 分别为修正中心显式格式、迎风格式、中心显式格式、指数型格式)

下得到的 e_2 与这四种差分格式在固定边界条件下得到相应的 e_2 值之差随时间的演化曲线, 以及这两种不同边界条件下相应的 e_3 值之差随时间的演化图形, 下文分别用 e_2, e_3 表示这两个差值. 其中图 3(a), (b), (c) 分别为 N 取 21, 41, 81 时, e_2 随积分时间的演化曲线, (d), (e), (f) 分别为 N 取 21, 41, 81 时, e_3 随积分时间的演化曲线.



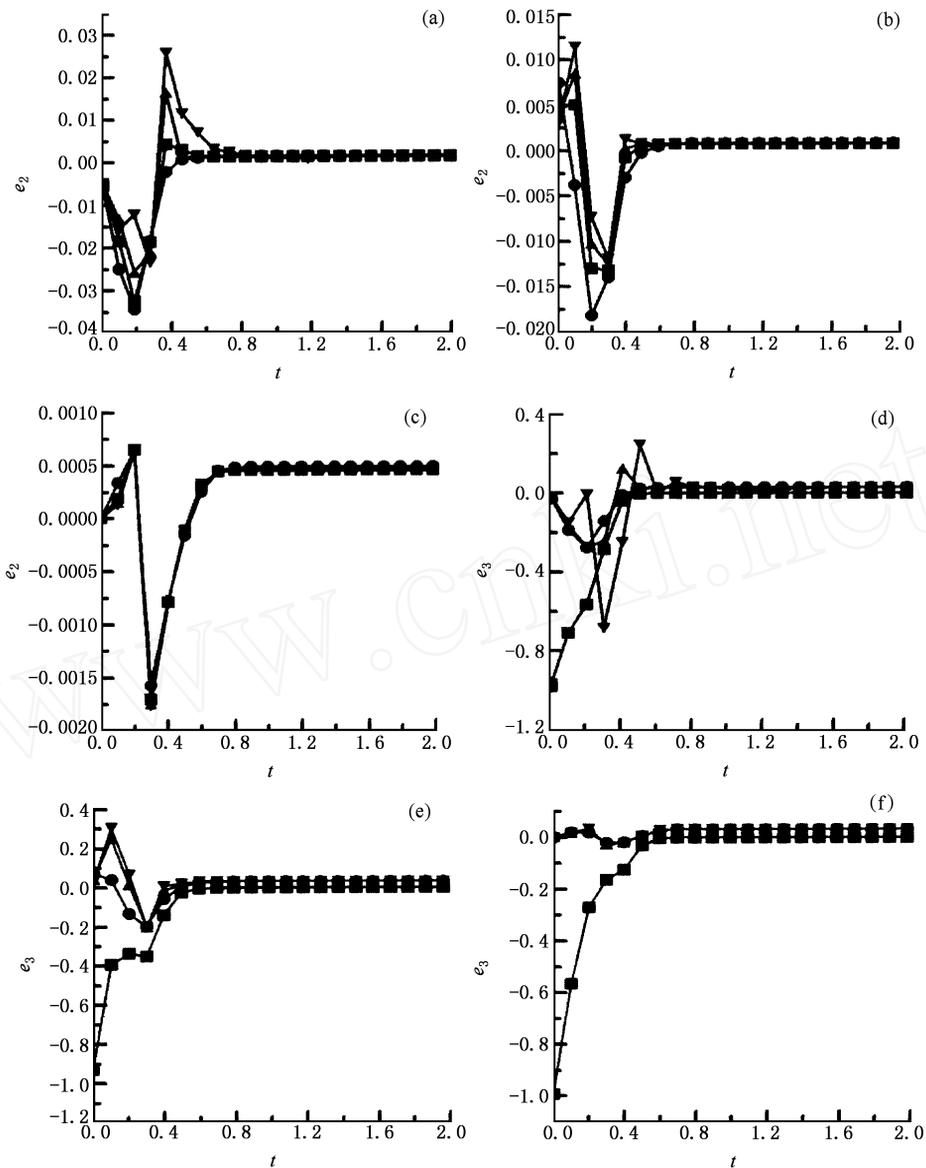


图3 N 分别取 21, 41, 81 时, 四种差分格式在随机边界条件下与固定边界条件下得到的 e_2, e_3 随时间的演化曲线(\circ , \square , \blacktriangledown 分别为修正中心显式格式、迎风格式、中心显式格式、指数型格式)

由图 3(a) 可以看出, 在积分开始的一段时间内, 边界扰动对指数型格式计算结果的影响最大, 其次是中心显式格式, 迎风格式与修正中心显式格式的计算结果受到的影响相对较小. 从图 3(b) 和 (c) 可以发现, 随着空间网格点的加密, 边界扰动对四种格式的计算结果的影响的差别逐渐缩小, 在空间网格点 N 取 81 时, 四种格式的扰动曲线几乎完全重合.

