УДК 517.9:519.6

**А.В. ГЛАДКИЙ**

# ОБ УСТОЙЧИВОСТИ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ РАСЩЕПЛЕНИЯ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ КОНВЕКТИВНОЙ ДИФФУЗИИ

**Аннотация.** Рассмотрена задача численного моделирования процессов распространения загрязнений в атмосфере на основе метода геометрического расщепления трехмерных нестационарных уравнений конвективной диффузии. Для решения полученных одномерных задач построены разностные схемы расщепления бегущего счета. Исследованы вопросы аппроксимации, монотонности и устойчивости предложенных разностных схем.

**Ключевые слова:** уравнение конвекции-диффузии, методы расщепления, численный метод, разностная схема, устойчивость.

## ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время математическое моделирование процессов загрязнения атмосферы — наиболее эффективный способ оценки и прогнозирования экологического состояния промышленных регионов [1–4].

Основой компьютерной технологии моделирования процессов переноса загрязнений в атмосфере являются математические модели, а также численные алгоритмы для решения нестационарных дифференциальных уравнений конвекции-диффузии. Вопросы построения и исследования математических моделей процессов рассеяния примесей в атмосфере изучены в [1–9]. Для многомерных нестационарных уравнений конвективной диффузии широко используются методы факторизации и расщепления [1, 2, 10–13], которые позволяют свести решение исходных задач к последовательному или параллельному решению уравнений с меньшей размерностью. При этом для каждого направления, определяемого принятой схемой расщепления, актуально построение численных алгоритмов на основе разностных схем бегущего счета. Отметим, что впервые подход к построению разностной схемы бегущего счета для решения одномерного уравнения теплопроводности предложен в [14].

В настоящей работе для численного решения трехмерного нестацонарного уравнения конвективной диффузии предлагается подход, использующий методику геометрического расщепления и решение полученных одномерных дифференциальных задач с помощью разностных схем бегущего счета. Рассматриваюся схемы бегущего счета с направленными разностями, с аппроксимацией конвективного члена центральной разностью, а также двухшаговые разностные схемы с явной организацией вычислений. Исследуются вопросы аппроксимации, устойчивости и монотонности предложенных разностных схем расщепления бегущего счета.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

При моделировании процессов миграции загрязнений в атмосфере рассмотрим вопросы построения и исследования схем расщепления по геометрическим координатам на примере трехмерного уравнения конвективной диффузии [1, 2]

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}+v\frac{\partial C}{\partial y}+w\frac{\partial C}{\partial z}-\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu_1\frac{\partial C}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu_2\frac{\partial C}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial z}\left(\mu_3\frac{\partial C}{\partial z}\right)+\sigma C=f \quad (1)$$

в области $G=\{0<x<l_1, 0<y<l_2, 0<z<l_3\}$ на временном интервале $0<t\le T$.

Уравнение (1) дополняется однородным граничным условием первого рода и начальным условием

$$C|_{(x,y,z)\in\Gamma}=0,$$

$$C|_{t=0}=C_0(x,y,z),\ (x,y,z)\in G, \quad (2)$$

где $C(x,y,z,t)$ — концентрация примеси; $\Gamma$ — граница области $G$; $(u,v,w)$ — компоненты вектора скорости движения воздушных масс $\mathbf{V}$; $\mu_\alpha=\mu_\alpha(x,y,z)$, $\alpha=1,2,3,$ — коэффициенты турбулентной диффузии; $\sigma$ — коэффициент трансформации примеси; $f(x,y,z)$ — функция распределения источников загрязнения.

Предполагается, что компоненты вектора скорости движения воздушного потока удовлетворяют уравнению неразрывности (условию несжимаемости среды)

$$\operatorname{div}\mathbf{V}=\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}+\frac{\partial w}{\partial z}=0.$$

## СХЕМА РАСЩЕПЛЕНИЯ

Для задач конвекции-диффузии с постоянными, возможно зависящими от времени, компонентами вектора скорости $\mathbf{V}$ схему расщепления на дифференциальном уровне можно получить, представляя уравнение переноса (1) в операторном виде

$$\frac{\partial C}{\partial t}+(A_1+A_2+A_3)C=f, \quad (3)$$

где

$$A_1C=u\frac{\partial C}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu_1\frac{\partial C}{\partial x}\right),\ A_2C=v\frac{\partial C}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu_2\frac{\partial C}{\partial y}\right),$$

$$A_3C=w\frac{\partial C}{\partial z}+\sigma C-\frac{\partial}{\partial z}\left(\mu_3\frac{\partial C}{\partial z}\right).$$

Пусть $E$ — единичный оператор. Тогда, предполагая, что для некоторого момента времени $t$ решение уравнения (3) известно, значение $C(x,y,z,\hat{t})$ для момента $\hat{t}=t+\tau$ можем представить с помощью ряда Тейлора в виде

$$C(x,y,z,\hat{t})=C(x,y,z,t)+\tau\frac{\partial C(x,y,z,t)}{\partial t}+O(\tau^2)=$$

$$=C(x,y,z,t)-\tau[A_1C(x,y,z,t)+A_2C(x,y,z,t)+A_3C(x,y,z,t)]+\tau f+O(\tau^2)=$$

$$=[E-\tau(A_1+A_2+A_3)]C(x,y,z,t)+\tau f+O(\tau^2). \quad (4)$$

Рассмотрим три вспомогательные задачи:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t}+A_1C_1=0,\ C_1(x,y,z,t)=C(x,y,z,t), \quad (5)$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} + A_2 C_2 = 0,\ C_2(x, y, z, t) = C_1(x, y, z, \hat{t}), \tag{6}$$

$$\frac{\partial C_3}{\partial t} + A_3 C_3 = f,\ C_3(x, y, z, t) = C_2(x, y, z, \hat{t}), \tag{7}$$

с соответствующими граничными условиями.

