文章编号:1673-1549(2011)05-0580-03

求解一维对流扩散反应方程的一种隐式差分格式

魏剑英

(宁夏大学数学计算机学院, 银川 750021)

摘　要:提出了数值求解一维非稳态对流扩散反应方程的一种隐式差分格式。首先将模型方程利用指数函数转化为对流扩散方程,构造它的差分格式,然后对差分方程的系数进行相应处理,并进行回代,得到对流扩散反应方程的隐式差分格式,其截断误差为 $O(\tau^2+h^2)$, 采用 von Neumann 方法证明了格式是无条件稳定的,并且由于每一时间层上只用到了 3 个网格点,所以可直接采用追赶法求解差分方程,数值结果显示了算法的有效性。

关键词:对流扩散反应方程;隐式差分格式;无条件稳定

中图分类号:O241.82　　**文献标识码**:A

对流扩散反应方程常用于描述大气、海洋、河流等环境及化工领域中的传热、传质等对流扩散现象,因此,寻找此类方程稳定、实用的数值方法有着重要的理论和实际意义。已经发展了多种求解对流扩散反应方程的方法,如文献[1-6]的有限差分法、变分差分法和有限元法等。其中,有限差分法是计算流体力学领域中应用最为广泛、发展最成熟和完善的数值计算方法之一,其要点是在空间和时间 2 个方向上使问题离散化,用差商近似代替导数,将微分方程变为差分方程,然后从初始条件出发,按时间逐步推进得出解。本文提出了数值求解一维非稳态对流扩散反应方程的一种隐式差分格式,然后对格式的稳定性进行分析,最后给出数值算例和结论。

1　差分方法

考虑如下一维非稳态对流扩散反应方程的初边值问题:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}+u\frac{\partial\varphi}{\partial x}+c\varphi=\varepsilon\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+f(x,t) \tag{1}$$

边界条件给定为:

$$\varphi(0,t)=g_o(t),\ \varphi(1,t)=g_1(t),\ 0<x<1 \tag{2}$$

$$\varphi(x,0)=d(x) \tag{3}$$

其中, ε,u,c 分别表示扩散系数、对流速度、反应系数, f 是关于 x,t 的足够光滑函数。构造方程(1)的差分格式,以 τ 表示时间步长,空间取等间距网格,步长用 h 表示。网格点为 (x_i,t_n), $x_i=ih$, $t_n=n\tau$, $i=0,1,\cdots,m$, $h=\frac{1}{m}$, $n\geqslant 0$。

首先令 $\varphi=e^{-ct}\phi$, 代入方程(1),可以消去反应项,其结果为:

$$\phi_t+u\phi_x=\varepsilon\phi_{xx}+e^{ct}f \tag{4}$$

考虑方程(4)的如下差分方程:

$$\phi_{t,i}+C_1\delta_x^2\phi_i+C_2\delta_x\phi_i=e^{ct}f_i \tag{5}$$

式中

$$\delta_x\phi_i=\frac{1}{2h}(\phi_{i+1}-\phi_{i-1}) \tag{6}$$

$$\delta_x^2\phi_i=\frac{1}{h^2}(\phi_{i+1}-2\phi_i+\phi_{i-1}) \tag{7}$$

C_1,C_2 为待定系数。为确定系数值,将方程(5)写成如下形式:

$$C_1\delta_x^2\phi_i+C_2\delta_x\phi_i=(u\phi_x-\varepsilon\phi_{xx})_i \tag{8}$$

设方程(8)对函数 1, x, $e^{\frac{u}{\varepsilon}x}$ 精确成立,联立方程可得到方程(5)的系数为:

$$C_1=-\frac{uh}{2}\coth\left(\frac{uh}{2\varepsilon}\right),\ C_2=u \tag{9}$$

因此,方程(5)可改写为:

收稿日期:2011-06-28

基金项目:宁夏自然科学基金资助项目(NZ0938)

作者简介:魏剑英(1980-),女,安徽砀山人,讲师,硕士,主要从事计算流体力学方面的研究,(E-mail)weiwy2002@163.com

$$\phi_{t,i} = \frac{uh}{2}\coth\left(\frac{uh}{2\varepsilon}\right)\delta_x^2\phi_i - u\delta_x\phi_i + e^{ct}f_i \tag{10}$$

