Marek Brandner; Stanislav Míka

Stručná historie metody konečných objemů

*Pokroky matematiky, fyziky a astronomie*, Vol. 59 (2014), No. 1, 44--54

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/143738

# Stručná historie metody konečných objemů

*Marek Brandner, Stanislav Míka, Plzeň*

## 1. Úvod

Metoda konečných objemů je technika pro řešení parciálních diferenciálních rovnic. V tomto článku se pokusíme stručně shrnout její vývoj. Tato metoda spolu s metodou konečných diferencí (v české literatuře zvané též metoda sítí) a metodou konečných prvků patří mezi nejvíce používané a je dnes také obvyklou součástí učebních textů věnovaných numerickým metodám pro parciální diferenciální rovnice. K prudkému rozvoji těchto metod došlo ve druhé polovině 20. století. V tomto článku se zaměříme jen na techniky pro řešení určité podskupiny problémů, které lze vystihnout jako diskretizační techniky pro úlohy dynamiky stlačitelných nevazkých tekutin. Pomineme tak samozřejmě velice rozsáhlé oblasti využití metody konečných objemů (mimo jiné např. úlohy pro rovnice eliptického typu či různé varianty Boltzmannovy transportní rovnice). Tomuto omezení bude podřízen i historický výklad. Nebudeme se tak věnovat, mimo jiné, Vargovým pracím (např. [45]) nebo tzv. Marčukovým identitám (viz [31]), které lze také zařadit do vývoje metody konečných objemů, ani se nebudeme zabývat metodami z monografií [10] a [12].

Zaměříme se tedy na vývoj základních principů metod pro evoluční parciální diferenciální rovnice hyperbolického typu (právě ty slouží k popisu proudění stlačitelných nevazkých tekutin). Uveďme několik příkladů úloh pro tyto rovnice: Hledejme funkci $q = q(x,t)$, která je řešením lineární advekční rovnice s konstantním koeficientem $a \in \mathbb{R}$

$$q_t + aq_x = 0 \tag{1}$$

a splňuje počáteční podmínku $q(x,0) = q_0(x)$, kde $q_0 = q_0(x)$ je daná funkce. Snadno prověříme, že $q(x,t) = q_0(x - at)$. Tato funkce je konstantní na přímkách $x = at + c$. Tyto přímky se nazývají charakteristiky. Úloha je např. modelem popisujícím unášení látky o koncentraci $q$ jednorozměrným kanálem ve směru $x$. Koeficient $a$ představuje rychlost proudění tekutiny. Podobně lze interpretovat úlohu s rovnicí

$$q_t + aq_x + bq_y = 0 \tag{2}$$

pro neznámou funkci $q = q(x,y,t)$ a s koeficienty $a$, $b \in \mathbb{R}$. Pro počáteční podmínku $q(x,y,0) = q_0(x,y)$ dostáváme řešení ve tvaru $q(x,y,t) = q_0(x - at, y - bt)$.

V obecnějších situacích musíme uvažovat vektorovou stavovou funkci $\mathbf{q} = \mathbf{q}(x,t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_0^+ \to \mathbb{R}^m$. Potom analogií (1) je

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{A}\mathbf{q}_x = \mathbf{0}, \tag{3}$$

Doc. Ing. Marek Brandner, Ph.D., Prof. RNDr. Stanislav Míka, CSc., NTIS – Nové technologie pro informační společnost, Katedra matematiky, Fakulta aplikovaných věd ZČU, Univerzitní 22, 306 14 Plzeň, e-mail: `brandner@kma.zcu.cz`, `mika@kma.zcu.cz`

kde $\mathbf{A}$ je daná reálná čtvercová matice řádu $m$. Analogií k (2) je

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{A}\mathbf{q}_x + \mathbf{B}\mathbf{q}_y = \mathbf{0}. \tag{4}$$

Úlohy pro rovnice (1), (2), (3) a (4) jsou velmi zjednodušené speciální důsledky matematických modelů procesů proudění tekutin. Především jde o důsledky bilančních principů formulovatelných takto: časová změna stavové funkce $\mathbf{q} = \mathbf{q}(x,t)$ na každém úseku $\langle x_1, x_2\rangle$ je rovna prostorové změně tokové funkce $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{q})$ v odpovídajícím časovém úseku $\langle t_1, t_2\rangle$, tj.

$$\begin{aligned}&\int_{x_1}^{x_2} [\mathbf{q}(x,t_2) - \mathbf{q}(x,t_1)]\,dx\\ = &\int_{t_1}^{t_2} [\mathbf{f}(\mathbf{q}(x_1,t)) - \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_2,t))]\,dt.\end{aligned} \tag{5}$$

Lokálním důsledkem (5) je

$$\mathbf{q}_t = -[\mathbf{f}(\mathbf{q})]_x. \tag{6}$$

Např. v (1) je $f(q) = aq$.