Легко видеть, что решения рассматриваемых задач (5)–(7) для момента времени $\hat{t}$ можно записать в виде

$$C_1(x, y, z, \hat{t}) = [E - \tau A_1] C_1(x, y, z, t) + O(\tau^2),$$

$$C_2(x, y, z, \hat{t}) = [E - \tau A_2] C_2(x, y, z, t) + O(\tau^2),$$

$$C_3(x, y, z, \hat{t}) = [E - \tau A_3] C_3(x, y, z, t) + \tau f + O(\tau^2).$$

Отсюда, учитывая, что

$$C_2(x, y, z, t) = C_1(x, y, z, \hat{t}),\ C_3(x, y, z, t) = C_2(x, y, z, \hat{t}),$$

для решения третьей вспомогательной задачи получаем

$$C_3(x, y, z, \hat{t}) = [E - \tau A_1 - \tau A_2 - \tau A_3] C(x, y, z, t) + \tau f + O(\tau^2). \tag{8}$$

Принимая $C(x, y, z, \hat{t}) = C_3(x, y, z, \hat{t})$ и сравнивая выражения (4) и (8), приходим к утверждению, что, решая последовательно задачи (5)–(7), получаем решение уравнения (1) для момента времени $\hat{t}$ с погрешностью $O(\tau^2)$.

## РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ БЕГУЩЕГО СЧЕТА

Для численного решения нестационарных задач (5)–(7) в области $\overline{G} = G \bigcup \Gamma$ введем пространственную равномерную разностную сетку с шагами $h_1$, $h_2$, $h_3$ соответственно по координатам $x$, $y$, $z$:

$$\overline{\omega}_h = \omega_h \cup \gamma_h = \{(x, y, z): x = x_i = ih_1,\ i = \overline{0, N_1};\ y = y_j = jh_2,\ j = \overline{0, N_2};$$

$$z = z_k = kh_3,\ k = \overline{0, N_3};\ h_\alpha = l_\alpha / N_\alpha,\ \alpha = 1, 2, 3\},$$

где $\omega_h$ и $\gamma_h$ — множества внутренних и граничных узлов соответственно. Множество внутренних узлов можно представить в виде $\omega_h = \omega_1 \times \omega_2 \times \omega_3$, где $\omega_1$, $\omega_2$, $\omega_3$ — одномерные равномерные сетки.

Определим конечномерное гильбертово пространство $H_h$ сеточных функций, заданных на сетке $\overline{\omega}_h$ и равных нулю на ее границе. Скалярное произведение в $H_h$ зададим соотношением

$$(\varphi, \psi) = \sum_{(x, y, z) \in \omega_h} \varphi(x, y, z) \psi(x, y, z) h_1 h_2 h_3,$$

тогда норма $||\varphi|| = \sqrt{(\varphi, \varphi)}$. Для самосопряженного и положительного разностного оператора $D$ можно определить энергетическое пространство $H_D$ со скалярным произведением $(\varphi, \psi)_D = (D\varphi, \psi)$ и нормой $||\varphi||_D = \sqrt{(D\varphi, \varphi)}$.

Определим также для сеточных функций, заданных на сетке $\overline{\omega}_h$ и равных нулю на ее границе, скалярные произведения по формулам:

$$(\varphi, \psi)_{\omega_1} = \sum_{x \in \omega_1} \varphi(x, y, z) \psi(x, y, z) h_1, \ (y, z) \in \omega_2 \times \omega_3,$$

$$(\varphi, \psi)_{\omega_2} = \sum_{y \in \omega_2} \varphi(x, y, z) \psi(x, y, z) h_2, \ (x, z) \in \omega_1 \times \omega_3,$$

$$(\varphi, \psi)_{\omega_3} = \sum_{z \in \omega_3} \varphi(x, y, z) \psi(x, y, z) h_3, \ (x, y) \in \omega_1 \times \omega_2.$$

Использовав эти обозначения, скалярное произведение в $H_h$ можно записать, например, в виде

$$(\varphi, \psi) = (((\varphi, \psi)_{\omega_1}, 1), 1)_{\omega_2}, 1)_{\omega_3}. \tag{9}$$

Пусть $\omega_\tau = \{t : t = t_n = n\tau, \ n = \overline{0, N}, \ N\tau = T\}$ — равномерная временная сетка с шагом $\tau$. В дальнейшем при исследовании устойчивости нестационарных задач будем рассматривать сеточные функции $\varphi(t_n)$ дискретного аргумента $t_n \in \omega_\tau$ со значениями из некоторого конечномерного пространства $H_h$, т.е. $\varphi(t_n) = \varphi^n \in H_h$.

Перейдем к вопросу построения разностных схем бегущего счета для численного решения системы дифференциальных уравнений (5)–(7) на примере уравнения (5).