令 $\hat{u} = \frac{u}{\varepsilon}$, $\alpha = sign(u)$, 为了避免指数的快速溢出,方程(10)可表示为:

$$\begin{aligned}\phi_{t,i} = A\{&[(1-\alpha)+(1+\alpha)e^{-\hat{u}h}]\phi_{i+1} - \\ &[2+(1+\alpha)e^{-\hat{u}h}+(1-\alpha)e^{\hat{u}h}]\phi_i + \\ &[(1+\alpha)+(1-\alpha)e^{\hat{u}h}]\phi_{i-1}\} + e^{ct}f_i\end{aligned} \tag{11}$$

其中

$$A = \begin{cases}\dfrac{u/h}{2\alpha+(1-\alpha)e^{\hat{u}h}-(1+\alpha)e^{-\hat{u}h}}, u \neq 0 \\ \dfrac{1}{h^2}, u = 0\end{cases} \tag{12}$$

如果考虑方程(11)在 $n+\frac{1}{2}$ 时刻的值并对式中所有点均以第 $n+1$ 层和第 n 层的算术平均值代替,整理后即可得到求解方程(4)的隐式差分格式

$$\begin{aligned}&S\phi_{i+1}^{n+1} - (T+\rho)\phi_i^{n+1} + E\phi_{i-1}^{n+1} = \\ &-[S\phi_{i+1}^n - (T-\rho)\phi_i^n + E\phi_{i-1}^n] - \\ &\frac{1}{A}(e^{c(n+1)\tau}f_i^{n+1} + e^{cn\tau}f_i^n)\end{aligned} \tag{13}$$

式中

$$\rho = \frac{2}{A\tau},\ S = (1-\alpha)+(1+\alpha)e^{-\hat{u}h}$$

$$T = 2+(1+\alpha)e^{-\hat{u}h}+(1-\alpha)e^{\hat{u}h}$$

$$E = (1+\alpha)+(1-\alpha)e^{\hat{u}h}$$

最后,将 $\phi = e^{ct}\varphi$ 代入(13)式,可得到求解模型方程(1)的全隐格式:

$$\begin{aligned}&S\varphi_{i+1}^{n+1} - (T+\rho)\varphi_i^{n+1} + E\varphi_{i-1}^{n+1} = \\ &-[S\varphi_{i+1}^n - (T-\rho)\varphi_i^n + E\varphi_{i-1}^n]e^{-c\tau} - \\ &\frac{1}{A}(f_i^{n+1} + e^{-c\tau}f_i^n)\end{aligned} \tag{14}$$

由推导过程可得其截断误差为 $O(\tau^2+h^2)$。

2　稳定性分析

采用 von Neumann 方法[7]对(14)式进行稳定性分析,假设问题的数值解可以表示为傅立叶级数的展开式,其特征项为

$$\varphi_i^n = \eta^n e^{i\lambda x_i} \tag{15}$$

式中,$i=\sqrt{-1}$ 为虚数单位,λ 为波数,且右端项 f 无误差存在。将(15)式代入(14)式化简可得其放大因子

$$G = -\frac{Se^{i\lambda h} - (T-\rho) + Ee^{-i\lambda h}}{Se^{i\lambda h} - (T+\rho) + Ee^{-i\lambda h}} \times e^{-c\tau}$$

由于 S,T,E 的值随 α 的变化而变化,故可以分情况讨论 G, 都能得到 $|G| \leqslant 1$, 即本文格式是无条件稳定的。

3　数值算例

为了验证本文方法的效果,考察如下 2 个有精确解的算例。

算例 1

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + 2\frac{\partial\varphi}{\partial x} + \varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + (x^2+2x-2)e^{-t}$$

$$\varphi(x,0) = x^2$$

$$\varphi(0,t) = 0,\ \varphi(1,t) = e^{-t}$$

问题的精确解为 $\varphi(x,t) = x^2e^{-t}$。

算例 2

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{\partial\varphi}{\partial x} + 10\varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + [(1+10t)\sin(\pi x) - \pi t\cos(\pi x)]e^{-\pi^2 t}$$

$$\varphi(x,0) = 0$$

$$\varphi(0,t) = \varphi(1,t) = 0$$

问题的精确解为 $\varphi(x,t) = te^{-\pi^2 t}\sin(\pi x)$。

图 1 给出了空间步长取 1/16 和 1/32 时,问题 1 在 $t=0.25$ 和 $t=1.0$ 时刻本文格式计算结果和精确解的比较。从图 1 中可以看出,数值解与精确解吻合较好。

