А. М. Липанов, Расчёт частных производных при пересечении скачка гидромеханических параметров, *Матем. моделирование*, 2015, том 27, номер 11, 76–94

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 2015 год, том 27, номер 11, стр. 76-94

РАСЧЁТ ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПРИ ПЕРЕСЕЧЕНИИ СКАЧКА ГИДРОМЕХАНИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ

 А.М. Липанов

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН aml35@yandex.ru

Рассматриваются алгоритмы расчета градиентов и вторых частных производных от гидромеханических параметров при пересечении зоны их скачка.
Показано, что в этом случае шаги интегрирования по пространственным координатам должны быть переменными, немонотонными, проходящими через минимум.
Выполнены два примера расчета величин переменных шагов интегрирования для одной из пространственных координат в зависимости от величин данной координаты.

Ключевые слова: частная производная, скачок гидромеханических параметров, переменные шаги интегрирования, алгоритм расчета, пространственные переменные.

THE CALCULATION OF PARTIAL DERIVATIVES WHEN CROSSING THE JUMP OF HYDROMECHANICAL PARAMETERS

A.M. Lipanov

Keldysh Institute for Applied Mathematics RAS

The questions of the formation of nonmonotonic variables of the steps of spatial integration at going over the jump of hydromechanical parameters (HMP) are considered.
The equations of logistic curves are derived for descending and ascending branches of the step of the spatial coordinate integration depending on the same coordinate.
The algorithms are formulated for obtaining gradients and second partial derivatives of different orders of accuracy at variable integration steps for the case of going over the HMP jump.
The obtaining of the relevant order of accuracy is validated (in the above conditions).

Key words: partial derivative, hydromechanical parameters leap, integration variable steps, calculation algorithm, spatial variables.

1. Введение

В пределах пограничных слоев, при пересечении атмосферных фронтов и скачков гидромеханических параметров (ГМП) их величины интенсивно изменяются. В данном случае имеем ввиду несколько размытые скачки ГМП вследствие воздействия динамической вязкости среды, например, воздуха. В дальнейшем термин «скачок» будем употреблять, имея ввиду его определенную размытость.

Сказанное о расчетах величин ГМП при пересечении их скачков будем относить и к атмосферным фронтам, и к пограничным слоям. При переходе через скачок ГМП могут увеличиваться или уменьшаться. В слабовязкой среде их изменение происходит в достаточно узкой зоне. На рис.1 это показано для давления в газе при переходе через падающую ударную волну [1].

Аналогичное изменение давления имеет место и при пересечении баллистической ударной волны (рис.2). Здесь при подходе к скачку (точка *Н* на падающей ударной волне или перед баллистической волной (рис.2)) изменение давления сначала интенсифицируется, а потом (после точки перегиба) замедляется при подходе к уровню после скачка (точка *К*).

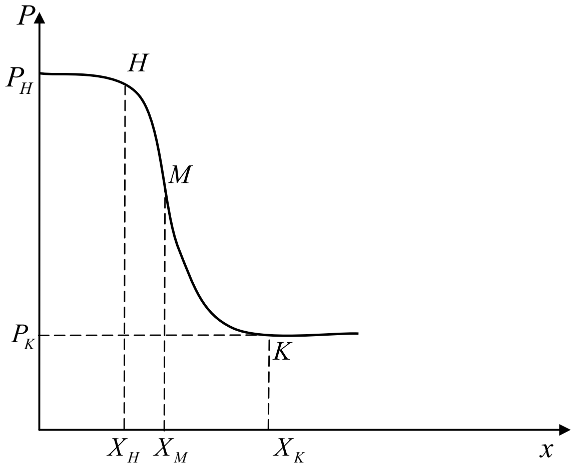

Рис.1. Изменение давления при переходе через падающую ударную волну: *М* – точка перегиба на кривой *Р*(*x*); *Н*, *К* – начальная и конечная точки скачка давления.

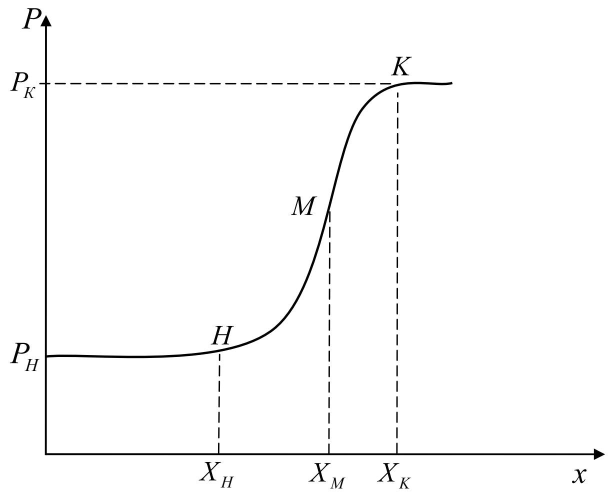

Рис.2. Изменение давления при переходе через баллистическую волну: $P_Н$, $P_К$ – давления перед и после скачка уплотнения; *М* – точка перегиба на кривой *Р*(*x*).

Чтобы аккуратно рассчитывать величины ГМП в пределах зоны их скачка, шаги интегрирования вдоль пространственной переменной необходимо изменять. Более того, при увеличении интенсивности изменения величин ГМП шаги интегрирования уравнений гидромеханики надо уменьшать, а при замедлении – увеличивать [2]. Это значит, что при пересечении скачка ГМП шаги интегрирования уравнений гидромеханики по пространственным переменным должны изменяться немонотонно: сначала уменьшаться, а потом увеличиваться, проходя через минимум.

Из сказанного следует, что при рассмотрении турбулентного диапазона изменения ГМП, частные производные от ГМП по пространственным переменным необходимо считать с высокими порядками точности при одновременном изменении шагов интегрирования вдоль пространственных координат.

Целью данной работы является изложение алгоритмов расчета величин частных производных от ГМП по пространственным координатам на основе разностных схем высокого порядка точности, когда шаги интегрирования по пространственным координатам – переменные. Рассматриваем не только собственно ГМП (давление, плотность и компоненты вектора скорости потока), но и их произведения. Например, ρUV и другие их комбинации, входящие в дифференциальные уравнения гидромеханики [1, 2]. Поэтому переменную, частные производные для которой будем рассматривать, обозначим f .

2. Законы изменения шагов интегрирования вдоль пространственных координат

Определимся сначала с закономерностями изменения шагов интегрирования вдоль пространственных координат в пределах зоны скачка ГМП. Будем рассматривать одну из пространственных координат x. Алгоритмы расчета вдоль других координат будут аналогичными. Используем расчетный случай, рассмотренный в [3], когда шаги интегрирования в пространстве удовлетворяют дифференциальному уравнению логистических кривых:

$$\frac{d\Delta x}{dx} = a\left(z^n - z^m\right)\varphi\left(x\right), \tag{1}$$

где

$$z = \frac{\Delta x - \Delta x_0}{\Delta x_m - \Delta x_0}; \tag{2}$$

$$\varphi\left(x\right) = x^{-\alpha}\left(1 + \beta x\right). \tag{3}$$

Показатели степени n и m – положительные числа, $n < m$; $\alpha > 0$; $\beta > 0$, $\Delta x_0, \Delta x_m$ – минимальная и максимальная величины шагов Δx.

Поместим начало координат вдоль пространственной переменной x в точку M (рис.1, 2), соответствующую минимальному шагу Δx интегрирования по x. В этом случае уравнение (1), если переменная z удовлетворяет равенству (2), позволяет получить градиенты $d\Delta x / dx$ равными нулю как при x=0, так и при $x \to \infty$.

Выбирая параметры уравнения $a, n, m, \alpha, \Delta x_0$, условие $d\Delta x / dx = 0$ при $x \to \infty$ можно обеспечить для достаточно узкого интервала изменения координаты.