**Разностная схема бегущего счета с направленными разностями.** Во внутренних узлах сетки $\omega_h$ дифференциальные операторы $A_1$, $A_2$, $A_3$ будем аппроксимировать разностными, используя для аппроксимации конвективных слагаемых схемы с направленными разностями [10, 12]. Тогда в узле $(x_i, y_j, z_k)$ оператору $A_1$ можно поставить в соответствие разностный оператор с противопотоковой аппроксимацией конвективного слагаемого

$$\Lambda^+ \varphi = u\varphi_{\bar{x}} - (a_1 \varphi_{\bar{x}})_x, \ u \geq 0, \ a_1 = a_{1i} = a_{1i,j,k} = \mu_{1i-1/2} = \mu_1(x_{i-1/2}, y_j, z_k),$$

$$\Lambda^- \varphi = u\varphi_x - (a_1 \varphi_{\bar{x}})_x, \ u < 0,$$

где $\varphi$ — сеточная функция, заданная в узлах сетки $\omega_h$. Здесь используются общепринятые обозначения теории разностных схем [12, 15]

$$\varphi = \varphi(x_i, y_j, z_k, t_n) = \varphi^n_{i,j,k} = \varphi^n = \varphi_{i,j,k},$$

$$\varphi_t = (\varphi^{n+1} - \varphi^n) / \tau, \ \varphi_x = (\varphi_{i+1,j,k} - \varphi_{i,j,k}) / h_1, \ \varphi_{\bar{x}} = (\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i-1,j,k}) / h_1,$$

$$(a_1 \varphi_{\bar{x}})_x = \frac{1}{h_1} (a_{1i+1} \varphi_x - a_{1i} \varphi_{\bar{x}}) = \frac{1}{h_1^2} (a_{1i+1} \varphi_{i+1} - (a_{1i+1} + a_{1i}) \varphi_i + a_{1i} \varphi_i).$$

Аналогично определяются разностные операторы по другим координатным направлениям $\varphi_y, \varphi_{\bar{y}}, (a_2 \varphi_{\bar{y}})_y$ и $\varphi_z, \varphi_{\bar{z}}, (a_3 \varphi_{\bar{z}})_z$, которые применяются для аппроксимации дифференциальных выражений $A_2$, $A_3$.

Принимая во внимание справедливость соотношения

$$\Lambda^+ C_1 = A_1 C_1 - h_1 \frac{u}{2}\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + O(h_1^2),$$

легко убедиться, что разностное уравнение

$$\varphi_t^n + u\varphi_{\bar{x}}^{n+1} - (a_1 \varphi_{\bar{x}}^{n+1})_x = 0, \ u \ge 0, \tag{10}$$

аппроксимирует дифференциальное уравнение (5) с первым порядком, а условия монотонности выполняются при любых $\tau$ и $h_1$. Если в уравнении (10) оператор $\varphi_x^{n+1}$ заменить соответствующим оператором при $t = t_n$, то в результате получим двухслойную схему бегущего счета

$$\varphi_t + u\varphi_{\bar{x}}^{n+1} - \frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n+1}) = 0, \ u \ge 0. \tag{11}$$

Учитывая, что

$$\frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n+1}) = \frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^n + a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^n - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n+1}) =$$

$$= (a_1\varphi_{\bar{x}}^n)_x - \frac{\tau}{h_1} a_{1i}\varphi_{\bar{x}t}^n,$$

уравнение (11) можем переписать в виде

$$\varphi_t + u\varphi_{\bar{x}}^{n+1} - (a_1\varphi_{\bar{x}}^n)_x + \frac{\tau}{h_1} a_{1i}\varphi_{\bar{x}t}^n = 0.$$

Поскольку $C_{1,\bar{x}t}^n = \dfrac{\partial^2 C_1}{\partial x \partial t} + O(\tau + h_1)$, основной вклад в погрешность аппроксимации уравнения (11) вносит слагаемое $O(\tau / h_1)$. Таким образом, точность результатов, полученных при использовании разностного уравнения (11), будет зависеть от соотношения шагов сетки.

Поступая аналогично, для численного решения уравнения (5) при $u < 0$ можем получить двухслойную схему бегущего счета

$$\varphi_t^n + u\varphi_x^{n+1} - \frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^{n+1} - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^n) = 0, \ u < 0. \tag{12}$$

Отличительной особенностью рассматриваемых разностных схем бегущего счета (11), (12) является возможность их реализации по явным рекуррентным соотношениям. Действительно, анализ шаблона разностной схемы (11) свидетельствует о том, что для определения значения функции $\varphi_i^{n+1}$ необходимо знать значение функции в соседней слева точке на разностной сетке. Поэтому, использовав граничные условия, можно последовательно рассчитать значение сеточной функции на $(n+1)$-м шаге по времени.

Из анализа шаблона разностной схемы (12) следует, что для определения сеточной функции $\varphi_i^{n+1}$ необходимо знать значение функции $\varphi$ в соседней справа точке на разностной сетке, что тоже дает возможность проводить расчеты по рекуррентным соотношениям.

На основе уравнений (11), (12) разностную схему бегущего счета для решения дифференциальных задач (5)–(7) можно записать в виде системы вспомогательных одномерных разностных схем

$$\frac{\varphi_1^{n+1}-\varphi^n}{\tau}+\begin{cases} u\varphi_{1\bar{x}}^{n+1}-\dfrac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n-a_{1i}\varphi_{1\bar{x}}^{n+1})=0, & u\geq 0,\\ u\varphi_{1x}^{n+1}-\dfrac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_{1x}^{n+1}-a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n})=0, & u<0,\end{cases} \tag{13}$$

$$\frac{\varphi_2^{n+1}-\varphi_2^n}{\tau}+\begin{cases} v\varphi_{2\bar{y}}^{n+1}-\dfrac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_{2y}^n-a_{2j}\varphi_{2\bar{y}}^{n+1})=0, & v\geq 0,\\ v\varphi_{2y}^{n+1}-\dfrac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_{2y}^{n+1}-a_{2j}\varphi_{2\bar{y}}^{n})=0, & v<0,\end{cases} \tag{14}$$

$$\frac{\varphi^{n+1}-\varphi_3^n}{\tau}+\begin{cases} w\varphi_{\bar{z}}^{n+1}+\sigma\varphi^{n+1}-\dfrac{1}{h_3}(a_{3k+1}\varphi_{3z}^n-a_{3k}\varphi_{\bar{z}}^{n+1})=f, & w\geq 0,\\ w\varphi_{z}^{n+1}+\sigma\varphi^{n+1}-\dfrac{1}{h_3}(a_{3k+1}\varphi_{z}^{n+1}-a_{3k}\varphi_{3\bar{z}}^{n})=f, & w<0,\end{cases} \tag{15}$$

$$n=0,1,\ldots,\varphi^n\in H_h,$$

с соответствующими начальными условиями.