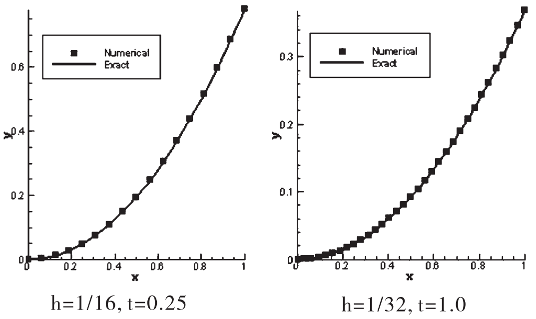

图 1　问题 1 在 h = 1/16, t = 0.25 和 h = 1/32, t = 1.0 时数值解和精确解的比较

表 1 给出了空间步长分别取 1/8, 1/16, 1/32, 1/64 和 1/128 时,当 $\tau = h$ 时问题 2 在 $t=0.5$ 时刻 BTCS 格式、本文全隐格式和 $\tau = h^2$ 时 BTCS 格式的数值计算结果的最大误差 E 以及收敛阶 $rate = \ln(E_1/E_2)/\ln 2$, 其中 E_1 和 E_2 分别为粗网格及相邻的细网格上的最大误差。由表 1 可以看出,本文格式当 $\tau = h$ 时,在空间上严格达到了二阶精度而 BTCS 格式仅有一阶精度;当 $\tau = h^2$ 时, BTCS 格式在空间上也达到了二阶精度,但本文格式在大时间步长 $\tau = h$ 下较 BTCS 格式在小时间步长 $\tau = h^2$ 下结果仍然更为精确。

4　结　论

(1)推导出了数值求解一维对流扩散反应方程的精度为 $O(\tau^2+h^2)$ 的隐式差分格式, 并采用 von Neumann

分析方法证明了格式是无条件稳定的。

(2)本文所构造的隐式差分格式在每一个时间层上只用到了 3 个网格点,所以差分方程为三对角线型的,可直接采用追赶法进行求解,无须迭代,计算量小,计算简便。数值实验结果表明,当 $\tau = O(h)$ 时本文格式的计算精度在空间上达到了二阶。

(3)本文方法可以直接推广到二维和三维的情形。

(4)本文提出的隐格式在空间方向只有二阶精度,应继续探索与改进,争取提出高精度的差分格式。

表 1　问题 2 在 $t = 0.5$ 时刻的最大误差

h	BTCS 格式($\tau = h$)		BTCS 格式($\tau = h^2$)		本文格式($\tau = h$)	
	E	rate	E	rate	E	rate
1/8	1.59(−3)		2.07(−4)		3.39(−5)	
1/16	7.26(−4)	1.10	5.10(−5)	2.02	8.61(−6)	1.98
1/32	3.47(−4)	1.01	1.27(−5)	2.00	2.15(−6)	2.00
1/64	1.69(−4)	1.07	3.18(−6)	2.00	5.38(−7)	2.00
1/128	8.37(−5)	1.01	7.94(−7)	2.00	1.34(−7)	2.00

注:1.59(−3) = 1.59×10^{-3}

参 考 文 献:

[1] Tony W H,Sheu S K,Wang R K.An Implicit Scheme for Solving the convection-diffusion-reaction Equation in Two Dimensions[J].Journal of Computational Physics,2000,164:123-142.

[2] 李荣华,冯国忱.微分方程数值解法[M].北京:高等教育出版社,2003.

[3] 朱国庆,李清善,陈绍春.分层网格上扩散对流反应方程的双二次元逼近[J].河南大学学报:自然科学版,2007,37(3):221-225.

[4] 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,1998,13(3):161-167.

[5] 葛永斌,田振夫,吴文权.含源项非定常对流扩散方程的高精度紧致隐式差分方法[J].水动力学研究与进展,2006,21(5):620-625.

[6] 田瑞雪,葛永斌,吴文权.二维非定常对流扩散方程的隐式多重网格方法[J].西南师范大学学报:自然科学版,2003,28(4):507-512.

[7] 胡建伟.微分方程数值方法[M].北京:科学出版社,1999.

An Implicit Scheme of the 1D Convection-Diffusion-Reaction Equation

WEI Jian-ying

(School of Mathematics and Computer Sciences, Ningxia University, Yinchuan 750021, China)

Abstract: An implicit difference scheme is proposed for solving the one-dimensional (1D) unsteady convection-diffusion-reaction equation. By using an exponential function, the model equation can be rewritten in the form of the convection-diffusion equation. Firstly its difference scheme is constructed; then, using the back substitution process, the final implicit scheme is gotten. The truncation of the scheme is $O(\tau^2 + h^2)$. It is proved to be unconditionally stable by Von Neumann method. Because only three points are used at each time level, the difference equation can be solved by the method of forward elimination and backward substitution. Numerical results indicates the efficiency of the algorithm.

Key words: convection-diffusion-reaction equation; implicit difference scheme; unconditional stability