При $x > 0$ (восходящая ветвь кривой $\Delta x(x)$) используем уравнение (1). Рассмотрим случай, когда шаги интегрирования Δx_H и Δx_K не совпадают $(\Delta x_H \neq \Delta x_K)$, а точка перегиба на кривой $f(x)$ не совпадает с серединой интервала между точками H и K (рис.1, 2). Введем в левую часть уравнения (1) переменную z, учитывая её выражение (2). Будем иметь

$$\frac{dz}{dx} = \frac{a}{\Delta x_K - \Delta x_M}\left(z^n - z^m\right)\cdot\varphi(x). \tag{4}$$

Полученное уравнение (4) – с разделяющимися переменными. Интегрируя его, найдём

$$\int_0^z \frac{d\psi}{\psi^n - \psi^m} = \frac{a}{\Delta x_K - \Delta x_M}\int_0^x \varphi\left(\xi\right)d\xi. \tag{5}$$

Квадратура справа в равенстве (5) находится без труда:

$$\int_0^x \varphi\left(\xi\right)d\xi = \frac{x^{1-\alpha}}{1-\alpha} + \frac{\beta}{2-\alpha}x^{2-\alpha} = \frac{x^{1-\alpha}}{1-\alpha}\left(1 + \beta\frac{1-\alpha}{2-\alpha}x\right).$$

Квадратура слева в общем случае должна рассчитываться численно.

Рассмотрим расчетный случай, когда m=1, а 0<n<1. Тогда будем иметь

$$\int_0^z \frac{d\psi}{\psi^n - \psi} = \frac{1}{1-n}\int_0^z \frac{d\psi^{1-n}}{1-\psi^{1-n}} = -\frac{1}{1-n}\int_0^z \frac{d\left(1-\psi^{1-n}\right)}{1-\psi^{1-n}} = -\frac{1}{1-n}\ln\left(1-z^{1-n}\right).$$

Отсюда в соответствии с уравнением (5) найдем

$$\ln\left(1-z^{1-n}\right)=-\frac{a\left(1-n\right)}{\Delta x_K-\Delta x_M}\cdot\frac{x^{1-\alpha}}{1-\alpha}\left(1+\beta\frac{1-\alpha}{2-\alpha}\cdot x\right)\cdot$$

Обозначим

$$A=\frac{a\left(1-n\right)}{\left(1-\alpha\right)\Delta x_K-\Delta x_M};\qquad F\left(x\right)=x^{1-n}\left(1+\beta\frac{1-\alpha}{2-\alpha}x\right).$$

Тогда для переменной z получим формулу

$$z=\left(1-e^{-A\cdot F(x)}\right)^{1/(1-n)},\tag{6}$$

а для переменной Δx найдем

$$\Delta x=\Delta x_M+\left(\Delta x_K-\Delta x_M\right)\left(1-e^{-A\cdot F(x)}\right)^{1/(1-n)}.\tag{7}$$

Обратимся далее к рассмотрению нисходящей ветви кривой $\Delta x(x)$. Здесь увеличению координаты x соответствует уменьшение переменной Δx. Поэтому в данном случае используем то же дифференциальное уравнение, что и для восходящей ветви кривой $\Delta x(x)$, но со знаком минус в его правой части.

Имеем

$$\frac{d\Delta x}{dx}=-a\left(\tilde{z}^n-\tilde{z}^m\right)\varphi(-x),\tag{8}$$

где

$$\tilde{z}=\frac{\Delta x-\Delta x_M}{\Delta x_H-\Delta x_M}.\tag{9}$$

В точке M, где $\Delta x=\Delta x_M$, имеем $\tilde{z}=0$ и, следовательно, $d\Delta x/dx=0$. При перемещении в отрицательную область изменения координаты x модуль величины шага интегрирования Δx растет, а вместе с ним растет и переменная $\tilde{z}$. При достижении равенства $\Delta x=\Delta x_H$, отношение $\tilde{z}$ будет равно единице, а разность z^n-z^m будет равна нулю. Это значит, что и $d\Delta x/dx$ будет равно нулю тоже.

Введем в левую часть уравнения (8) переменную $\tilde{z}$. Будем иметь

$$\frac{d\tilde{z}}{dx}=-\frac{a\left(\tilde{z}^n-\tilde{z}^m\right)}{\Delta x_H-\Delta x_M}\varphi(-x).\tag{10}$$

Тогда можем записать

$$\frac{d\tilde{z}}{\tilde{z}^n-\tilde{z}^m}=\frac{a}{\Delta x_H-\Delta x_M}\varphi(-x)d(-x).$$

После этого, интегрируя от точки M в направлении увеличения Δx, получим

$$\int_0^{\tilde z} \frac{d\tilde\psi}{\tilde\psi^n - \tilde\psi^m} = -\frac{a}{\Delta x_H - \Delta x_M} \int_0^{-x} \varphi(\xi) d\xi . \qquad (11)$$

Здесь знак минус включен в знак переменной x. После интегрирования при m=1 найдем

$$\tilde z = \left(1 - e^{-A\cdot F(-x)}\right)^{1/(1-n)} \qquad (12)$$

и для определения Δx будем иметь формулу:

$$\Delta x = \Delta x_M + \left(\Delta x_H - \Delta x_M\right)\left(1 - e^{-A\cdot F(-x)}\right)^{1/(1-n)} . \qquad (13)$$

Пусть величины шагов Δx_H и Δx_K будут равны между собой, а точка M соответствует середине интервала, в пределах которого располагаем скачок уплотнения. Примем $\Delta x_H = \Delta x_K = 0.06$, а $\Delta x_M = 0.0005$. Тогда, если $n = 0.2$; $\alpha = 0.14$; $a = 1$, а $\beta = 100$, то получим кривую 1 $\Delta x(x)$, показанную на рис.3.

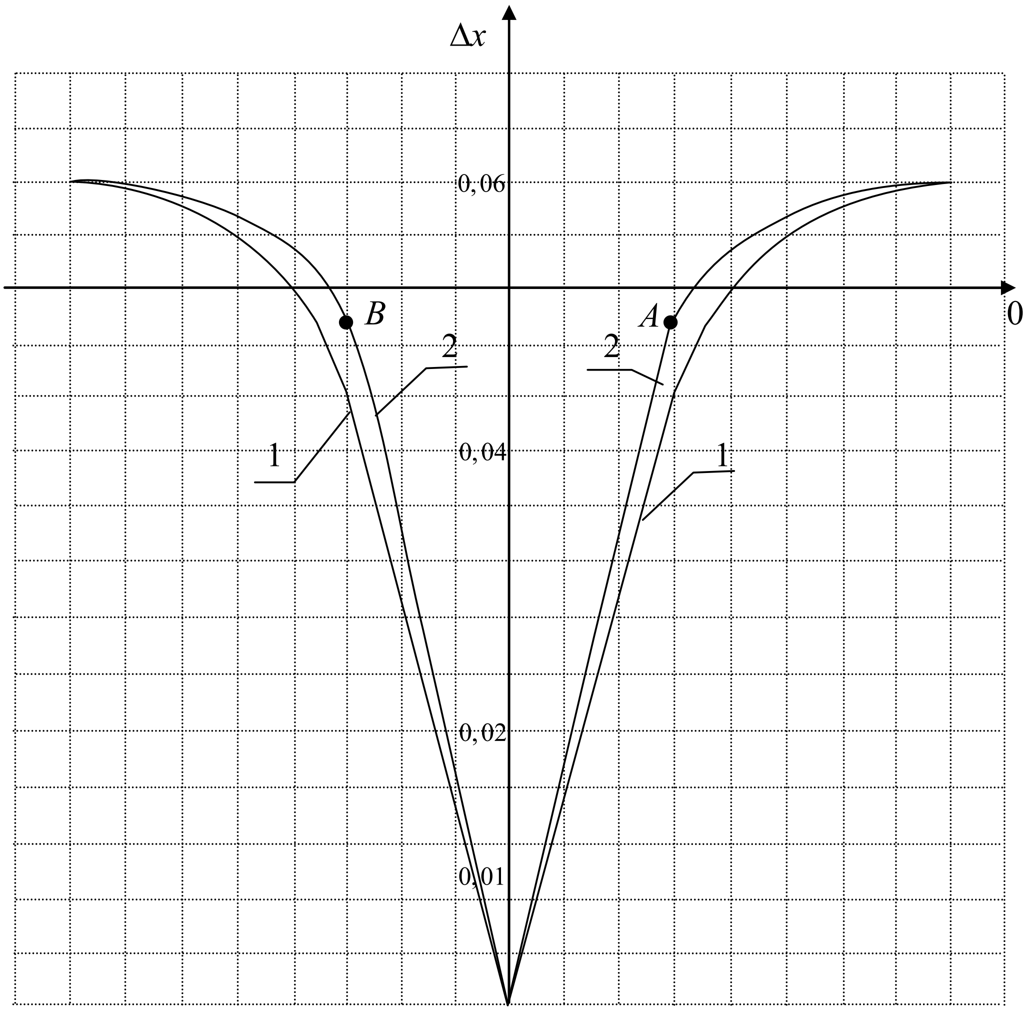

Рис.3. Логистическая (1) и составная (2) зависимости $\Delta x(x)$. В точках A и B имеют место изломы кривой.