Таким образом, чтобы найти приближенное решение исходной дифференциальной задачи (1), (2) на слое $t_{n+1}$ по начальным данным $\varphi^n$ на слое $t_n$, надо последовательно решить три одномерные задачи (13)–(15). Вначале решается уравнение (13) и находятся промежуточные значения $\varphi_1^{n+1}$, которые на втором этапе применяются в уравнении (14) для определения вспомогательной сеточной функции $\varphi_2^{n+1}$. На третьем этапе найденные значения $\varphi_2^{n+1}$ используются в качестве начальных для определения приближенного решения $\varphi^{n+1}$.

Теперь рассмотрим важное свойство устойчивости разностной схемы (13)–(15) по начальным данным и покажем ее равномерную устойчивость. Для исследования устойчивости сеточных задач (13)–(15) используем подход, основанный на получении априорных оценок для каждой вспомогательной задачи.

По структуре разностные схемы (13)–(15) совпадают с уравнениями (11), (12), поэтому для удобства в дальнейшем ограничимся рассмотрением устойчивости разностных задач (11), (12).

Для получения априорной оценки воспользуемся принципом замороженных коэффициентов [16] и преобразуем уравнения (11), (12) с постоянным коэффициентом диффузии $a_1(x,y,z)\equiv a_1=\text{const}$ к каноническому операторному виду

$$B\varphi_t+A\varphi=0, \tag{16}$$

где линейные операторы $B, A$ действуют в гильбертовом пространстве $H_h$, $\varphi=\varphi^n\in H_h$.

Как известно [12, 15], необходимым и достаточным условием устойчивости по начальным данным двухслойной разностной схемы (16) с самосопряженными положительными операторами $A, B$ является выполнение операторного неравенства

$$B \geq 0{,}5\tau A, \tag{17}$$

причем для решения $\varphi^{n+1}$ справедлива оценка в энергетической норме $||\cdot||_A$:

$$||\varphi^{n+1}||_A \leq ||\varphi^n||_A, \; n = \overline{0, N}.$$

Вначале рассмотрим для определенности уравнение (11), которое запишем в эквивалентном виде

$$\varphi_t + u\varphi_{\bar{x}}^{n+1} + a_1\Lambda\varphi^n + \frac{\tau}{h_1} a_1 \varphi_{\bar{x}t}^n = 0, \; u \geq 0, \tag{18}$$

где $\Lambda\varphi = -\varphi_{\bar{x}x}$. Далее учтем, что $\varphi_{\bar{x}}^{n+1} = (\varphi_{\bar{x}}^{n+1} - \varphi_{\bar{x}}^n + \varphi_{\bar{x}}^n) = \tau\varphi_{\bar{x}t}^n + \varphi_{\bar{x}}^n$, поэтому уравнение (18) перепишем так:

$$\varphi_t + u\varphi_{\bar{x}}^n + a_1\Lambda\varphi^n + u\tau\varphi_{\bar{x}t}^n + \frac{\tau}{h_1} a_1 \varphi_{\bar{x}t}^n = 0, \; u \geq 0. \tag{19}$$

Отсюда следует, что разностное уравнение (19) можно записать в операторном виде (16), где линейные операторы $A, B$ действуют в сеточном пространстве $H_h$ и определяются формулами

$$A\varphi^n = a_1\Lambda\varphi^n + u\varphi_{\bar{x}}^n, \; B\varphi = E\varphi^n + \left(\tau u + \frac{\tau a_1}{h_1}\right)\varphi_{\bar{x}}^n,$$

где $E$ — единичный оператор.

Учитывая, что

$$\varphi_{\bar{x}} = \varphi_{\overset{\circ}{x}} - 0{,}5h_1\varphi_{\bar{x}x} = \varphi_{\overset{\circ}{x}} + 0{,}5h_1\Lambda\varphi, \; \varphi_{\overset{\circ}{x}} = 0{,}5(\varphi_{\bar{x}} + \varphi_x),$$

окончательно получаем выражения для операторов $A, B$:

$$A = A_0 + A_1, \; A_0\varphi = \left(a_1 + \frac{uh_1}{2}\right)\Lambda\varphi, \; A_1\varphi = u\varphi_{\overset{\circ}{x}},$$

$$B_0\varphi = E\varphi + \left(u\frac{\tau h_1}{2} + \frac{\tau a_1}{2}\right)\Lambda\varphi, \; B_1\varphi = \left(\tau u + \frac{\tau a_1}{h_1}\right)\varphi_{\overset{\circ}{x}}.$$

В случае $u < 0$ представим схему бегущего счета (12) в операторном виде (16) при $a_1(x, y, z) \equiv a_1 = \mathrm{const}$, исходя из эквивалентного уравнения

$$\varphi_t + u\varphi_x^{n+1} + a_1\Lambda\varphi^n - \frac{\tau a_1}{h_1}\varphi_{xt}^n = 0, \; u < 0. \tag{20}$$