Pro procesy ve více prostorových dimenzích lze bilanční princip zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned}&\int_{\Omega_B} [\mathbf{q}(\mathbf{x},t_2) - \mathbf{q}(\mathbf{x},t_1)]\,d\mathbf{x}\\ = -&\int_{t_1}^{t_2}\int_{\partial\Omega_B} \mathbf{f}(\mathbf{q}(\mathbf{x},t))\mathbf{n}(\mathbf{x})\,ds\,dt,\end{aligned} \tag{7}$$

kde $\mathbf{q}$ je (vektorová) stavová funkce, $\mathbf{f}$ je (vektorová) toková funkce, $\Omega_B \subset \mathbb{R}^3$ je libovolný bilanční sektor z oblasti $\Omega$, v níž probíhají popisované procesy. Lokálním důsledkem (7) je

$$\mathbf{q}_t = -\operatorname{div}\mathbf{f}(\mathbf{q}). \tag{8}$$

Při přechodu k lokálnímu tvaru se obvykle předpokládá spojitost nebo hladkost funkce $\mathbf{q}$. Pokud však řešení úloh definujeme jako funkci, která splňuje bilanční rovnost typu (5), resp. (7), pak tento předpoklad nepotřebujeme. Pak můžeme připustit i tzv. zobecněná řešení s rázovými vlnami, vlnami zředění a kontaktními nespojitostmi. V případě nelineárních úloh může být řešení nespojité i v případě, že počáteční podmínka hladká je.

## 2. Diferenční aproximace založená na integrální formulaci

Popíšeme vývoj metod především pro řešení nelineárních úloh pro rovnice (6) a (8). Jak bude z dalšího výkladu patrné, metoda konečných objemů v sobě obsahuje bilanční princip vycházející z integrální rovnosti (5), resp. (7). (Pomineme vývoj metod pro lineární úlohy a nebudeme věnovat pozornost ani numerickým problémům s nimi spojeným, např. lineární Richtmyerově stabilitě.)

Pro případ jedné prostorové dimenze zavedeme diskretizaci

$$x_j = j\Delta x, \quad j \in \mathbb{Z}, \quad \Delta x > 0, \quad t_n = n\Delta t, \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad \Delta t > 0,$$

$$x_{j+1/2} = x_j + \Delta x/2,$$

a přibližné řešení označíme

$$\mathbf{Q}_j^n \approx \mathbf{q}_j^n = \mathbf{q}(x_j, t_n),$$

$$\bar{\mathbf{Q}}_j^n \approx \bar{\mathbf{q}}_j^n = \frac{1}{\Delta x} \int\limits_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{q}(x, t_n)\, dx,$$

$\bar{\mathbf{f}}_{j+1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int\limits_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_{j+1/2}, t))\, dt$. Speciálním případem integrální bilance (7) je rekurentní vztah

$$\bar{\mathbf{q}}_j^{n+1} = \bar{\mathbf{q}}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \bar{\mathbf{f}}_{j+1/2}^n - \bar{\mathbf{f}}_{j-1/2}^n \right]. \tag{9}$$

Podstatné je, že tato rekurence kopíruje bilanční princip. Respektuje tak velice dobře „fyzikální podstatu“ popisovaného procesu.

Ještě poznamenejme, že samotný název metoda konečných objemů (spolu se zdůrazněním základních myšlenek) se poprvé objevil v prezentaci A. Jamesona [22] z roku 1977. V českých publikacích je tato metoda také někdy označována jako metoda integrálních identit (pravděpodobně inspirace Marčukovými integrálními identitami, viz [32]).

## 3. První kroky – CFL podmínka a „upwinding“

Úvodem je třeba připomenout, že historicky se první numerické přístupy odvozovaly pro nejjednodušší modely zákonů: pro lineární modely, nejlépe s konstantními koeficienty (tj. pro problémy s advekční rovnicí). Často nepřijatelné výsledky získané těmito metodami při řešení složitějších (nelineárních) úloh vyvolávaly velkou aktivitu v korekcích užívaných diferenčních schémat. Klíčovým poznatkem bylo, že bez vazby na bilanční principy, tj. na příslušné fyzikální zákony, nemá smysl fyzikálně konzistentní numerická schémata odvozovat.

Bouřlivější rozvoj přibližných metod se uskutečnil během druhé světové války a těsně po ní. Některé kroky však byly učiněny již dříve (a souvisely ještě s metodou konečných diferencí). Zmiňme zde především práci [5] tří autorů – R. Couranta, K. Friedrichse a H. Lewyho z roku 1928. V článku je analyzována také vlnová rovnice a objevují se v něm úvahy, které vedou k závěru, že u některých diferenčních schémat nelze časový a prostorový krok volit nezávisle. Výpočty totiž vedou k numerickým hodnotám, jejichž velikost nepřijatelně roste. Použitá schémata jsou nestabilní. Na počest autorů práce [5] se podmínka na omezení délky časového kroku nazývá CFL podmínka. Stojí za zmínku, že CFL podmínka je vlastně „vedlejší produkt“ uvedené práce. Autoři se totiž věnovali zejména otázkám řešitelnosti některých parciálních diferenciálních rovnic.