Видим, что переменные шаги $\Delta x(x)$ укладываются в интервал 0.08, асимптотически стремясь на этом расстоянии к уровню 0.06. При этом на каждой ветви кривой $\Delta x(x)$ размещается по семь шагов. Их величины отдельно приведены в табл.1. В табл.2 даны отношения $\Delta x_{i+1} / \Delta x_i$. Видим, что отношения $\Delta x_{i+1} / \Delta x_i$ достигают максимума, равного 2.62, и в целом изменяются достаточно плавно.

Таблица 1. Величины шагов Δx_i в зависимости от значений координат x_i.

i	0	1	2	3	4	5	6	7
x_i	0	0.0005	0.0013444	0.002926	0.006171	0.01364	0.03322	0.08065
Δx_i	0.0005	0.0008444	0.001582	0.003245	0.007465	0.01958	0.04743	0.05995

Таблица 2. Отношения (i+1)-х шагов Δx_{i+1} к i-м.

i	0	1	2	3	4	5	6
$\Delta x_{i+1} / \Delta x_i$	1.6888	1.8739	2.0508	2.3006	2.6232	2.4218	1.2641

Аналогичные результаты получаются, если использовать кривую, состоящую из синусоиды

$$\Delta x = a + b\sin\left(3\pi / 2 + 3\alpha \cdot x\right)$$

прямой

$$\Delta x = A + B\left(x - 0.0005\right)$$

и логистической кривой

$$\Delta x = \frac{\Delta x_H}{z_H + \left(1 - z_H\right) \cdot \exp\left(-\dfrac{a}{\Delta x_K} F(x)\right)}, \qquad F(x) = \left(x + x_H\right)\left[1 + 50\left(x + x_H\right)\right].$$

Здесь $a = 1.068 \cdot 10^{-3}$; $b = 0.5682 \cdot 10^{-3}$; $\alpha = 0.967 \cdot 10^{3}$; A=10^{-3}; B=1.63(63); $a / \Delta x_K$=20. Синусоида и прямая пересекаются при $x = x_1 = 0.0005$. Прямая и логистическая кривая пересекаются при $x = x_2 = 0.0366$.

В этом случае получаем следующую зависимость $\Delta x(x)$ (кривая 2 на рис.3). Величины шагов $\Delta x(x)$ и отношений $\Delta x_{i+1} / \Delta x_i$ приведены в табл.3.

Таблица 3. Величины шагов Δx_i и отношений $\Delta x_{i+1} / \Delta x_i$ как функций номера шага i и координаты Δx_i.

i	0	1	2	3	4	5	6
x_i	0	0.0005	0.0015	0.00414	0.01109	0.02941	0.077719
Δx_i	0.0005	0.001	0.00263	0.00695	0.01832	0.04831	0.06
$\Delta x_{i+1} / \Delta x_i$	2	2.63	2.64	2.64	2.64	1.242	

Как видим, количества шагов $\Delta x(x)$ в табл.1–3 совпадают, а их отношения в табл.3 близки к таковым в табл.2. Но в отличие от табл.2 в табл.3 есть плато́ вместо максимума в табл.2.

3. Алгоритмы расчета величин частных производных первого и второго порядков в пределах зоны скачка ГМП

3.1. Нахождение величин градиентов. Величины градиентов будем определять на симметричном шаблоне по формуле [2]

$$\frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial x}\left(\Delta x_i\right)_{cp}\cdot N=\sum_{m=1}^{N/2}\left[a_{i+m}\left(f_{i+m}-f_i\right)-a_{i-m}\left(f_{i-m}-f_i\right)\right], \tag{14}$$

где

$$\left(\Delta x_i\right)_{cp}=\frac{1}{N}\sum_{\theta=-(N/2-1)}^{N/2}\Delta x_{i+\theta},$$

$$\begin{aligned} f_{i+m}=f_i+\frac{\partial f_i}{\partial x}\cdot\sum_{\theta=1}^{m}\Delta x_{i+\theta}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2}\left(\sum_{\theta=1}^{m}\Delta x_{i+\theta}\right)^2+\frac{1}{6}\frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3}\left(\sum_{\theta=1}^{m}\Delta x_{i+\theta}\right)^3+\\ +\frac{1}{24}\frac{\partial^4 f_i}{\partial x^4}\left(\sum_{\theta=1}^{m}\Delta x_{i+\theta}\right)^4+\ldots, \end{aligned} \tag{15}$$

$$f_{i-m}=f_i-\frac{\partial f_i}{\partial x}\cdot\sum_{\theta=-(m-1)}^{0}\Delta x_{i+\theta}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2}\left(\sum_{\theta=-(m-1)}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^2-\frac{1}{6}\frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3}\left(\sum_{\theta=-(m-1)}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^3+\ldots. \tag{16}$$

Здесь N – общее число точек слева и справа от i-й.

Величины параметра N будем определять на основе асимптотической сходимости результатов расчетов при различных величинах N. Если N=2, то выражение (14) перепишется в виде

$$\frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial x}2\left(\Delta x_i\right)_{cp}=a_{i+1}\left(f_{i+1}-f_i\right)-a_{i-1}\left(f_{i-1}-f_i\right). \tag{17}$$

Подставим ряды (15) и (16) для переменных $f_{i\pm1}$ в последнее уравнение. Найдем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial x}=\frac{a_{i+1}\Delta x_{i+1}+a_{i-1}\Delta x_i}{\Delta x_i+\Delta x_{i+1}}\,\frac{\partial f_i}{\partial x}+\frac{a_{i+1}\Delta x^2{}_{i+1}-a_{i-1}\cdot\Delta x^2{}_i}{\Delta x_i+\Delta x_{i+1}}\,\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2}+\\ +\frac{a_{i+1}\Delta x^3{}_{i+1}+a_{i-1}\cdot\Delta x^3{}_i}{\Delta x_i+\Delta x_{i+1}}\,\frac{1}{6}\frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3}+\ldots. \end{aligned} \tag{18}$$

Для определения коэффициентов $a_{i\pm1}$ в равенстве (18) приравняем коэффициент при $\partial f_i/\partial x$ единице, а коэффициент при $\partial^2 f_i/\partial x^2$ – нулю. Будем иметь

$$a_{i+1}\Delta x_{i+1}+a_{i-1}\Delta x_i=\Delta x_i+\Delta x_{i+1},\qquad a_{i+1}\Delta x_{i+1}^2-a_{i-1}\Delta x_i^2=0. \tag{19}$$

Отсюда находим

$$a_{i+1}=\frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i+1}};\quad a_{i-1}=\frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i}, \tag{20}$$

или $a_{i-1} = a_{i+1}^{-1}$. Подставляя выражения (20) для $a_{i\pm1}$ в остаточный член разложения (18), получим

$$\frac{\partial\tilde{f}_i}{\partial x} = \frac{\partial f_i}{\partial x} + \frac{\Delta x_1^2 \cdot n}{6}\frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3},$$

где $n = \Delta x_{i+1} / \Delta x_i$.