С учетом выражений

$$\varphi_x^{n+1} = (\varphi_x^{n+1} - \varphi_x^n + \varphi_x^n) = \tau\varphi_{xt}^n + \varphi_x^n, \; \varphi_x^n = \varphi_{\overset{\circ}{x}}^n + 0{,}5h_1\varphi_{\bar{x}x} = \varphi_{\overset{\circ}{x}}^n - 0{,}5h_1\Lambda\varphi^n$$

разностную задачу (20) можно записать в виде двухслойной операторной схемы (16), операторы которой $A, B$ определяются формулами $A = A_0 + A_1$, $B = B_0 + B_1$, где

$$A = A_0 + A_1,\ A_0\varphi = \left(a_1 - \frac{uh_1}{2}\right)\Lambda\varphi,\ A_1\varphi = u\varphi_{\overset{\circ}{x}},$$

$$B = B_0 + B_1,\ B_0\varphi = E\varphi + \left(\frac{\tau a_1}{2} - u\frac{\tau h_1}{2}\right)\Lambda\varphi,\ B_1\varphi = \left(\tau u - \frac{\tau a_1}{h_1}\right)\varphi_{\overset{\circ}{x}}.$$

Полученные выражения для операторов схемы (16) можно переписать в компактном виде

$$A = A_0 + A_1,\ A_0\varphi = \left(a_1 + \frac{|u|h_1}{2}\right)\Lambda\varphi,\ u \ge 0,\ u < 0,\ A_1\varphi^n = \begin{cases} u\varphi_{\overset{\circ}{x}}, & u \ge 0, \\ u\varphi_{\overset{\circ}{x}}, & u < 0; \end{cases} \tag{21}$$

$$B = B_0 + B_1,\ B_0\varphi = E\varphi + \left(\frac{|u|\tau h_1}{2} + \frac{\tau a_1}{2}\right)\Lambda\varphi,\ u \ge 0,\ u < 0,$$

$$B_1\varphi = \begin{cases} \left(u\tau + \dfrac{\tau a_1}{h_1}\right)\varphi_{\overset{\circ}{x}}, & u \ge 0, \\ \left(u\tau - \dfrac{\tau a_1}{h_1}\right)\varphi_{\overset{\circ}{x}}, & u < 0. \end{cases} \tag{22}$$

Используя разностные формулы Грина [15], а также представление скалярного произведения $(\cdot,\cdot)$ в виде (9), можем показать самосопряженность и положительную определенность операторов $A_0, B_0$ в смысле скалярного произведения $(\cdot,\cdot)$. Аналогично можно установить кососимметричность операторов $A_1, B_1$, тогда $(A_1\varphi,\varphi) = 0$, $(B_1\varphi,\varphi) = 0$. Поэтому условие устойчивости (17) эквивалентно условию $B_0 \ge 0{,}5\tau A_0$. Учитывая, что

$$B_0\varphi = E\varphi + \left(|u|\frac{\tau h_1}{2} + \frac{\tau a_1}{2}\right)\Lambda\varphi = E\varphi + |u|\frac{\tau h_1}{4}\Lambda\varphi + \frac{\tau}{2}A_0\varphi,$$

записываем условие устойчивости схемы (16) в виде

$$E + |u|\frac{\tau h_1}{4}\Lambda + \frac{\tau}{2}A_0 \ge \frac{\tau}{2}A_0.$$

Это условие всегда выполняется, поэтому разностная схема (16), (21), (22) равномерно устойчива по начальным данным в энергетической норме $\|\cdot\|_{A_0}$.

Таким образом, справедливо следующее утверждение.

**Теорема 1.** Двухслойная разностная схема бегущего счета (16), (21), (22) равномерно устойчива по начальным данным в энергетической норме $\|\cdot\|_{A_0}$, и для ее решения имеет место априорная оценка

$$\|\varphi^{n+1}\|_{A_0} \le \|\varphi^n\|_{A_0},\ n = \overline{0, N}.$$

Из предыдущих рассуждений следует, что для вспомогательной задачи (13) при всех возможных значениях коэффициента диффузии $a_1(x, y, z)$ и компоненты вектора скорости воздушной среды вдоль координаты $Ox$ выполняется операторное условие устойчивости.

Согласно принципу замороженных коэффициентов схема (13) равномерно устойчива по начальным данным, если условие (17) выполнено при всех возможных значениях коэффициентов $a_1(x, y, z)$ и $u$.

Приведенная схема доказательства устойчивости полностью применима для исследования устойчивости вспомогательных двухслойных разностных схем бегущего счета (14), (15). Аналогично можно установить равномерную устойчивость вспомогательных задач (14), (15), что в целом гарантирует устойчивость вычислений при переходе с $n$-го на $(n+1)$-й временной слой.

Для исследования монотонности схем (11), (12) представим их в индексных обозначениях

$$(1+\tau u/h_1+\gamma a_{1i})\varphi^{n+1}_{i,j,k}=$$

$$=(1-\gamma a_{1i+1})\varphi^{n}_{i,j,k}+(\tau u/h_1+\gamma a_{1i})\varphi^{n+1}_{i-1j,k}+\gamma a_{1i+1}\varphi^{n}_{i+1,j,k}=0,\ \gamma=\tau/h_1^2,\ u\ge 0,$$

$$(1-\tau u/h_1+\gamma a_{1i+1})\varphi^{n+1}_{i,j,k}=$$

$$=(1-\gamma a_{1i})\varphi^{n}_{i,j,k}+(-\tau u/h_1+\gamma a_{1i+1})\varphi^{n+1}_{i+1j,k}+\gamma a_{1i}\varphi^{n}_{i-1,j,k}=0,\ \gamma=\tau/h_1^2,\ u<0,$$

соответственно. Отсюда из условия положительности коэффициентов находим, что разностная схема бегущего счета (13) монотонна при $\tau\le h_1^2\Big/\max\limits_{(x,y,z)\in\omega_h}a_1$.