Zmiňme dále dvě zajímavé metody, které ovlivnily směr dalšího vývoje. První z nich je metoda Courantova–Isaacsonova–Reesové publikovaná v roce 1952 v [6]. Tato metoda vycházela z kvazilineární formulace parciální diferenciální rovnice a k přechodu z jedné časové vrstvy na další využívala poznatků o směrnicích charakteristik. Tento postup je dodnes používán. Nevýhodou této metody je ovšem to, že není konzervativní. To znamená, že zatímco původní formulace představuje zákon zachování, tak příslušné diferenční schéma již zákonem zachování pro přibližné řešení není. Aproximace tedy není fyzikálně konzistentní.

Právě popsaný přístup je dnes často označován jako „upwinding“. Upozorněme ovšem na to, že tento pojem se poprvé objevil v případě metody publikované v knize R. Richtmyera a K. Mortona [37] z roku 1957. Jde o metodu konečných diferencí, v rámci které jsou použity jednostranné poměrné diference. Ty jsou voleny na základě znaménka rychlosti proudící tekutiny (metoda je aplikována na Eulerovy rovnice pro nevazké stlačitelné proudění). V současnosti však implementujeme upwinding v případě Eulerových rovnic jinak. Levé či pravé diference jsou voleny na základě znamének směrnic charakteristik.

## 4. Umělá vazkost a konzervativní tvar

Rozvoj (vojenských) technologií vedl k potřebě řešit složitější úlohy. Máme na mysli výpočty z oblasti jaderných technologií. Problémy proudění tekutin se řešily metodami konečných diferencí, problémy týkající se transportu částic pak metodou Monte Carlo a pomocí difuzní aproximace transportní rovnice. V teoretické rovině se zkoumaly problémy zobecněných řešení a jejich aproximací. Bylo také třeba vyjasňovat i takové pojmy, jako je řád metody. To, co bylo u lineárních úloh jednoduché, se u nelineárních úloh značně komplikovalo.

Již od počátků využívání různých verzí metody konečných diferencí byly zřejmé její nedostatky. Metody, které jsou prvního řádu (pro hladká řešení), příliš „rozmazávají“ rázové vlny a především kontaktní nespojitosti, a metody, které jsou řádu vyššího, pro změnu generují nefyzikální numerické oscilace.

J. von Neumann a R. Richtmyer v publikaci [35] z roku 1950 zkoumali metody nižšího a vyššího řádu s cílem zachovat přednosti metod prvního i vyššího řádu a odstranit jejich nedostatky. Navrhli metodu s přidáním jistého umělého členu do tradičního diskrétního schématu. Tomuto korekčnímu členu přisoudili název umělá vazkost. Vycházeli z poznatku, že v okolí bodů, kde se (přibližné) řešení prudce mění, je třeba viskozitu doplnit. Dosáhli tím toho, že došlo k lokálnímu zhlazení řešení. Lapidárně řečeno: při konstrukci matematického modelu jsme vazkost tekutiny zanedbali, v rámci numerického modelu musíme tento prohřešek jistým způsobem napravit. Autoři navrhli adaptivní metodu. V závislosti na řešení se mění viskozita. Jde však o adaptivitu v diskrétní aproximaci, nikoliv o adaptivitu sítě. Zřejmým důsledkem je nelinearita metody (i v případě lineární úlohy). Metodu lze zjednodušeně chápat tak, že aplikujeme metodu druhého řádu nikoliv na advekční rovnici (1), ale na rovnici

$$q_t + aq_x = [\mu(\Delta x, \Delta t, q, q_x)q_x]_x \,. \tag{10}$$

V 50. letech 20. století si P. D. Lax uvědomil zásadní význam bilanční rovnosti (9) pro odvození výpočetních schémat, kterým pak říkáme konzervativní schémata (viz práce [25], v níž je publikována metoda dnes nazývaná Laxova–Friedrichsova). Konzervativní metodou rozumíme

$$\bar{\mathbf{Q}}_j^{n+1} = \bar{\mathbf{Q}}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\bar{\mathbf{F}}_{j+1/2}^n - \bar{\mathbf{F}}_{j-1/2}^n\right). \tag{11}$$

Sečteme-li výše uvedenou rovnost přes všechna $j$, numerické toky $\bar{\mathbf{F}}_{j+1/2}^n$ se navzájem vyruší. Jde tedy o diferenční aproximaci, která je zákonem zachování pro přibližné řešení. Současně však tato aproximace přispívá ke korektní aproximaci rázových vln a kontaktních nespojitostí (je korektním způsobem aproximována rychlost šíření nespojitosti řešení). Tuto vlastnost přesně vystihuje Laxova–Wendroffova věta publikovaná v roce 1960 v [26]. Konzervativní schéma (11) je diskrétní analogií (9) a přesné tokové funkci $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{q})$ odpovídá numerická toková funkce $\bar{\mathbf{F}}^n_{j+1/2} = \bar{\mathbf{F}}(\bar{\mathbf{Q}}^n_{j-l}, \ldots, \bar{\mathbf{Q}}^n_{j+k})$.

