УДК 519.63.4:532.51.5

МЕТОД КОЛЛОКАЦИЙ И НАИМЕНЬШИХ НЕВЯЗОК ДЛЯ ТРЕХМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ–СТОКСА

В. П. Шапеев¹, Е. В. Ворожцов², В. И. Исаев³, С. В. Идимешев⁴

Метод коллокаций и наименьших невязок, предложенный ранее для численного решения двумерных уравнений Навье–Стокса, описывающих стационарные течения вязкой несжимаемой жидкости, обобщен на трехмерный случай. В реализованном варианте метода решение ищется в виде разложения по базисным соленоидальным функциям. Для коэффициентов разложения в каждой ячейке расчетной сетки получается переопределенная система линейных алгебраических уравнений, которая решается методом вращений. Для ускорения сходимости итерационного процесса предложен новый алгоритм, основанный на подпространствах Крылова. Результаты верификации метода подтверждают второй порядок сходимости для составляющих вектора скорости. Представлены результаты решения эталонной задачи о течении в кубической каверне с движущейся крышкой для чисел Рейнольдса Re = 100 и Re = 1000. Показано, что полученные результаты весьма близки по точности к наиболее точным результатам, полученным другими авторами с помощью различных численных методов высокой точности. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (код проекта 13–01–00227).

> Статья посвящается стопятидесятилетию А. Н. Крылова

Ключевые слова: трехмерные уравнения Навье–Стокса, метод коллокаций и наименьших невязок, течение в кубической каверне, переопределенная линейная система, подпространства Крылова.

1. Введение. Несмотря на заметный прогресс, достигнутый в течение последних двадцати лет в области разработки новых эффективных численных методов интегрирования уравнений Навье–Стокса, описывающих течения вязких несжимаемых жидкостей, решение этих уравнений, особенно для больших чисел Рейнольдса, все еще остается трудной вычислительной задачей. В этой связи необходима разработка новых численных методов решения указанных уравнений.

Численное решение уравнений Навье–Стокса существенно упрощается, если эти уравнения дискретизируются на равномерной прямоугольной сетке в декартовых координатах. Такие сетки удобно использовать при решении задач в областях прямоугольной формы. Однако для многих прикладных задач характерно наличие криволинейных границ. В таких случаях часто используются другие типы сеток: криволинейные сетки, структурированные и неструктурированные треугольные и многоугольные сетки. Хотя такие сетки упрощают реализацию граничных условий, их применение ведет к новым трудностям, таким как дополнительные (метрические) члены в уравнениях, дополнительные интерполяции, шаблоны увеличенного размера и др. [1]. В течение последнего десятилетия произошло дальнейшее существенное развитие нового метода численного решения уравнений Навье–Стокса в областях сложной геометрии метода погруженных границ (МПГ). В этом методе расчет течения газа осуществляется на прямоугольной сетке, а криволинейная граница трактуется как поверхность раздела. Обзор некоторых реализаций МПГ имеется в [2–4]. Метод погруженных границ существенно расширил область применения декартовых прямоугольных сеток при численном решении прикладных задач динамики несжимаемых жидкостей.

Проекционные конечно-разностные методы [5–7] получили широкое распространение при численном решении уравнений Навье–Стокса несжимаемых жидкостей. Одной из проблем этих методов является правильный выбор граничных условий для вспомогательных переменных для того, чтобы получить

(с) Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ им. М. В. Ломоносова

¹ Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, ул. Институтская, 4/1, 630090, Новосибирск; гл. науч. сотр.; Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 2, 630090, Новосибирск, профессор, e-mail: vshapeev@ngs.ru

² Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, ул. Институтская, 4/1, 630090, Новосибирск; вед. науч. сотр., e-mail: vorozh@itam.nsc.ru

³ Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 2, 630090, Новосибирск, ассистент, e-mail: issaev.vadim@gmail.com

⁴ Институт вычислительных технологий СО РАН, пр. Лаврентьева, 6, 630090, Новосибирск; аспирант, e-mail: idimeshev@gmail.com

численное решение, имеющее второй порядок точности. Еще одной проблемой является необходимость решения уравнения Пуассона для поправки давления на каждом временном шаге [8].