**Разностная схема бегущего счета с аппроксимацией конвективного члена центральной разностью.** Для решения задачи (5) расссмотрим разностную схему бегущего счета, полученную в результате аппроксимации конвективного слагаемого центральной разностью. В этом случае дифференциальному уравнению (5) во внутренних узлах сетки $\omega_h$ поставим в соответствие разностное уравнение

$$\varphi^n_t+u\varphi^{n+1}_{\overset{\circ}{x}}-(a_1\varphi^{n+1}_{\bar{x}})_x=0,\ u\ge 0,\ a_1=a_{1i}=a_{1i,j,k}=\mu_{1i-1/2},\qquad(23)$$

где $\varphi_{\overset{\circ}{x}}=0{,}5(\varphi_{\bar{x}}+\varphi_x)$. Заменяя в уравнении (23) оператор $\varphi^{n+1}_x$ оператором $\varphi^n_x$, получаем двухслойную схему бегущего счета

$$\varphi^n_t+\frac{u}{2}(\varphi^{n+1}_{\bar{x}}+\varphi^n_x)-\frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi^n_x-a_{1i}\varphi^{n+1}_{\bar{x}})=0,\ u\ge 0.\qquad(24)$$

Учитывая, что

$$\frac{u}{2}(\varphi^{n+1}_{\bar{x}}+\varphi^n_x)=\frac{u\tau}{2}\varphi^n_{\bar{x}t}+u\varphi^n_{\overset{\circ}{x}},\ \frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi^n_x-a_{1i}\varphi^{n+1}_{\bar{x}})=(a_1\varphi^n_{\bar{x}})_x-\frac{\tau}{h_1}a_{1i}\varphi^n_{\bar{x}t},$$

уравнение (24) можем переписать в виде

$$\varphi^n_t+u\varphi^n_{\overset{\circ}{x}}-(a_1\varphi^n_{\bar{x}})_x+\frac{u\tau}{2}\varphi^n_{\bar{x}t}+\frac{\tau}{h_1}a_{1i}\varphi^n_{\bar{x}t}=0,\ u\ge 0.\qquad(25)$$

Отсюда следует, что основной вклад в погрешность аппроксимации уравнения (24) вносит слагаемое $O(\tau/h_1)$.

При построении разностной схемы бегущего счета с аппроксимацией конвективного члена центральной разностью для уравнения (5) при $u<0$ будем исходить из разностного уравнения

$$\varphi^n_t+\frac{u}{2}(\varphi^{n+1}_{\bar{x}}+\varphi^{n+1}_x)-\frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi^{n+1}_x-a_{1i}\varphi^{n+1}_{\bar{x}})=0,\ u<0.\qquad(26)$$

Заменив в (26) оператор $\varphi_{\bar{x}}^{n+1}$ оператором $\varphi_{\bar{x}}^{n}$, преобразуем уравнение к виду

$$\varphi_t^n+\frac{u}{2}(\varphi_{\bar{x}}^n+\varphi_x^{n+1})-\frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^{n+1}-a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^n)=0,\ u<0. \tag{27}$$

Принимая во внимание, что

$$-\frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^{n+1}-a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^n)=-(a_1\varphi_{\bar{x}}^n)_x-\frac{\tau}{h_1}a_{1i+1}\varphi_{xt}^n,$$

$$\frac{u}{2}(\varphi_{\bar{x}}^n+\varphi_x^{n+1})=\frac{u\tau}{2}\varphi_{xt}^n+u\varphi_{\overset{\circ}{x}}^n,$$

получаем преобразованное уравнение бегущего счета

$$\varphi_t^n+u\varphi_{\overset{\circ}{x}}^n-(a_1\varphi_{\bar{x}}^n)_x+\frac{u\tau}{2}\varphi_{xt}^n-\frac{\tau}{h_1}a_{1i+1}\varphi_{xt}^n=0,\ u<0. \tag{28}$$

Теперь, использовав предыдущие рассуждения, разностную схему бегущего счета для решения дифференциальных задач (5)–(7) с аппроксимацией конвективного члена центральной разностью запишем в виде системы разностных задач

$$\frac{\varphi_1^{n+1}-\varphi^n}{\tau}+\begin{cases}\dfrac{u}{2}(\varphi_{1\bar{x}}^{n+1}+\varphi_x^n)-\dfrac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n-a_{1i}\varphi_{1\bar{x}}^{n+1})=0, & u\ge 0,\\ \dfrac{u}{2}(\varphi_{\bar{x}}^n+\varphi_{1x}^{n+1})-\dfrac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_{1x}^{n+1}-a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^n)=0, & u<0,\end{cases} \tag{29}$$

$$\frac{\varphi_2^{n+1}-\varphi_2^n}{\tau}+\begin{cases}\dfrac{v}{2}(\varphi_{2\bar{y}}^{n+1}+\varphi_{2y}^n)-\dfrac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_{2y}^n-a_{2j}\varphi_{2\bar{y}}^{n+1})=0, & v\ge 0,\\ \dfrac{v}{2}(\varphi_{2\bar{y}}^n+\varphi_{2y}^{n+1})-\dfrac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_{2y}^{n+1}-a_{2j}\varphi_{2\bar{y}}^n)=0, & v<0,\end{cases} \tag{30}$$

$$\frac{\varphi^{n+1}-\varphi_3^n}{\tau}+\begin{cases}\dfrac{w}{2}(\varphi_{\bar{z}}^{n+1}+\varphi_{3z}^n)+\sigma\varphi^{n+1}-\dfrac{1}{h_3}(a_{3k+1}\varphi_{3z}^n-a_{3k}\varphi_{\bar{z}}^{n+1})=f, & w\ge 0,\\ \dfrac{w}{2}(\varphi_{3\bar{z}}^n+\varphi_z^{n+1})+\sigma\varphi^{n+1}-\dfrac{1}{h_3}(a_{3k+1}\varphi_z^{n+1}-a_{3k}\varphi_{3\bar{z}}^n)=f, & w<0,\end{cases} \tag{31}$$

$$n=0,1,\ldots,\ \varphi^n\in H_h,$$

с соответствующими начальными условиями.