Na základě těchto poznatků byla zkonstruována celá řada adaptivních metod v konzervativním tvaru. K těm se však vrátíme v odstavci 6.

## 5. Godunovova metoda

Metody pro řešení úloh souvisejících s bilančními principy byly také vyvíjeny v bývalém Sovětském svazu. Zásadně k tomu přispěl S. K. Godunov. Touto problematikou se začal intenzívně zabývat v roce 1953. Původně chtěl využít von Neumannovu a Richtmyerovu metodu umělé vazkosti. Uvádí se, že z časových důvodů začal pracovat na variantě, kterou rozpracoval jeho bývalý kolega A. I. Žukov. Ten nevyužíval umělou vazkost, ale různé diferenční metody a zjistil, že případné rozmazání přibližného řešení je způsobeno numerickou vazkostí. Používal pojem první diferenciální aproximace (dnes hovoříme o modifikované rovnici). Protože diferenční metody vyšších řádů generují numerické oscilace, zaměřil se na metody prvního řádu. Žukov formuloval podmínku stability: první diferenciální aproximace je konzervativní právě tehdy, když je odpovídající diskrétní aproximace stabilní. Domníval se, že jde o nutnou a současně postačující podmínku stability. Godunov na základě tohoto chybného závěru vyvíjel metody (konkrétně nekonzervativní metody, jejichž první diferenciální aproximace je konzervativní). Aproximace rázových vln se však šířily nesprávnou rychlostí. Proto pověřil jednoho spolupracovníka, aby realizoval numerické experimenty s různými velikostmi prostorového a časového diskretizačního kroku. Chybu se však nedařilo zmenšovat.

Tato skutečnost vedla Godunova k tomu, že začal používat konzervativní schémata, řešení na každé časové vrstvě aproximoval po částech konstantní funkcí a vyvíjel takové diferenční aproximace, že se rázové vlny šířily korektní rychlostí. Současně vyšla kniha L. D. Landaua a E. M. Lifšice Mechanika kontinua. Zde bylo popsáno řešení Riemannova problému (problém najít zobecněné řešení úlohy se speciální počáteční podmínkou – po částech konstantní funkcí). Godunov doplnil svou metodu o korektní aproximaci vln zředění. Metoda byla popsána v Godunovově disertaci. Nastal ovšem problém s publikací (pro některá periodika příliš mnoho matematiky, pro jiná příliš mechaniky). Na závěr tohoto odstavce zmiňme Godunovovo prohlášení, že metoda nazvaná nyní jeho jménem byla odvozena díky neznalosti Laxova článku a současnému ovlivnění Žukovovými chybnými výsledky.

K četbě doporučujeme krátký článek S. K. Godunova [13] z roku 1957, v němž je v čisté podobě popsán princip metody (po částech konstantní aproximace řešení; přesné splnění zákonů zachování pro tuto aproximaci; splnění CFL podmínky, které zabrání kolizi řešení sousedních Riemannových problémů).

## 6. Přístupy typu fluid transport, funkce typu limiter, TVD metody

V 60. a 70. letech 20. století dochází k výraznému rozvoji jak metod, tak teorie.

Než shrneme konkrétní informace o příspěvcích jednotlivých badatelů, zopakujme, že jejich přístupy jsou již obvykle založeny na integrální formulaci úlohy (5) (která je obecnější). Zmíněnou integrální bilanci neuvažujeme na obecném bilančním sektoru. Použijeme sektory (kontrolní objemy) dané diskretizací. Dostaneme tak rovnost (9), jež představuje zákon zachování na daném bilančním sektoru: Změna množství látky (s hustotou $\mathbf{q} = \mathbf{q}(x,t)$) v segmentu $\left(x_{j-1/2}, x_{j+1/2}\right)$ v časovém intervalu $(t_n, t_{n+1})$ je dána tím, co vteče a vyteče hraničními body $x_{j-1/2}$ a $x_{j+1/2}$ za tento časový interval (funkce $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{q})$ představuje tok). V této formulaci není použita žádná aproximace, má však jeden nedostatek: na $n$-té časové vrstvě máme k dispozici hodnoty integrálních průměrů $\bar{\mathbf{q}}_j^n$. K výpočtu hodnot integrálních průměrů na další časové vrstvě nám však tato data nedostačují. Pro výpočet $\bar{\mathbf{f}}_{j+1/2}^n$ potřebujeme znát bodové hodnoty $\mathbf{q}(x_{j+1/2}, t)$. Proto musíme realizovat tzv. rekonstrukci: z hodnot integrálních průměrů stanovit hodnoty funkce $\mathbf{q}$ v bodech $x_{j+1/2}$. Tím vneseme do postupu aproximaci. Přibližnou integrální bilanci zapíšeme ve tvaru

$$\bar{\mathbf{Q}}_j^{n+1} = \bar{\mathbf{Q}}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left[\bar{\mathbf{F}}_{j+1/2}^n - \bar{\mathbf{F}}_{j-1/2}^n\right]. \tag{12}$$