В методе искусственной сжимаемости (ИС) [9] нет необходимости решать уравнение Пуассона для поправки давления, потому что в левую часть уравнения неразрывности вводится производная по времени от давления. В результате вся система уравнений Навье–Стокса становится системой эволюционного типа, и тогда для ее численного интегрирования можно применять методы, разработанные для задач динамики сжимаемого газа. ИС-метод имеет недостаток, состоящий в том, что он требует подбора ИС-параметра. При его неправильном выборе имеет место либо медленная сходимость, либо расходимость [10, 11].

Метод коллокаций и наименьших невязок (КНН) для численного решения систем уравнений в частных производных был впервые реализован в [12] при решении краевых задач для уравнений Стокса. (Выбор названия метода связан с его основными отличиями от других методов и будет ясен из дальнейшего изложения.) Метод КНН был обобщен в [13] на случай численного решения двумерных уравнений Навье–Стокса несжимаемой жидкости. Достоинством метода и его основным отличием от других методов является то, что в нем на решении достигается минимум функционала невязки уравнений задачи. Кроме того, в нем не используются при аппроксимации исходных уравнений задачи какие-либо искусственные дополнительные слагаемые, влияние которых на точность решения задачи зачастую невозможно оценить.

Еще одним достоинством реализованного варианта КНН-метода по сравнению с разностными методами дробных шагов и методом искусственной сжимаемости является то, что он не требует численного решения уравнения неразрывности, потому что оно удовлетворяется тождественно в любой пространственной точке за счет подходящего выбора базисных функций. Как указывалось в [13], порядок аппроксимации КНН-метода можно повысить путем добавления в базис многочленов более высокой степени. Однако при выводе формул КНН-метода для численного решения уравнений Навье–Стокса требуются весьма трудоемкие аналитические вычисления. Их выполнение вручную весьма затруднительно, поэтому здесь эффективно применение символьных вычислений на компьютере с помощью имеющихся систем компьютерной алгебры (СКА). Использование СКА очень полезно при разработке и исследовании новых численных методов. В [14–16] были представлены некоторые подходы к применению СКА для построения и исследования численных методов решения краевых задач для уравнений в частных производных. Применение СКА при построении разностных схем для уравнений Навье–Стокса рассматривалось также в работах [17, 18].

Для вывода расчетных формул КНН-метода в [13] применялись СКА REDUCE и Maple. Скорость численных расчетов была оптимизирована в [13] путем оптимизации последовательности арифметических операций с помощью СКА, а затем оптимизированные формулы КНН-метода импортировались из СКА-программы в программу, написанную на языке С.

В работе [19] применялась система *Mathematica* для получения всех основных расчетных формул метода КНН для трехмерных уравнений Навье–Стокса. Оптимизированные формулы КНН-метода импортировались из *Mathematica*-программы в программу, написанную на языке Фортран-90.

Метод КНН реализован в [13] для двумерных уравнений Навье–Стокса в случае квадратных ячеек пространственной расчетной сетки. В работах [20, 21] метод КНН был обобщен на случай прямоугольных ячеек сетки в плоскости двух пространственных переменных. В [21] были представлены варианты КННметода, имеющие порядок точности от 2 до 8. Авторы [21] смогли получить своим КНН-методом вихри третьего порядка малости в цепочке Моффата в двумерной эталонной для уравнений Навье–Стокса задаче о течении в каверне с движущейся крышкой для числа Рейнольдса Re = 1000. В работах [20–22] было проведено детальное сравнение результатов численного решения двумерной задачи о каверне с движущейся крышкой и было показано, что полученные результаты не уступают по точности наиболее точным результатам, полученным другими авторами [23–26] с помощью различных численных методов высокой точности.

Ниже мы обобщаем КНН-метод работы [21] на случай трех пространственных переменных. Статья организована следующим образом. В разделе 2 дается общее описание метода КНН: осуществляется линеаризация по Ньютону уравнений Навье–Стокса, вводятся соленоидальные базисные функции, формулируются условия коллокации и согласования. Для ускорения сходимости итераций в разделе 3 предлагается применять в рамках метода КНН новый вариант метода, основанного на подпространствах Крылова. В разделе 4 осуществлена верификация разработанного метода на трехмерном тесте, для которого известно точное решение уравнений Навье–Стокса. И наконец, в разделе 5 представлены результаты расчетов течения вязкой несжимаемой жидкости в кубической каверне с движущейся крышкой для чисел Рейнольдса Re = 100 и Re = 1000, которые сравниваются с наилучшими по точности решениями других авторов.