Видим, что выражение (17) аппроксимирует производную $\partial f_i / \partial x$ со 2-м порядком точности, а для расчета $\partial\tilde{f}_i / \partial y$ имеем формулу

$$\frac{\partial\tilde{f}_i}{\partial x} = \frac{1}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}\left[\frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i+1}}\left(f_{i+1} - f_i\right) - \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i}\left(f_{i-1} - f_i\right)\right]. \tag{21}$$

Данное выражение при переходе к $\Delta x = \text{const}$ даёт обычную центральную разность [4] $(f_{i+1} - f_{i-1}) / (2\Delta x)$.

Если N=4, то из равенства (14) будем иметь

$$\frac{\partial\tilde{f}_i}{\partial x} = \frac{1}{H \cdot \left(\Delta x_i\right)_{cp}}\left[a_{i+2}\left(f_{i+2} - f_i\right) + a_{i+1}\left(f_{i+1} - f_i\right) - a_{i-2}\left(f_{i-2} - f_i\right) - a_{i-1}\left(f_{i-1} - f_i\right)\right]. \tag{22}$$

Используя вновь для переменных $f_{i\pm1}, f_{i\pm2}$ разложение в ряды Тэйлора (15) и (16), для $\partial\tilde{f}_i / \partial y$ получим следующее выражение:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\tilde{f}_i}{\partial x} = {} & \frac{a_{i+2}\left(\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}\right) + a_{i+1}\Delta x_{i+1} + a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right) + a_{i-1}\Delta x_i}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial x} + \\
& + \frac{a_{i+2}\left(\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}\right)^2 + a_{i+1}\Delta x_{i+1}^2 - a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)^2 - a_{i-1}\Delta x_i^2}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}} \cdot \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} + \\
& + \frac{a_{i+2}\left(\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}\right)^3 + a_{i+1}\Delta x_{i+1}^3 + a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)^3 + a_{i-1}\Delta x_i^3}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}} \cdot \frac{1}{6}\frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3} + \\
& + \frac{a_{i+2}\left(\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}\right)^4 + a_{i+1}\Delta x_{i+1}^4 - a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)^4 - a_{i-1}\Delta x_i^4}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}} \cdot \frac{1}{24}\frac{\partial^4 f_i}{\partial x^4} + \\
& + \frac{a_{i+2}\left(\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}\right)^5 + a_{i+1}\Delta x_{i+1}^5 + a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)^5 + a_{i-1}\Delta x_i^5}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}} \cdot \frac{1}{120}\frac{\partial^5 f_i}{\partial x^5}.
\end{aligned} \tag{23}$$

Для определения четырёх коэффициентов $a_{i\pm2}$ и $a_{i\pm1}$ получим четыре уравнения, если коэффициент при $\partial f_i / \partial x$ приравняем единице, а коэффициенты при второй, третьей и четвертой производных приравняем нулю. Будем иметь

$$a_{i+2}\left(\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}\right) + a_{i+1}\Delta x_{i+1} + a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right) + a_{i-1}\Delta x_i = \Delta x_{i-1} + \Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2};$$

$$a_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^2+a_{i+1}\Delta x_{i+1}^2-a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^2-a_{i-1}\Delta x_i^2=0;$$
$$a_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^3+a_{i+1}\Delta x_{i+1}^3+a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3+a_{i-1}\Delta x_i^3=0; \tag{24}$$
$$a_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^4+a_{i+1}\Delta x_{i+1}^4-a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^4-a_{i-1}\Delta x_i^4=0.$$

Если главный определитель Δ_{0U} системы уравнений (24) отличен от нуля, то получим

$$a_{i+2}=\frac{\Delta_{14}}{\Delta_{04}};\quad a_{i+1}=\frac{\Delta_{24}}{\Delta_{04}};\quad a_{i-2}=\frac{\Delta_{34}}{\Delta_{04}},\quad a_{i-1}=\frac{\Delta_{44}}{\Delta_{04}}, \tag{25}$$

где определители $(\theta=1,2,3,4)$ получены из главного определителя заменой θ-го столбца правыми частями уравнений (24). Из выражения (23) с учетом системы уравнений (24) следует, что

$$\frac{\partial\tilde{f}_i}{\partial x}=\frac{\partial f_i}{\partial x}+Q\left(\Delta x_{эф}^4\right)\cdot\frac{\partial^5 f_i}{\partial x^5},$$

где $Q(\Delta x_{эф}^4)$ – малая величина 4-го порядка.

$$Q\left(\Delta x_{эф}^4\right)=\frac{\Delta_{14}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^5+\Delta_{24}\Delta x_{i+1}^5+\Delta_{34}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^5+\Delta_{44}\Delta x_i^5}{\Delta_{04}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i+\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)}.$$

Введем отношения

$$n_{-1,i}=\frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta x_i};\qquad n_{1,i}=\frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i};\qquad n_{2,i}=\frac{\Delta x_{i+2}}{\Delta x_i}.$$

Это будут конечные величины, большие или меньшие единицы.

Тогда выражение для $Q(\Delta x_{эф}^4)$ можно переписать в виде

$$Q\left(\Delta x_{эф}^4\right)=\Delta x_i^4\cdot B_i,$$

где $B_i=\dfrac{\Delta_{14}\left(n_{1i}+n_{2i}\right)^5+\Delta_{24}n_{1i}^5+\Delta_{34}\left(n_{-1i}+1\right)^5+\Delta_{44}}{\Delta_{04}\left(1+n_{-1i}+n_{1i}+n_{2i}\right)}.$

В результате получим, что при N=4 выражение (22) аппроксимирует частную производную $\partial f_i/\partial x$ с 4-м порядком точности.

Увеличивая N, сможем найти коэффициенты $a_{i\pm m}$ $(m=1,2,...,N/2)$ при любой величине N. Таблицы значений коэффициентов $a_{i\pm m}$ необходимо определять до решения уравнений гидромеханики для каждой i-й точки и потом использовать при расчете величин ГМП.

3.2. Алгоритм расчета величин частных производных 2-го порядка. Для расчета величин частных производных 2-го порядка используем выражение:

$$\frac{\partial^2 \tilde{f}_i}{\partial x^2}\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2 = \sum_{m=1}^{N/2} b_{i+m}\left(f_{i+m}-f_i\right) + \sum_{m=1}^{N/2+1} b_{i-m}\left(f_{i-m}-f_i\right). \tag{26}$$

Здесь при той же величине N, что и для градиентов, для получения одинаковой точности аппроксимации вычисляемых вторых частных производных, требуется большее на единицу количество коэффициентов $b_{i\pm m}$. Поэтому будем использовать минимально асимметричную разностную схему:

в направлении к минимальному из шагов Δx будем брать $N/2$ точек, а в противоположном направлении – $N/2+1$ точек. Поэтому вторая сумма в равенстве (26) имеет на одно слагаемое больше. Так что, при N=2 получаем

$$\frac{\partial^2 \tilde{f}_i}{\partial x^2}\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2 = b_{i+1}\left(f_{i+1}-f_i\right) + b_{i-1}\left(f_{i-1}-f_i\right) + b_{i-2}\left(f_{i-2}-f_i\right), \tag{27}$$

где $\left(\Delta x_i\right)_{cp} = \dfrac{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}{2}$.