Algoritmus metody konečných objemů (konkrétně přechod mezi dvěma časovými vrstvami) má tři fáze. V první fázi rekonstruujeme hledanou funkci na základě aproximací jejích integrálních průměrů. Ve druhé fázi hledáme (přibližná) řešení Riemannových problémů

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_t + [\mathbf{f}(\mathbf{q})]_x &= \mathbf{0},\ x \in \mathbb{R},\ t \in (t_n, t_{n+1}), \\ \mathbf{q}(x, t_n) &= \begin{cases} \mathbf{q}_{j+1/2-}, & x < x_{j+1/2}, \\ \mathbf{q}_{j+1/2+}, & x > x_{j+1/2}, \end{cases} \end{aligned} \tag{13}$$

kde $\mathbf{q}_{j+1/2-}$ je hodnota rekonstrukce funkce $\mathbf{q}$ na intervalu $(x_{j-1/2}, x_{j+1/2})$ v čase $t_n$ v bodě $x_{j+1/2}$ a $\mathbf{q}_{j+1/2+}$ je hodnota rekonstrukce funkce $\mathbf{q}$ na intervalu $(x_{j+1/2}, x_{j+3/2})$ v čase $t_n$ v bodě $x_{j+1/2}$. V poslední fázi stanovíme $\bar{\mathbf{F}}_{j+1/2}^n$, tj. aproximace integrálu $\bar{\mathbf{f}}_{j+1/2}^n$, a použijeme (12). Shrnutí algoritmu typu RSA (Reconstruct–Solve–Average):

**Reconstruct:** Aproximace integrálních průměrů hledané funkce se použijí pro konstrukci po částech polynomiální funkce (v daném bilančním sektoru je funkce vždy polynomem).

**Solve:** V časovém intervalu $\langle t_n, t_{n+1}\rangle$ se řeší Riemannovy problémy dané rekonstrukcí v předchozím kroku.

**Average:** Vypočítají se integrální průměry z řešení Riemannových problémů na časové vrstvě $t_{n+1}$ přes jednotlivé bilanční sektory (případně je pro výpočet nových integrálních průměrů využita integrální formulace úlohy).

Před rozšířením algoritmů postavených na právě popsaném schématu se však používaly postupy typu fluid transport původně vyvinuté pro advekční rovnice. Jsou také založeny na představě rozdělení výpočetní oblasti na sektory. V každém bilančním sektoru je v daném čase nějaké množství tekutiny. V rámci každého časového kroku je tekutina mezi jednotlivými sektory transportována vlivem rychlostního pole. Jde o zjednodušenou verzi algoritmu RSA. Tento přístup byl v základní podobě používán v Los Alamos a v Livermore National Laboratories již těsně po 2. světové válce a nazýval se schéma typu donor-cell.

V roce 1973 publikovali J. P. Boris a D. L. Book [1] článek, ve kterém popisují metodu založenou na modifikaci výše uvedeného přístupu. Šlo o techniku nazvanou flux-corrected transport SHASTA (Sharp And Smooth Transport Algorithm). Metoda je založena na korekci numerické tokové funkce tak, aby výpočetní schéma nebylo příliš difuzivní a současně negenerovalo numerické oscilace. Metoda je opět adaptivní – numerická toková funkce se mění v závislosti na datech (přibližném řešení).

Adaptivní přístup použili také A. Harten a G. Zwas v článku [21] z roku 1972 (zde je konzervativní metoda založena na přepínání mezi numerickou tokovou funkcí prvního a druhého řádu). Zmiňme ještě publikace [15] a [4], ve kterých se autoři zaobírají dalšími způsoby konstrukce adaptivních metod. V práci [19] z roku 1983 zavádí A. Harten vlastnost metod zvanou TVD (Total Variation Diminishing), formuluje větu, která slouží k ověření, zda má daná metoda vlastnost TVD, a nazývá se dnes Hartenova, diskutuje problematiku soustav parciálních diferenciálních rovnic hyperbolického typu a otázky konvergence metod k různým typům zobecněných řešení. V článku A. Hartena a P. D. Laxe [18] je problematika dále rozvíjena. V roce 1984 publikuje P. K. Sweby článek [42], ve kterém je široce analyzována problematika možností přepínání mezi diferenčními aproximacemi prvního a druhého řádu. Tyto publikace tvoří dnes základní stavební kameny a poznatky v nich popsané jsou součástí téměř všech učebních textů o metodě konečných objemů.

## 7. Problémy ve více prostorových dimenzích – vše je jinak

Velice složitou otázkou je zobecnění poznatků do více prostorových proměnných. Řada přístupů je založena na co nejjednodušším využití poznatků získaných pro případ jedné prostorové proměnné (např. metoda štěpení). Metody typu fluid transport lze snadno zobecnit pro případ více prostorových proměnných, ale pouze pro jednoduchý případ lineární advekční rovnice. V případě nelineárních rovnic bychom museli umět řešit vícerozměrný Riemannův problém.