在图 3(d) 中, 可以看到, 边界扰动对修正中心显式格式计算结果的影响最大, 其次是指数型格式, 迎风格式与中心显式格式的计算结果受到的影响较小. 由图 3(e), (f) 可以发现, 随着空间网格点的加

密, 修正中心显式的计算结果受边界扰动的影响仍然最大, 且边界扰动对其的影响与空间网格点的疏密关联程度不大, 而其他三种格式的 e_3 曲线之间的差别逐渐减小, 且其结果受边界扰动的影响也越来越小.

限于篇幅四种差分格式由其他三种评价标准所得到的图已省略, 在这里只作一些简单的描述, 四种差分格式由评价标准 1) 所得到的曲线与 e_2 类似, 得到类似的结论; 由评价标准 4) 得到的曲线中, 在 N 取 21 时, 指数型格式的计算结果受到的影响最大, 其次是中心格式, 迎风格式的计算结果受边界扰动的影响最小, 但随着空间网格点的加密, 这种趋势

逐渐减弱,在 N 取 81 时,四种格式的计算结果所得到的曲线几乎重合.由评价标准 5)得到的结论类似于评价标准 4).

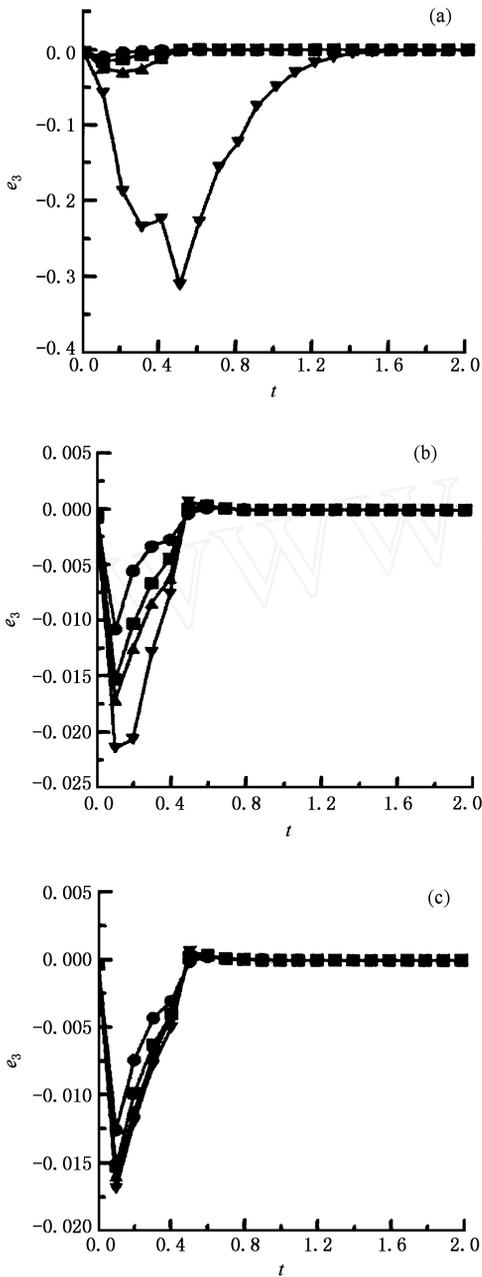


图4 N 分别取 21,41,81 时,四种差分格式在随机参数条件下与固定边界条件下得到的 e_3 随时间的演化曲线(, , , \blacktriangledown 分别为修正中心显式格式、迎风格式、中心显式格式、指数型格式)

可以看到对流扩散方程的数值解四种差分格式都能够很好地数值计算,但在气象领域大型计算模式中,指数格式对于小扰动所引起的变化较大,有可能造成模式的不稳定性,因此,在选择差分格式时,

指数格式慎用.

2.3. 随机参数

设边界为固定边界(即与 2.1 节的边界条件相同),参数 $a = 0.2 + r/5.0 - 0.1)/5.0$, r 为 0 到 1 之间的随机数.

图 4 为 N 分别取 21,41,81 时,四种差分格式在随机参数条件下与固定边界条件下得到的 e_3 值之差 e_3 随时间的演化曲线.由图 4 可以发现,在 $N = 21$ 时,指数型差分格式的计算结果受参数扰动的影响最大,其次是中心显式格式,迎风格式的计算结果受参数扰动的影响最小,随着空间网格点的加密,四种差分格式计算结果受参数扰动的曲线趋于一致所需要的时间变短,而且四种格式 e_3 曲线之间的差别也越来越小.由其他四种评价标准得到的结果 e_3 类似,在此不再赘述.

3. 结 论

1. 在边界条件和参数均固定的情况下,当 N 取 21 时,在评价标准 1),2),3),5) 这四个方面,迎风格式的效果最好,其次是修正中心显式格式,指数型格式的效果最差,但在评价标准 4) 方面情况正好相反,指数型格式的效果最好,迎风格式的效果反而变得最差.

2. 随着空间网格点的加密,四种格式计算结果趋于一致所需时间变短,且四种格式计算结果之间的差别随之减小.在实际运用差分格式进行数值计算时,要充分考虑空间网格步长,既要考虑差分格式的稳定性,又要考虑到经济实用.