Разлагая переменные $f_{i\pm 1}$ и f_{i-2} в ряды Тэйлора, и объединяя слагаемые при одинаковых производных, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \tilde{f}_i}{\partial x^2}\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2 &= \left[b_{i+1}\Delta x_{i+1} - b_{i-1}\Delta x_i - b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)\right]\frac{\partial f_i}{\partial x} + \\ &+\left[b_{i+1}\Delta x_{i+1}^2 + b_{i-1}\Delta x_i^2 + b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^2\right]\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} + \\ &+\left[b_{i+1}\Delta x_{i+1}^3 - b_{i-1}\Delta x_i^3 - b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3\right]\frac{1}{6}\frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3} + \\ &+\left[b_{i+1}\Delta x_{i+1}^4 + b_{i-1}\Delta x_i^4 + b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^4\right]\frac{1}{24}\frac{\partial^4 f_i}{\partial x^4}. \end{aligned} \tag{28}$$

Разделим полученное равенство слева и справа на $(\Delta x_i)_{cp}^2$ и коэффициенты при первой и третьей частных производных приравняем нулю, а коэффициент перед второй частной производной приравняем единице. Будем иметь

$$\begin{aligned} &b_{i+1}\Delta x_{i+1} - b_{i-1}\Delta x_i - b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right) = 0, \\ &b_{i+1}\Delta x_{i+1}^2 + b_{i-1}\Delta x_i^2 + b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^2 = 2\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2, \\ &b_{i+1}\Delta x_{i+1}^3 - b_{i-1}\Delta x_i^3 - b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3 = 0. \end{aligned} \tag{29}$$

Главный определитель этой системы уравнений Δ_{03} равен

$$\Delta_{03} = -\Delta x_i \cdot \Delta x_{i+1} \cdot \Delta x_{i-1}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)\left(\Delta x_i+\Delta x_{i+1}\right)\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i+\Delta x_{i+1}\right)$$

и отличен от нуля. Поэтому для коэффициентов $b_{i\pm 1}$ и b_{i-2} получаем формулы

$$b_{i+1}=\frac{\left(\Delta x_i+\Delta x_{i+1}\right)\left(\Delta x_{i-1}+2\Delta x_i\right)}{2\Delta x_{i+1}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i+\Delta x_{i+1}\right)},\qquad b_{i-1}=\frac{\left(\Delta x_i+\Delta x_{i+1}\right)\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i-\Delta x_{i+1}\right)}{2\Delta x_i\cdot\Delta x_{i-1}},$$
$$b_{i-2}=-2\frac{\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2\left(\Delta x_i-\Delta x_{i+1}\right)}{\Delta x_{i-1}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i-\Delta x_{i+1}\right)}. \tag{30}$$

При переменных величинах шагов интегрирования Δx_i все три коэффициента $b_{i\pm1}$ и b_{i-2} отличны от нуля. При этом b_{i-2} при стремлении Δx_i к $\Delta x=\text{const}$ будет стремиться к нулю.

Поскольку коэффициенты $b_{i\pm1}$ и b_{i-2} в их числителях и знаменателях имеют одинаковые порядки и являются конечными величинами, то порядок малости коэффициента при $\partial^4 f_i/\partial x^4$ в остаточном члене разложения (28) будет определяться отношениями малых 4-го порядка к $(\Delta x_i)_{cp}^2$. Так что для $\partial^2\tilde{f}_i/\partial x^2$ получим

$$\frac{\partial^2\tilde{f}_i}{\partial x^2}=\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2}+Q\left(\Delta x_{эф}^2\right)\frac{\partial^4 f_i}{\partial x^4}, \tag{31}$$

где $Q(\Delta x_{эф}^2)$ – величина 2-го порядка малости.

Если шаги Δx постоянные, то $b_{i+1}=b_{i-1}=1$ и от номера *i* шага интегрирования по *x* не зависят. Для бесконечно малой величины $Q(\Delta x^2)$ в этом случае находим: $Q(\Delta x^2)=$ $=\Delta x^2/24$. Если N=4, то

$$\frac{\partial^2\tilde{f}_i}{\partial x^2}\cdot\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2=b_{i+1}\left(f_{i+1}-f_i\right)+b_{i+2}\left(f_{i+2}-f_i\right)+b_{i-1}\left(f_{i-1}-f_i\right)+$$
$$+b_{i-2}\left(f_{i-2}-f_i\right)-b_{i-3}\left(f_{i-3}-f_i\right). \tag{32}$$

Используя разложения переменных $f_{i\pm1}, f_{i\pm2}, f_{i-3}$ в ряды Тэйлора, получим

$$\frac{\partial^2\tilde{f}_i}{\partial x^2}\cdot\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2= \tag{33}$$

$$=\left[b_{i+1}\Delta x_{i+1}+b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)-b_{i-1}\Delta x_i-b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)-b_{i-3}\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right]\frac{\partial f_i}{\partial x}+$$
$$+\left[b_{i+1}\Delta x_{i+1}^2+b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^2+b_{i-1}\Delta x_i^2+b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^2+b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^2\right]\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2}+$$
$$+\left[b_{i+1}\Delta x_{i+1}^3+b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^3-b_{i-1}\Delta x_i^3-b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3-b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^3\right]\frac{1}{6}\frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3}+$$

$$+\left[b_{i+1}\Delta x_{i+1}^4+b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^4+b_{i-1}\Delta x_i^4+b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^4+b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^4\right]\frac{1}{24}\frac{\partial^4 f_i}{\partial x^4}+$$

$$+\left[b_{i+1}\Delta x_{i+1}^5+b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^5-b_{i-1}\Delta x_i^5-b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^5-b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^5\right]\frac{1}{120}\frac{\partial^5 f_i}{\partial x^5}+$$

$$+\left[b_{i+1}\Delta x_{i+1}^6+b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^6+b_{i-1}\Delta x_i^6+b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^6+b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^6\right]\frac{1}{720}\frac{\partial^6 f_i}{\partial x^6}.$$

Разделим левую и правую части выражения (33) на $(\Delta x_i)_{cp}^2$ и приравняем коэффициент при $\partial^2 f_i / \partial x^2$ единице, а при 1, 3, 4 и 5-й производных – нулю. Получим следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$b_{i+1}\Delta x_{i+1}+b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)-b_{i-1}\Delta x_i-b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)-b_{i-3}\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}=0, \qquad (34)$$

$$b_{i+1}\Delta x_{i+1}^2+b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^2+b_{i-1}\Delta x_i^2+b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^2+b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)=2\cdot\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2,$$

$$b_{i+1}\Delta x_{i+1}^3+b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^3-b_{i-1}\Delta x_i^3-b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3-b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^3=0,$$

$$b_{i+1}\Delta x_{i+1}^4+b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^4+b_{i-1}\Delta x_i^4+b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^4+b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^4=0,$$

$$b_{i+1}\Delta x_{i+1}^5+b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^5-b_{i-1}\Delta x_i^5-b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^5-b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^5=0.$$

Если главный определитель Δ_{05} системы уравнений (34) отличен от нуля, то сможем найти величины коэффициентов

$$b_{i+1}=\frac{\Delta_{15}}{\Delta_{05}};\quad b_{i+2}=\frac{\Delta_{25}}{\Delta_{05}};\quad b_{i-1}=\frac{\Delta_{35}}{\Delta_{05}};\quad b_{i-2}=\frac{\Delta_{45}}{\Delta_{05}};\quad b_{i-3}=\frac{\Delta_{55}}{\Delta_{05}}. \qquad (35)$$

Здесь определители $\Delta_{\theta 5}$ $(\theta=1,2,...,5)$ получаем из главного определителя заменой его θ-го столбца правыми частями системы уравнений (34).

При использовании системы уравнений (34) выражение (33) принимает вид

$$\frac{\partial^2 \tilde{f}_i}{\partial x^2}=\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2}+Q\left(\Delta x_{i\,эф}^4\right)\frac{\partial^6 f_i}{\partial x^6}, \qquad (36)$$

где

$$Q\left(\Delta x_{iэф}^4\right)=\frac{\Delta_{15}\cdot\Delta x_{i+1}^6+\Delta_{25}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^6+\Delta_{35}\Delta x_i^6+\Delta_{45}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^6+\Delta_{55}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^6}{720\cdot\Delta_{05}\cdot\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2}. \qquad (37)$$

Отнесем все используемые шаги к Δx_i и обозначим

$$n_1 = \frac{\Delta x_{i-2}}{\Delta x_i}; \quad n_2 = \frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta x_i}; \quad n_3 = \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i}; \quad n_4 = \frac{\Delta x_{i+2}}{\Delta x_i}.$$

Все отношения n_j $(j = 1,2,3,4)$ – конечные величины. Тогда выражение (37) можно записать в виде

$$Q\left(\Delta x_{i\,эф}^4\right) = B_i \cdot \Delta x_i^4, \tag{38}$$

где $B_i = \dfrac{\Delta_{15} \cdot n_3^6 + \Delta_{25}\left(n_3 + n_4\right)^6 + \Delta_{35} + \Delta_{45}\left(1+n_2\right)^6 + \Delta_{55}\left(1+n_1+n_2\right)^6}{180 \cdot \Delta_{05} \cdot \left(1 + n_2 + n_3 + n_4\right)^2}$.