Navíc J. B. Goodman a R. J. LeVeque ukázali v práci [14] z roku 1985, že metody s vlastností TVD jsou ve více prostorových dimenzích nejvýše prvního řádu. To vedlo jednak ke hledání jiných vhodných kritérií stability (citujme např. práci A. Jamesona [23]), jednak ke snaze vyvíjet ryze multidimenzionální přístupy (zde uveďme např. [29], [3], [46], [43]). Některé z metod již však nelze zařadit přímo do skupiny konečných objemů. Zde máme na mysli například metody distribuce reziduí (RDS – Residual Distribution Schemes [7]). První práci v tomto směru publikoval P. L. Roe (viz [39]).

Důležitou složkou řešení problémů ve více dimenzích je i rekonstrukce. Tu lze také pochopitelně rozštěpit na posloupnost jednodimenzionálních rekonstrukcí. V řadě případů je však nutné použít ryze vícedimenzionální postupy rekonstrukce. Navíc lze v případě více prostorových dimenzí zpochybnit i vhodnost použití polynomů.

Co se týče metody konečných objemů aplikované na řešení stlačitelného proudění ve více prostorových dimenzích na obecných nestrukturovaných sítích, můžeme čtenáře odkázat na monografie [10], [11] a [12].

## 8. Techniky rekonstrukce – od TVD k ENO a TPS

Nyní budeme věnovat pozornost technikám rekonstrukce. Godunovovu metodu lze popsat také tak, že jde o přístup, který využívá přesné řešení Riemannových problémů a rekonstrukci pomocí po částech konstantní funkce. V již zmíněném článku B. van Leera [15] z roku 1979 byla navržena po částech lineární rekonstrukce zajišťující splnění vlastnosti TVD. S. Osher a S. Chakravarthy dokázali v článku [36] z roku 1984, že metody, které splňují podmínku TVD, mají tu vlastnost, že řešení degeneruje na aproximaci prvního řádu i v bodech, ve kterých nabývá hladkého extrému. Návrh, jak tuto nevýhodu odstranit, byl publikován v článku A. Hartena a S. Oshera [20] z roku 1987. Byla zde totiž navržena rekonstrukce typu ENO (Essentially Non Oscillatory). Tato rekonstrukce je založena na generování více polynomiálních rekonstrukcí nad jedním bilančním sektorem. Vybrána je pak ta, která nejméně osciluje. Tento přístup pak byl dál rozvinut v sérii článků, z nichž citujeme alespoň [16]. Podobný postup byl publikován v textu [40]. Zde byla zavedena tzv. TVB rekonstrukce (Total Variation Bounded). V roce 1994 publikovali X. D. Liu, S. Osher a T. Chan článek [30], ve kterém navrhují WENO rekonstrukci (Weighted ENO). Zde se postupuje obdobně jako v případě ENO rekonstrukce. Výsledná rekonstrukce je ale váženým průměrem jednotlivých polynomiálních rekonstrukcí.

Ještě komplikovanější je problematika ve více prostorových dimenzích. Pokud se problém nerozštěpí na pomocné jednodimenzionální problémy, je potřeba realizovat vícerozměrnou rekonstrukci. Zde je otázkou, zda je nejvhodnější volbou polynom. Takové úvahy pak vedou např. k použití radiálních bázových funkcí a TPS (Thin Plate Splines), jak je popsáno např. v [41].

## 9. Přibližné Riemannovy řešiče – mezi Godunovovou metodou a centrálními metodami

Jak jsme zmínili, součástí Godunovovy metody je přesné řešení Riemannových problémů. To je v případě soustav parciálních diferenciálních rovnic velice komplikovaná úloha (a pouze v některých případech ji lze řešit analyticky). Z tohoto důvodu byla vyvinuta celá řada tzv. přibližných Riemannových řešičů. Použití slova přibližný není v tomto případě úplně vhodné: jde spíše o zjednodušené Riemannovy řešiče. Vzhledem k tomu, že se používá relativně jemná diskretizace, lze ve většině případů odděleně zachytit jednotlivé typy nespojitostí. Navíc jsou pro výpočet v dalším časovém kroku použity integrální průměry, nikoliv celá struktura řešení problému. Použití přesných řešení Riemannových problémů je tak vlastně nadbytečné.