3. 在 N 取 21 时,就评价标准 1),2),4),5) 而言,边界扰动对指数型差分格式计算结果的影响最大,其次是中心显式格式,随着空间网格点的加密,四种格式对扰动的影响差别越来越小.就评价标准 3) 而言,当 N 取 21 时,修正中心显式格式的计算结果受边界扰动的影响最大,其次是指数型格式,中心显式格式与迎风格式的计算结果受到的影响较小,差别不大.随着空间网格点的加密,修正中心显式格式的计算结果受扰动的影响仍然最大;其他三种格式受边界扰动的影响较小,且其计算结果受边界扰动的影响之间的差异越来越小.总体来看,边界扰动对迎风格式计算结果的影响最小.

4. 在参数扰动的情况下,当 N 取 21 时,指数型

格式的计算结果受到的影响最大,其次是中心显式格式,迎风格式受参数扰动的影响最小.随着空间网格点的加密,各种差分格式计算结果受参数扰动的影响之间的差异越来越小.

可见,四种差分格式都能很好地被应用于对流扩散方程的数值计算,但在气象领域大型计算模式

中,指数格式对于小扰动所引起的变化较大,有可能造成模式的不稳定性,因此,在选择差分方案时,指数格式慎用.另外,根据本文的研究发现,通过空间网格加密的方法,是数值模式中抑制边界、参数随机变化造成不良影响的一种可能途径.

- [1] Cao H X *et al* 2000 *J. Applied Meteorology* **11** 249 (in Chinese) [曹鸿兴等 2000 应用气象学报 **11** 249]
- [2] Liu S D *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **51** 718 (in Chinese) [刘式达等 2003 物理学报 **51** 718]
- [3] Liu X *et al* 2001 *Journal of Engineering Thermophysics* **22** 729 (in Chinese) [刘星等 2001 工程热物理报 **22** 729]
- [4] Zhou X F 1996 *Mathematica Numerica Sin.* **13** 310 (in Chinese) [邹秀芬 1996 计算物理 **13** 310]
- [5] Wu X H *et al* 1999 *Mathematica Numerica Sin.* **16** 211 (in Chinese) [吴雄华等 1999 计算物理 **16** 211]
- [6] Deng M Y *et al* 2000 *Mathematica Numerica Sin.* **17** 161 (in Chinese) [邓敏芝等 2000 计算物理 **17** 161]
- [7] Du N 2001 *Journal of Shandong University* **36** 140 (in Chinese) [杜宁 2001 山东大学学报 **36** 140]
- [8] Zhang X F *et al* 2001 *Engineering Journal of Wuhan Univer* **34** 6 (in Chinese) [张小峰等 2001 武汉大学学报 **34** 6]
- [9] Feng S D *et al* 2001 *Chin. Phys.* **12** 1106
- [10] Cheng A J *et al* 2002 *Mathematica Numerica Sin.* **22** 309 (in Chinese) [程爱杰等 2002 计算数学 **22** 309]
- [11] Feng GL *et al* 2001 *Chin. Phys.* **10** 1004
- [12] Feng GL *et al* 2003 *Chin. Phys.* **12** 1076
- [13] Feng GL *et al* 2004 *Chin. Phys.* **13** 413
- [14] Lu J A *et al* 2000 *Mathematica Numerica Sin.* **17** 664 (in Chinese) [陆君安等 2000 计算物理 **17** 664]
- [15] Li L K 1985 *Journal of Fudan Univer* **24** 1 (in Chinese) [李立康 1985 复旦学报 **24** 1]
- [16] Qin X Z *et al* 1996 *Journal of Dalian University of Technology* **36** 651 (in Chinese) [秦学志等 1996 大连理工大学学报 **36** 651]
- [17] Wang B *et al* 1995 *Acta Meteorologica Sin.* **53** 299 (in Chinese) [王斌等 1995 气象学报 **53** 299]
- [18] Tannehill J C *et al* 1997 *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*

Comparison with solution of convection-diffusion by several difference schemes *

He Wen-Ping¹⁾ Feng Guo-Lin¹⁾²⁾ Dong Wen-Jie³⁾ Li Jian-Ping²⁾

¹⁾ (Department of Physics, Yangzhou University, Yangzhou 225009, China)

²⁾ (Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)

³⁾ (National Climate Center, Beijing 100081, China)

(Received 19 December 2003; revised manuscript received 19 February 2004)

Abstract

By solving convection-diffusion equation, we have studied the influence of different difference schemes on the numerical solutions under the condition of stochastic disturbance of the border or parameter, which provides a reliable difference scheme for solving the convection-diffusion equation, and we have drawn a conclusion that the influence for the stochastic disturbance on the border or parameter could be controlled by increasing the number of the grid point in numerical calculation.

Keywords: convection-diffusion equation, difference scheme, stochastic disturbance

PACC: 0340G, 9260X

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 40325015, 40275031 and 40231006) and the Key Innovation Project of the Chinese Academy of Sciences (ZKCX2-SW-210).