Коэффициент B_i зависит от номера *i*-й точки и является конечной величиной.

В итоге из выражения (36) следует, что при *N*=4 формула (32) аппроксимирует вторую частную производную с 4-м порядком точности. Увеличивая *N*, можно обеспечить любую требуемую точность при расчете вторых частных производных.

4. Алгоритмы расчета величин частных производных от ГМП в точке М

Рассмотрев порядок расчета величин градиентов и 2-х частных производных слева и справа от точки *M*, остановимся на анализе алгоритмов расчета тех же вариантов частных производных в точке *M*. При этом условимся, что если реализуется расчетный случай, когда $\Delta x_H > \Delta x_K$ или если $\left|x_M - x_H\right| < \left|x_K - x_M\right|$, то точку *M* будем относить к нисходящей ветви кривой $\Delta x(x)$.

Если же имеет место неравенство $\Delta x_H < \Delta x_K$ или если $\left|x_M - x_H\right| > \left|x_K - x_M\right|$, то точку *M* будем относить к восходящей ветви кривой $\Delta x(x)$. В симметричном случае как восходящую, так и нисходящую ветви кривой $\Delta x(x)$ будем заканчивать в ближайших к *M* точках *i*+1 и *i*-1 соответственно. Расчет величин частных производных в точке *M* осуществляем по дополнительному алгоритму для симметричного случая.

4.1. Расчет величин градиентов в точке *M*. Пусть в *i*-й (точка *M*) точке выполняются равенства $\Delta x_i = \Delta x_{i+1}$; $\Delta x_{i-1} = \Delta x_{i+2}$ и т.д. (рис.4).

Для расчета градиентов ГМП используем симметричные соотношения, а при расчете вторых частных производных – минимально асимметричную разностную схему. Для расчета первых производных имеем выражение

$$\frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial x} 2 \sum_{\theta=-(N/2-1)}^{0} \Delta x_{i+\theta} = \sum_{m+1}^{N/2} \left[a_{i+m}\left(f_{i+m} - f_i\right) - a_{i-m}\left(f_{i-m} - f_i\right)\right]. \tag{39}$$

При *N*=2 получаем

$$\frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial x} 2\Delta x_i = a_{i+1}\left(f_{i+1} - f_i\right) - a_{i-1}\left(f_{i-1} - f_i\right). \tag{40}$$

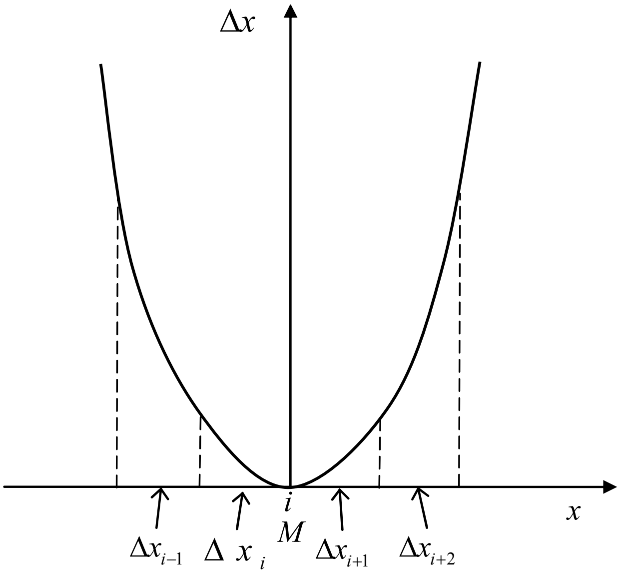

Рис.4. Симметричное изменение переменных шагов $\Delta x(x)$ (для точки минимума) $\Delta x_i = \Delta x_{i+1}$; $\Delta x_{i-1} = \Delta x_{i+2}$.

Разложив переменные $f_{i\pm 1}$ в ряды Тэйлора, будем иметь

$$\frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial x} 2 \cdot \Delta x_i = \left(a_{i+1} \cdot \Delta x_{i+1} + a_{i-1} \Delta x_i\right) \frac{\partial f_i}{\partial x} + \left(a_{i+1} \cdot \Delta x_{i+1}^2 - a_{i-1} \Delta x_i^2\right) \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} + \\ + \left(a_{i+1} \cdot \Delta x_{i+1}^3 + a_{i-1} \Delta x_i^3\right) \frac{1}{6} \frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3}. \tag{41}$$

Отсюда находим:

$$a_{i+1} \cdot \Delta x_{i+1} + a_{i-1} \cdot \Delta x_i = 2 \cdot \Delta x_i, \qquad a_{i+1} \cdot \Delta x_{i+1}^2 - a_{i-1} \cdot \Delta x_i^2 = 0. \tag{42}$$

Учитывая, что $\Delta x_i = \Delta x_{i+1}$, получаем

$$a_{i+1} = a_{i-1} = 1.$$

Для случая симметрично переменных шагов получаем тот же результат, что и при постоянных шагах интегрирования Δx:

$$\frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial x} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2 \Delta x_i} \tag{43}$$

и имеем следующую формулу для оценки точности:

$$\frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial x} = \frac{\partial f_i}{\partial x} + \frac{\Delta x_i^2}{6} \frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3}. \tag{44}$$

Если N=4, то для расчета $\partial \tilde{f}_i / \partial x$ из равенства (39) следует выражение:

$$\frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial x} \cdot 2\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right) = a_{i+2}\left(f_{i+2} - f_i\right) + a_{i+1}\left(f_{i+1} - f_i\right) - a_{i-2}\left(f_{i-2} - f_i\right) + a_{i-1}\left(f_{i-1} - f_i\right). \tag{45}$$

Воспользовавшись разложениями переменных $f_{i\pm 2}$ и $f_{i\pm 1}$ в ряды Тэйлора, для производной $\partial\tilde{f}_i / \partial x$, используя формулу (45), можно записать следующее выражение:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\tilde{f}_i}{\partial x}\cdot 2\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)= \\
&=\left[a_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)+a_{i+1}\Delta x_i+a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)+a_{i-1}\Delta x_i\right]\frac{\partial f_i}{\partial x}+ \\
&+\left[a_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^2+a_{i+1}\Delta x_i^2-a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^2-a_{i-1}\Delta x_i^2\right]\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2}+ \\
&+\left[a_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3+a_{i+1}\Delta x_i^3+a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3+a_{i-1}\Delta x_i^3\right]\frac{1}{6}\frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3}+ \\
&+\left[a_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^4+a_{i+1}\Delta x_i^4-a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^4-a_{i-1}\Delta x_i^4\right]\frac{1}{24}\frac{\partial^4 f_i}{\partial x^4}+ \\
&+\left[a_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^5+a_{i+1}\Delta x_i^5+a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^5+a_{i-1}\Delta x_i^5\right]\frac{1}{120}\frac{\partial^5 f_i}{\partial x^5}.
\end{aligned} \tag{46}$$

Отсюда найдем

$$\begin{aligned}
&a_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)+a_{i+1}\Delta x_i+a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)+a_{i-1}\Delta x_i=2\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right); \\
&a_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^2+a_{i+1}\Delta x_i^2-a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^2-a_{i-1}\Delta x_i^2=0; \\
&a_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3+a_{i+1}\Delta x_i^3+a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3+a_{i-1}\Delta x_i^3=0; \\
&a_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^4+a_{i+1}\Delta x_i^4-a_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^4-a_{i-1}\Delta x_i^4=0.
\end{aligned} \tag{47}$$