Устойчивость разностных схем (29)–(31) исследуем на примере схемы (29) при $a_1(x,y,z)\equiv a_1=\mathrm{const}$, исходя из ее представления в операторном виде (16). Для этого снова воспользуемся уравнениями (25), (28), на основании анализа которых можно получить выражения для операторов схемы (16):

$$A\varphi=u\varphi_{\overset{\circ}{x}}+a_1\Lambda\varphi,\ u\ge 0,\ u<0,\ B\varphi=\begin{cases}E\varphi+\left(\dfrac{u\tau}{2}+\dfrac{\tau a_1}{h_1}\right)\varphi_{\bar{x}}, & u\ge 0,\\ E\varphi+\left(\dfrac{u\tau}{2}-\dfrac{\tau a_1}{h_1}\right)\varphi_x=0, & u<0.\end{cases} \tag{32}$$

Учитывая тождества $\varphi_{\bar{x}} = \varphi_{\overset{\circ}{x}} + 0{,}5 h_1 \Lambda\varphi$, $\varphi_x^n = \varphi_{\overset{\circ}{x}}^n - 0{,}5 h_1 \Lambda\varphi^n$, выражения для оператора $B$ можем представить в виде $B = B_0 + B_1$, где

$$B_0\varphi = \begin{cases} E\varphi + \left( \dfrac{u\tau h_1}{4} + \dfrac{\tau a_1}{2} \right) \Lambda\varphi, & u \ge 0, \\ \varphi + \left( \dfrac{\tau a_1}{2} - \dfrac{u\tau h_1}{4} \right) \Lambda\varphi, & u < 0, \end{cases} \quad B_1\varphi = \begin{cases} \left( \dfrac{u\tau}{2} + \dfrac{\tau a_1}{h_1} \right) \varphi_{\overset{\circ}{x}}, & u \ge 0, \\ \left( \dfrac{u\tau}{2} - \dfrac{\tau a_1}{h_1} \right) \varphi_{\overset{\circ}{x}}, & u < 0. \end{cases} \tag{33}$$

В результате анализа свойств операторов $A, B$ легко установить, что

$$A = A^* > 0, \; B = B^* > 0, \; (A\varphi, \varphi) = (A_0\varphi, \varphi) + (A_1\varphi, \varphi) = (A_0\varphi, \varphi),$$

$$(B\varphi, \varphi) = (B_0\varphi, \varphi) + (B_1\varphi, \varphi) = (B_0\varphi, \varphi),$$

где $A_0\varphi = a_1 \Lambda\varphi$, $A_1\varphi = u\varphi_{\overset{\circ}{x}}$, $u \ge 0$, $u < 0$.

Это означает, что операторное условие устойчивости разностных схем (16), (32), (33) принимает вид $B_0 \ge 0{,}5\tau A_0$ или

$$E + \left( \frac{|u|\tau h_1}{4} + \frac{\tau a_1}{2} \right) \Lambda \ge \frac{\tau a_1}{2} \Lambda.$$

Нетрудно видеть, что такое операторное неравенство выполняется для произвольных шагов сетки.

В результате сформулируем такое утверждение.

**Теорема 2.** Двухслойная разностная схема бегущего счета (16), (32), (33) равномерно устойчива по начальным данным в энергетической норме $\|\cdot\|_{A_0}$, и для ее решения имеет место априорная оценка

$$\|\varphi^{n+1}\|_{A_0} \le \|\varphi^n\|_{A_0}, \; n = \overline{0, N}.$$

Поскольку разностную схему (29) при всех допустимых значениях коэффициента диффузии $a_1(x, y, z)$ и компоненты вектора скорости вдоль координаты $Ox$ можно представить в операторном виде (16), (32), (33), из принципа замороженных коэффициентов следует равномерная устойчивость вспомогательной схемы бегущего счета (29) по начальным данным.

Отметим, что приведенная схема доказательства устойчивости полностью переносится на случай исследования устойчивости схем бегущего счета (30) и (31).

Рассмотрим свойство монотонности разностных схем бегущего счета (24), (27), для чего запишем эти уравнения в индексных обозначениях, разрешенных относительно $\varphi_{i,j,k}^{n+1}$:

$$\left( 1 + \frac{\tau u}{2h_1} + \frac{\tau}{h_1^2} a_{1i} \right) \varphi_{i,j,k}^{n+1} = \left( 1 + \frac{\tau u}{2h_1} - \frac{\tau}{h_1^2} a_{1i+1} \right) \varphi_{i,j,k}^n +$$

$$+ \left( \frac{\tau u}{2h_1} + \frac{\tau}{h_1^2} a_{1i} \right) \varphi_{i-1j,k}^{n+1} + \left( -\frac{\tau u}{2h_1} + \frac{\tau}{h_1^2} a_{1i+1} \right) \varphi_{i+1,j,k}^n, \; u \ge 0,$$

$$\left(1-\frac{\tau u}{2h_1}+\frac{\tau}{h_1^2}a_{1i+1}\right)\varphi_{i,j,k}^{n+1}=\left(1-\frac{\tau u}{2h_1}-\frac{\tau}{h_1^2}a_{1i}\right)\varphi_{i,j,k}^{n}+$$

$$+\left(\frac{\tau u}{2h_1}+\frac{\tau}{h_1^2}a_{1i}\right)\varphi_{i-1j,k}^{n}+\left(-\frac{\tau u}{2h_1}+\frac{\tau}{h_1^2}a_{1i+1}\right)\varphi_{i+1,j,k}^{n+1},\ u<0.$$