Dále uvedeme stručný přehled přibližných Riemannových řešičů. V roce 1980 publikovali B. Engquist a S. Osher článek [9], ve kterém popsali přibližný řešič, který dnes nese jejich jméno. Ve skalárním případě se liší tento řešič od přesného pouze v případě transsonické rázové vlny. Jeho výhodou také například je, že je možné jej relativně snadno využít i v případě implicitních metod. V roce 1981 publikoval P. L. Roe článek [38], ve kterém popsal speciální linearizaci nelineárního Riemannova problému takovou, že je zachována rychlost šíření samostatné rázové vlny (v tomto případě je stejná jako u přesného řešení Riemannova problému). V článku je popsán i postup, jak linearizaci stanovit. A. Harten, P. D. Lax a B. van Leer publikovali práci [19], ve které navrhují přibližné řešení Riemannova problému, které má pouze jeden mezistav (na rozdíl od přesného řešení, které jich může obsahovat více). Tento řešič zaručuje nezápornost těch složek řešení, které jsou nezáporné v případě přesného řešení. Autoři také studují konvergenci k zobecněnému řešení a analyzují i další přibližné Riemannovy řešiče. V roce 1988 B. Einfeldt publikoval text [8], ve kterém navrhuje vylepšení HLL (Hartenova–Laxova–Leerova) řešiče. Jde o kombinaci HLL a Roeova řešiče: je zde zaručeno zachování nezápornosti a případná konvergence k entropickému řešení, současně jsou však lépe (ostřeji) aproximovány rázové vlny.

Kromě vývoje a analýzy dalších Riemannových řešičů došlo k rozvoji metod, které neobsahují Riemannovy řešiče. Nejjednodušším případem takové metody je Laxova–Friedrichsova metoda (založená na centrálních diferencích). Uvedeme zde alespoň první práci v této oblasti bádání: článek H. Nessyahua a E. Tadmora [34] z roku 1990. Myšlenka těchto metod je založena na rekonstrukci, která je nehladká uvnitř bilančních sektorů, nikoliv na jejich hranici.

## 10. Závěr

Metoda konečných objemů je dnes základem řady výpočetních softwarů. Současně se nadále rozvíjí jak po teoretické stránce, tak co se týče využití v různých aplikačních oblastech. Současně jsou některé komponenty metody (např. přibližné Riemannovy řešiče) používány v jiných přístupech – jmenujme např. nespojitou Galerkinovu metodu, která získává stále větší popularitu, a metody typu RDS (Residual Distribution Schemes). Současně metoda konečných objemů absorbuje přístupy používané v jiných oblastech.

Podrobnější přehled o zde popsaných metodách lze získat v českojazyčných publikacích [2] a [33].

**Poděkování:** Tato práce byla podpořena projektem CZ.1.05/1.1.00/02.0090.

L i t e r a t u r a

[1] Boris, J. P., Book, D. L.: *Flux-corrected transport I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works.* J. Comput. Phys. *11* (1973), 38–69.

[2] Brandner, M., Egermaier, J., Kopincová, H.: *Numerické metody pro řešení evolučních parciálních diferenciálních rovnic.* VŠB-TUO, ZČU, 2012. Dostupné z: `http://mi21.vsb.cz/`

[3] Colella, P.: *Multidimensional upwind methods for hyperbolic conservation law.* J. Comput. Phys. *87* (1990), 171–200.

[4] Colella, P., Woodward, P. R.: *The piecewise parabolic method (PPM) for gasdynamical simulations.* J. Comput. Phys. *54* (1984), 174–201.

[5] Courant, R., Friedrichs, K., Lewy, H.: *Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik.* Math. Ann. *100* (1928), 32–74.

[6] Courant, R., Isaacson, E., Rees, M.: *On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences.* Comm. Pure Appl. Math. *5* (1952), 243–255.

[7] Deconinck, H., Paillere, H., Struijs, R., Roe, P. L.: *Multidimensional upwind schemes based on fluctuation-splitting for systems of conservation laws*. Comput. Mech. *11* (1993), 323–340.

[8] Einfeldt, B.: *On Godunov-type methods for gas dynamics*. SIAM J. Numer. Anal. *25* (1988), 294–318.

[9] Engquist, B., Osher, S.: *One-sided difference schemes and transonic flow*. Proc. Nat. Acad. Sci. *77* (1980), 3071–3074.

[10] Eymard, R., Gallouët, T., Herbin, R.: *Finite volume methods*. Handbook of Numerical Analysis, P. G. Ciarlet and J. L. Lions (eds.), North-Holland/Elsevier, Amsterdam, 2000, Vol. VII, 717–1020.

[11] Feistauer, M.: *Mathematical methods in fluid dynamics*. Longman Scientific and Technical, Harlow, 1993.

[12] Feistauer, M., Felcman, J., Straškraba, I.: *Mathematical and computational methods for compressible flow*. Clarendon Press, Oxford, 2003.

[13] Godunov, S. K.: *Raznostnyj metod rasčeta udarnych voln*. Uspechi Mat. Nauk *12* (1957), 176–177.

[14] Goodman, J. B., LeVeque, R. J.: *On the accuracy of stable schemes for 2D scalar conservation laws*. Math. Comput. *45* (1985), 15–21.

[15] Harten, A.: *High resolution schemes for hyperbolic conservation laws*. J. Comput. Phys. *49* (1983), 357–393.

[16] Harten, A., Engquist, B., Osher, S., Chakravarthy, S. R.: *Uniformly high order accurate essentially nonoscillatory schemes, III*. J. Comput. Phys. *71* (1987), 231–303.