Главный определитель Δ_{04} системы уравнений (47) отличен от нуля и равен

$$\Delta_{04}^{(1)}=-4\Delta x_{i-1}^2\cdot\Delta x_i^3\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3\left(\Delta x_{i-1}+2\Delta x_i\right)^2.$$

Коэффициенты $a_{i\pm 2}$ и $a_{i\pm 1}$ удовлетворяют условиям симметрии и определяются выражениями:

$$a_{i+2}=a_{i-2}=-\frac{\Delta x_i^2}{\Delta x_{i-1}\left(\Delta x_{i-1}+2\Delta x_i\right)};\qquad a_{i+1}=a_{i-1}=\frac{\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3}{\Delta x_{i-1}\cdot\Delta x_i\left(\Delta x_{i-1}+2\cdot\Delta x_i\right)}. \tag{48}$$

При N=4 коэффициенты $a_{i\pm 2}$ и $a_{i\pm 1}$ зависят от номера шага и позволяют для расчета $\partial\tilde{f}_i / \partial x$ записать формулу:

$$\frac{\partial\tilde{f}_i}{\partial x}=\frac{1}{2\Delta x_{i-1}\left(2+\dfrac{\Delta x_{i-1}}{\Delta x_i}\right)}\left[\left(1+\frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta x_i}\right)^2\left(f_{i+1}-f_i\right)-\frac{f_{i+2}-f_{i-2}}{1+\dfrac{\Delta x_{i-1}}{\Delta x_i}}\right]. \tag{49}$$

При использовании системы уравнений (47) выражение (46) для $\partial\tilde{f}_i / \partial x$ превращается в формулу:

$$\frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial x} = \frac{\partial f_i}{\partial x} - \frac{\Delta x_i^4}{240}\left(1 + \frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta x_i}\right)^2 \frac{\partial^5 f_i}{\partial x^5}. \tag{50}$$

Так что при N=4 частная производная $\partial \tilde{f}_i / \partial x$ рассчитывается с 4-м порядком точности. Увеличивая N, найдем величины коэффициентов $a_{i\pm m}$ в каждой точке для любого N.

4.2. Расчет величин вторых частных производных в точке *M* для симметричного случая. Для расчета величин $\partial^2 \tilde{f}_i / \partial x^2$ воспользуемся формулой (26), соответствующей минимально асимметричной разностной схеме.

Рассмотрим сначала случай, когда N=2. Используя формулу (26) и разлагая переменные $f_{i\pm1}, f_{i-2}$ в ряды Тэйлора, получим

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \tilde{f}_i}{\partial x^2}\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2 &= b_{i+1}\left(f_{i+1} - f_i\right) + b_{i-1}\left(f_{i-1} - f_i\right) + b_{i-2}\left(f_{i-2} - f_i\right) = \\
&= \left[b_{i+1}\cdot\Delta x_{i+1} - b_{i-1}\cdot\Delta x_i - b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)\right]\frac{\partial f_i}{\partial x} + \\
&+ \left[b_{i+1}\cdot\Delta x_{i+1}^2 + b_{i-1}\cdot\Delta x_i^2 + b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)^2\right]\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} + \\
&+ \left[b_{i+1}\cdot\Delta x_{i+1}^3 - b_{i-1}\cdot\Delta x_i^3 - b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)^3\right]\frac{1}{6}\frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3} + \\
&+ \left[b_{i+1}\cdot\Delta x_{i+1}^4 + b_{i-1}\cdot\Delta x_i^4 + b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)^4\right]\frac{1}{24}\frac{\partial^4 f_i}{\partial x^4}.
\end{aligned} \tag{51}$$

Отсюда находим

$$\begin{aligned}
&b_{i+1}\cdot\Delta x_{i+1} - b_{i-1}\cdot\Delta x_i - b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right) = 0, \\
&b_{i+1}\cdot\Delta x_{i+1}^2 + b_{i-1}\cdot\Delta x_i^2 + b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)^2 = 2\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2, \\
&b_{i+1}\cdot\Delta x_{i+1}^3 - b_{i-1}\cdot\Delta x_i^3 - b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)^3 = 0
\end{aligned} \tag{52}$$

– три уравнения для определения трёх неизвестных $b_{i\pm1}, b_{i-2}$.

Учитывая, что из соображений симметрии $\Delta x_i = \Delta x_{i+1}$, главный определитель данной системы получаем отличным от нуля и равным

$$\Delta_{03} = -2\cdot\Delta x_{i-1}\Delta x_i^3\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)\left(\Delta x_{i-1} + 2\Delta x_i\right).$$

Определители $\Delta_{\theta 3}$ $(\theta = 1,2,3)$, получаемые из главного определителя заменой θ-го столбца правыми частями системы уравнений (52), равны

$$\Delta_{13} = \Delta_{23} = -2\Delta x_{i-1}\Delta x_i\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2\left(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i\right)\left(\Delta x_{i-1} + 2\Delta x_i\right), \qquad \Delta_{33} = 0.$$

Отсюда определяем, что

$$b_{i+1} = b_{i-1} = (\Delta x_i^2)_{cp}^2 / \Delta x_i^2, \qquad b_{i-2} = 0. \tag{53}$$

Но так как $\left(\Delta x_i\right)_{cp} = \dfrac{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}{2} = \Delta x_i$, то $b_{i+1} = b_{i-1} = 1$.

В итоге находим, благодаря использованию условий симметрии, что минимально асимметричная разностная схема превращается в симметричную, коэффициенты b_{i+1} и b_{i-1} равны между собой, а их величины не зависят ни от номера, ни от величины шага Δx_i.

Для оценки точности определения второй частной производной при N=2 получаем выражение

$$\frac{\partial^2 \tilde{f}_i}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} + \frac{\Delta x_i^2}{12} \cdot \frac{\partial^4 f_i}{\partial x^4}. \tag{54}$$

Видим, что при N=2 вторую частную производную находим со 2-м порядком точности. Что касается выражения для расчета второй частной производной, то оно имеет вид

$$\frac{\partial^2 \tilde{f}_i}{\partial x^2} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x_i^2}, \tag{55}$$

то есть имеет место тот же вид, что и при $\Delta x = \text{const}$ [4].

В итоге полученные при N=2 результаты для $\partial^2 \tilde{f}_i / \partial x^2$ оказываются вполне аналогичными таковым для $\partial \tilde{f}_i / \partial x$.

Далее, пусть N=4. Используя формулу (26), записываем

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \tilde{f}_i}{\partial x^2}\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2 = {} & b_{i+2}\left(f_{i+2} - f_i\right) + b_{i+1}\left(f_{i+1} - f_i\right) + b_{i-1}\left(f_{i-1} - f_i\right) + \\ & + b_{i-2}\left(f_{i-2} - f_i\right) + b_{i-3}\left(f_{i-3} - f_i\right).\end{aligned} \tag{56}$$