Условия монотонности схем (24), (27) и, следовательно, разностной схемы (29) будут выполнены, если

$$\tau\le\frac{2h_1^2}{2\max(a_1)-|u|\,h_1},\ \ h_1<\frac{2\min(a_1)}{|u|}.$$

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье предложен подход для численного решения многомерных нестационарных уравнений конвективной диффузии, использующий идею расщепления и реализацию полученных одномерных разностных схем с помощью явных схем бегущего счета. Исследованы вопросы построения схем расщепления, аппроксимации, устойчивости и монотонности исследуемых разностных схем с явной реализацией вычислений. Применение предложенного подхода к решению пространственных нестационарных уравнений конвективной диффузии на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью позволит значительно сократить временные затраты.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ


1. Згуровский М.З., Скопецкий В.В., Хрущ В.К., Беляев Н.Н. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде. Киев: Наук. думка, 1997. 368 с.
2. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. Москва: Наука, 1982. 320 с.
3. Алоян А.Е. Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. Москва: Наука, 2008. 415 с.
4. Гладкий А.В., Сергієнко І.В., Скопецький В.В., Гладка Ю.А. Основи математичного моделювання в екології. Київ: НТУУ «КПІ», 2009. 240 с.
5. Parra-Guevara D., Skiba Yu N. On optimal solution of an inverse air pollution problem: Theory and numerical approach. *Mathematical and Computer Modelling*. 2006. Vol. 43. P. 766–778.
6. Parra-Guevara D., Skiba Yu.N. Industrial pollution transport. Part 1. Formulation of the problem and air pollution estimates. *Environmental Modeling and Assessment*. 2000. Vol. 5. P. 169–175.
7. Parra-Guevara D., Skiba Yu.N. Industrial pollution transport. Part 2. Control of industrial emissions. *Environmental Modeling and Assessment*. 2000. Vol. 5. P. 177–184.
8. Skiba Yu.N., Parra-Guevara D., Belitskaya V.D. Air quality assessment and control of emission rates *Environmental Monitoring and Assessment*. 2005. Vol. 111. P. 89–112.
9. Dang Q., Ehrhardt M. Adequate numerical solution of air pollution problems by positive difference schemes on unbounded domains. *Mathematical and Computer Modelling*. 2006. Vol. 44. P. 834–856.
10. Гладкий А.В. Об исследовании алгоритмов расщепления в задачах конвекции-диффузии. *Кибернетика и системный анализ*. 2014. Т. 50, № 4. С. 76–88.
11. Грищенко А.Е., Марцафей А.С. Об одном двухшаговом алгоритме расщепления в задачах тепломассопереноса. *Кибернетика и системный анализ*. 2011. № 6. С. 125–131.

12. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции–диффузии. Москва: Эдиториал УРСС, 2004. 248 с.

13. Марчук Г.И. Методы расщепления. Москва: Наука, 1988. 264 с.

14. Саульев В.К. Об одном способе численного интегрирования уравнений диффузии. *Докл. акад. наук СССР*. 1957. Т. 115, № 6. С. 1077–1080.

15. Самарский А.А., Гулин А.В. Устойчивость разностных схем. Москва: Наука, 1973. 416 с.

16. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы математической физики. Москва: Научный мир, 2003. 316 с.

*Надійшла до редакції 31.03.2016*

**А.В. Гладкий**

**ПРО СТІЙКІСТЬ РІЗНИЦЕВИХ СХЕМ РОЗЩЕПЛЕННЯ ДЛЯ РІВНЯННЯ КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ**

**Анотація.** Розглянуто задачу чисельного моделювання процесів поширення забруднень у повітряному середовищі на основі методу геометричного розщеплення тривимірних нестаціонарних рівнянь конвективної дифузії. Для розв’язання отриманих одновимірних задач побудовано різницеві схеми розщеплення у вигляді схем з явною організацією обчислень. Досліджено питання апроксимації, монотонності та стійкості запропонованих різницевих схем.

**Ключові слова:** рівняння конвекції-дифузії, методи розщеплення, числовий метод, різницева схема, стійкість.

**A.V. Gladky**

**STABILITY OF DIFFERENCE SPLITTING SCHEMES FOR THE CONVECTIVE-DIFFUSION EQUATION**

**Abstract.** We consider the problem of numerical modeling of the propagation of contamination in the air processes on the basis of geometry splitting method for three-dimensional nonstationary convection-diffusion equations. Splitting difference schemes in the form of schemes with explicit computing are proposed to solve the obtained one-dimensional problems. The approximation, monotonicity, and stability of difference schemes are investigated.

**Keywords:** convection-diffusion equation, splitting methods, numerical method, finite difference scheme, stability.

**Гладкий Анатолий Васильевич,**
доктор физ.-мат. наук, профессор, заведующий лабораторией Института кибернетики НАН Украины им. В.М. Глушкова, Киев, e-mail: gladky@ukr.net.