[17] Harten, A., Hyman, J. M., Lax, P. D.: *On finite-difference approximations and entropy conditions for shocks*. Comm. Pure Appl. Math. *29* (1976), 297–322.

[18] Harten, A., Lax, P. D.: *On a class of high resolution total-variation-stablefinite-difference schemes*. SIAM J. Numer. Anal. *21* (1984), 1–23.

[19] Harten, A., Lax, P. D., van Leer, B.: *On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws*. SIAM Rev. *25* (1983), 35–61.

[20] Harten, A., Osher, S.: *Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes, I*. SIAM J. Numer. Anal. *24* (1987), 279–309.

[21] Harten, A., Zwas, G.: *Self-adjusting hybrid schemes for shock computations*. J. Comput. Phys. *9* (1972), 568–583.

[22] Jameson, A.: *Numerical calculation of transonic flow past a swept wing by a finite volume method*. Proc. Third IFIP Symposium on Computing Methods in Applied Sciences and Engineering, Part II, Versailles, December 1977, R. Glowinski, J. L. Lions (eds.), Lect. Not. Phys. *91* (1979), 125–148.

[23] A. Jameson: *Positive schemes and shock modelling for compressible flows*. Proceedings of 8th Finite Elements in Fluids Conference, Barcelona, September 1993, Internat. J. Numer. Methods Fluids *20* (1995), 743–776.

[24] Lax, P. D.: *Nonlinear partial differential equations and computing*. SIAM Rev. *11* (1969), 7–19.

[25] Lax, P. D.: *Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation*. Comm. Pure Appl. Math. *7* (1954), 159–193.

[26] Lax, P. D., Wendroff, B.: *Systems of conservation laws*. Comm. Pure Appl. Math. *13* (1960), 217–237.

[27] van Leer, B.: *Towards the ultimate conservative difference scheme*. J. Comput. Phys. *32* (1979), 101–136.

[28] van Leer, B.: *Upwind and high-resolution methods for compressible flow: from donor cell to residual-distribution schemes*. Comm. Comput. Phys. *1* (2006), 192–206.

[29] LeVeque, R. J.: *Simplified multi-dimensional flux limiter methods*. Numerical Methods for Fluid Dynamics *4*, M. J. Baines and K. W. Morton (eds.), Oxford Univ. Press, Oxford (1993), 175–190.

[30] Liu, X. D., Osher, S., Chan, T.: *Weighted essentially non-oscillatory schemes*. J. Comput. Phys. *115* (1994), 200–212.

[31] Marčuk, G. I.: *Metody rasčota jaděrnych reaktorov*. Gosatomizdat, Moskva, 1961.

[32] Míka, S., Přikryl, P.: *Numerické metody řešení obyčejných diferenciálních rovnic*. ZČU, Plzeň, 1994.

[33] Míka, S., Přikryl, P., Brandner, M.: *Speciální numerické metody. Numerické metody řešení okrajových úloh pro diferenciální rovnice*. Vydavatelský servis, Plzeň, 2006.

[34] Nessyahu, H., Tadmor, E.: *Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws*. J. Comput. Phys. *87* (1990), 408–463.

[35] von Neumann, J., Richtmyer, R.: *A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks*. J. Appl. Phys. *21* (1950), 232–237.

[36] Osher, S., Chakravarthy, S.: *High resolution schemes and the entropy condition*. SIAM J. Numer. Anal. *21* (1984), 955–984.

[37] Richtmyer, R., Morton, K.: *Difference methods for initial-value problems*. Interscience, New York, 1957.

[38] Roe, P. L.: *Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes*. J. Comput. Phys. *43* (1981), 357–372.

[39] Roe, P. L.: *Fluctuations and signals – a framework for numerical evolution problems*. Numerical Methods for Fluid Dynamics, K. W. Morton, M. J. Baines (eds.), Academic Press, 1982, 219–257.

[40] Shu, C. W.: *TVB uniformly high-order schemes for conservation laws*. Math. Comp. *49* (1987), 105–121.

[41] Sonar, T.: *Optimal recovery using thin plate splines in finite volume methods for the numerical solution of hyperbolic conservation laws*. IMA J. Numer. Anal. *16* (1996), 549–581.

[42] Sweby, P. K.: *High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws*. SIAM J. Numer. Anal. *21* (1984), 995–1011.

[43] Toro, E. F.: *Riemann problems and the WAF method for the two-dimensional shallow water equations*. College of Aeronautics Report No. 9005, England, 1990.

[44] Towers, J. D.: *TVD schemes for two-dimensional scalar conservation laws*. Conservation Laws Preprint Server, 2001. Dostupné z: `http://www.math.ntnu.no/conservation/2001/001.html`

[45] Varga, R. S.: *Numerical solution of the two-group diffusion equations in x-y geometry*. IRE Trans. Nuclear Sci. *4* (1957), 52–62.

[46] Zalesak, S. T.: *Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids*. J. Comput. Phys. *31* (1979), 335–362.