Разлагая переменные $f_{i\pm1}, f_{i\pm2}, f_{i-3}$ в ряды Тэйлора и подставляя полученные выражения в соотношение (56), сможем записать разложение:

$$\frac{\partial^2 \tilde{f}_i}{\partial x^2}\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2 = \tag{57}$$

$$=\left[b_{i+2}(\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}) + b_{i+1}\Delta x_{i+1} - b_{i-1}\Delta x_i - b_{i-2}(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) - b_{i-3}(\Delta x_{i-2} + \Delta x_{i-1} + \Delta x_i)\right]\frac{\partial f_i}{\partial x} +$$

$$+\left[b_{i+2}(\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2})^2 + b_{i+1}\Delta x_{i+1}^2 + b_{i-1}\Delta x_i^2 + b_{i-2}(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)^2 + b_{i-3}(\Delta x_{i-2} + \Delta x_{i-1} + \Delta x_i)^2\right]\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} +$$

$$+\left[b_{i+2}(\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2})^3 + b_{i+1}\Delta x_{i+1}^3 - b_{i-1}\Delta x_i^3 - b_{i-2}(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)^3 - b_{i-3}(\Delta x_{i-2} + \Delta x_{i-1} + \Delta x_i)^3\right]\frac{1}{6}\frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3} +$$

$$+\left[b_{i+2}(\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2})^4 + b_{i+1}\Delta x_{i+1}^4 + b_{i-1}\Delta x_i^4 + b_{i-2}(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)^4 + b_{i-3}(\Delta x_{i-2} + \Delta x_{i-1} + \Delta x_i)^4\right]\frac{1}{24}\frac{\partial^4 f_i}{\partial x^4} +$$

$$+\left[b_{i+2}(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2})^5+b_{i+1}\Delta x_{i+1}^5-b_{i-1}\Delta x_i^5-b_{i-2}(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i)^5-b_{i-3}(\Delta x_{i-2}+\Delta x_{i-1}+\Delta x_i)^5\right]\frac{1}{120}\frac{\partial^5 f_i}{\partial x^5}+$$

$$+\left[b_{i+2}\left(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}\right)^6+b_{i+1}\Delta x_{i+1}^6+b_{i-1}\Delta x_i^6+b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^6+b_{i-3}\left(\Delta x_{i-2}+\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^6\right]\frac{1}{720}\frac{\partial^6 f_i}{\partial x^6}.$$

Приравняв выражения перед 1, 3, 4 и 5-й производными к нулю, а коэффициент перед второй производной (после деления слева и справа на $(\Delta x_i)_{cp}^2$) – единице, получим систему пяти уравнений для определения пяти неизвестных: $b_{i\pm1}, b_{i\pm2}, b_{i-3}$:

$$\begin{gathered}
b_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)+b_{i+1}\Delta x_i-b_{i-1}\Delta x_i-b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)-b_{i-3}\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}=0,\\
b_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^2+b_{i+1}\Delta x_i^2+b_{i-1}\Delta x_i^2+b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^2+b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^2=2\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2,\\
b_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3+b_{i+1}\Delta x_i^3-b_{i-1}\Delta x_i^3-b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^3-b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^3=0, \qquad (58)\\
b_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^4+b_{i+1}\Delta x_i^4+b_{i-1}\Delta x_i^4+b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^4+b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^4=0,\\
b_{i+2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^5+b_{i+1}\Delta x_i^5-b_{i-1}\Delta x_i^5-b_{i-2}\left(\Delta x_{i-1}+\Delta x_i\right)^5-b_{i-3}\left(\sum_{\theta=-2}^{0}\Delta x_{i+\theta}\right)^5=0.
\end{gathered}$$

При написании уравнений (58) учтены условия симметрии, из которых следует, что $\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}=\Delta x_{i-1}+\Delta x_i$; $\quad \Delta x_{i+1}=\Delta x_i$. При этом

$$\left(\Delta x_i\right)_{cp}=\frac{\Delta x_{i-1}+\Delta x_i+\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i+2}}{4}=\frac{\Delta x_{i-1}+\Delta x_i}{2}.$$

Главный определитель этой системы Δ_{05} отличен от нуля и равен

$$\Delta_{05}=4a^3\cdot\Delta x_i^3\cdot\sigma\left(a^4-\Delta x_i^4\right)\left[a^2\cdot\Delta x_i^2-\sigma^2\left(a^2+\Delta x_i^2\right)+\sigma^4\right],$$

где $\quad a=\Delta x_{i-1}+\Delta x_i$; $\sigma=\Delta x_{i-2}+\Delta x_{i-1}+\Delta x_i$.

Определители $\Delta_{\theta5}\left(\theta=1,2,3,4,5\right)$, получаемые из определения Δ_{05} заменой его θ-го столбца правыми частями уравнений (58), равны

$$\Delta_{15}=\Delta_{45}=4\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2\cdot\Delta x_i^5\cdot a\cdot\sigma\left(a^2-\Delta x_i^2\right)\left[\Delta x_i^2\cdot a^2-\sigma^2\left(\Delta x_i^2+a^2\right)+\sigma^4\right], \qquad (59)$$

$$\Delta_{25}=\Delta_{35}=4\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2\cdot a^5\cdot\Delta x_i\cdot\sigma\left(a^2-\Delta x_i^2\right)\left[\Delta x_i^2\cdot a^2-\sigma^2\left(\Delta x_i^2+a^2\right)+\sigma^4\right], \quad \Delta_{55}=0.$$

Видим, что в рассматриваемом симметричном случае минимально асимметричная разностная схема превращается в симметричную. Коэффициенты $b_{i\pm2}, b_{i\pm1}$ попарно равны между собой и зависят от шагов Δx_{i-1} и Δx_i.

$$b_{i+1}=b_{i-1}=\frac{\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2\cdot a^2}{\Delta x_i^2\left(a^2+\Delta x_i^2\right)};\qquad b_{i+2}=b_{i-2}=\frac{\left(\Delta x_i\right)_{cp}^2\cdot \Delta x_i^2}{a^2\left(a^2+\Delta x_i^2\right)}.$$

Из разложения (57) следует, что при N=4 производная $\partial^2\tilde{f}_i/\partial x^2$ определяется с 4-м порядком точности, поскольку

$$\frac{\partial^2\tilde{f}_i}{\partial x^2}=\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2}+\left(\Delta x_i\right)_g^4\cdot B_i\frac{\partial^6 f_i}{\partial x^6},$$

где $B_i=\frac{b_{i+1}+b_{i+2}(1+n_{-1})^4}{90}$. Увеличивая N, найдем $\partial^2\tilde{f}_i/\partial x^2$ с любой требуемой точностью. При этом минимально асимметричная разностная схема будет всякий раз превращаться в симметричную.

Данное утверждение следует из того, что превращение асимметричного выражения в симметричное имело место и при N=2, и при N=4. Поэтому, в соответствии с правилом математической индукции [5], полученный результат будет иметь место при любом N.

Заключение

1. Показано, что при пересечении скачков ГМП величины шагов интегрирования по пространственным переменным должны быть переменными, немонотонно изменяющимися с переходом через минимум.
2. В качестве закона изменения шагов интегрирования по пространственным переменным можно использовать логистические кривые.
3. Получены выражения для расчета градиентов ГМП и их вторых частных производных при переменных шагах интегрирования по пространственным переменным.
4. Рассмотрены расчетные случаи симметричного и асимметричного изменения шагов интегрирования по пространственным переменным в пределах зоны скачка ГМП.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Н.Е. Кочин, И.А. Кибель, Н.В. Розе.* Теоретическая гидромеханика. Ч.I, II. – М.: Физматлит, 1963, ч.I, 584 с., ч.II, 728 с.;
   N.E. Kochin, I.A. Kibel, N.V. Roze. Teoreticheskaia gidromekhanika. Ch.I, II. – M.: Fizmatlit, 1963, ch.I, 584 s., ch.II, 728 s.
2. *А.М. Липанов.* Теоретическая гидромеханика ньютоновских сред. – М.: Наука, 2011, 551 с.
   A.M. Lipanov. Teoreticheskaia gidromekhanika niutonovskikh sred. – M.: Nauka, 2011, 551 s.
3. *А.М. Липанов.* Логистические кривые и формирование переменных шагов интегрирования по пространственной переменной // Математическое моделирование, 2014, т.26, №5, с.65-78.
   A.M. Lipanov. Logistic Curves and the Formation of Variable Steps of Spatial Variable Integration // Mathematical Models and Computer Simulations, 2014, v.6, N 6, p.631-643.
4. *А.А. Самарский.* Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука, 1983, 553 с.
   A.A. Samarskii. Vvedenie v teoriiu raznostnykh skhem. – M.: Nauka, 1983, 553 s.
5. *И.Н. Бронштейн, К.А. Семендяев.* Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов / Изд. 13, испр. – М.: Наука, 1986, 544 с.
   I.N. Bronshtein, K.A. Semendiaev. Spravochnik po matematike dlia inzhenerov i uchashchikhsia vtuzov / Izd. 13, ispr. – M.: Nauka, 1986, 544 s.

Поступила в редакцию 10.07.2014.