2. Описание метода КНН.

2.1. Постановка задачи. Рассмотрим краевую задачу для системы стационарных уравнений Навье– Стокса

$$(\boldsymbol{V}\cdot\nabla)\boldsymbol{V} + \nabla p = \frac{1}{\operatorname{Re}}\Delta\boldsymbol{V} - \boldsymbol{f},\tag{1}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{V} = 0, \quad (x_1, x_2, x_3) \in \Omega, \tag{2}$$

$$V\big|_{\partial\Omega} = g, \tag{3}$$

которые описывают течение вязкой нетеплопроводной несжимаемой жидкости в области Ω с границей $\partial\Omega$, x_1, x_2, x_3 — декартовы пространственные координаты. В уравнениях(1) и (2) $\mathbf{V} = \mathbf{V}(x_1, x_2, x_3)$ вектор скорости, имеющий компоненты $v_1(x_1, x_2, x_3), v_2(x_1, x_2, x_3), v_3(x_1, x_2, x_3)$ вдоль осей x_1, x_2, x_3 ; $p = p(x_1, x_2, x_3)$ — давление, $\mathbf{f} = (f_1, f_2, f_3)$ — заданная вектор-функция, Re — число Рейнольдса, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}, (\mathbf{V} \cdot \nabla) = v_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial}{\partial x_3}$. Система из четырех уравнений (1) и (2) решается при краевых условиях Дирихле (3), где $\mathbf{g} = \mathbf{g}(x_1, x_2, x_3) = (g_1, g_2, g_3)$ — заданная вектор-функция.

По аналогии с двумерным случаем [21] на давление накладывается условие

$$\int_{\Omega} p \, dx_1 \, dx_2 \, dx_3 = 0,\tag{4}$$

которое справедливо при отсутствии источников и стоков в области Ω [27].

2.2. Локальные координаты и базисные функции. В дальнейшем рассматривается в качестве пространственной области Ω куб

$$\Omega = \{ (x_1, x_2, x_3), 0 \leqslant x_i \leqslant X, i = 1, 2, 3 \},$$
(5)

где X > 0 — заданная длина ребра куба. В задаче (1)–(5) пространственная расчетная область (5) дискретизируется сеткой с кубическими ячейками $\Omega_{i,j,k}$, $i, j, k = 1, \ldots, I$, где I — заданное число ячеек на каждой из осей $x_1, x_2, x_3, I \ge 1$. Решение ищется на этой сетке в виде кусочно-гладкой функции. Для записи формул метода КНН удобно ввести локальные координаты y_1, y_2, y_3 в каждой ячейке $\Omega_{i,j,k}$. Зависимость локальных координат от глобальных пространственных переменных x_1, x_2, x_3 определяется соотношениями $y_m = \frac{1}{h} (x_m - x_{m,i,j,k}), m = 1, 2, 3,$ где $x_{m,i,j,k}$ — значение координаты x_m в геометрическом центре ячейки $\Omega_{i,j,k}$, а h — половина длины ребра кубической ячейки $\Omega_{i,j,k}$. Тогда локальные координаты меняются в интервале $y_m \in [-1, 1]$. Введем обозначения

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}(y_1, y_2, y_3) &= \boldsymbol{V}(hy_1 + x_{1,i,j,k}, hy_2 + x_{2,i,j,k}, hy_3 + x_{3,i,j,k}), \\ p(y_1, y_2, y_3) &= p(hy_1 + x_{1,i,j,k}, hy_2 + x_{2,i,j,k}, hy_3 + x_{3,i,j,k}). \end{aligned}$$

В результате этой замены переменных уравнения Навье-Стокса принимают вид

$$\Delta u_m - \operatorname{Re} \cdot h\left(u_1 \frac{\partial u_m}{\partial y_1} + u_2 \frac{\partial u_m}{\partial y_2} + u_3 \frac{\partial u_m}{\partial y_3} + \frac{\partial p}{\partial y_m}\right) = \operatorname{Re} \cdot h^2 f_m, \quad m = 1, 2, 3;$$

$$\frac{1}{h}\left(\frac{\partial u_1}{\partial y_1} + \frac{\partial u_2}{\partial y_2} + \frac{\partial u_3}{\partial y_3}\right) = 0,$$

$$+ \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_3^2}.$$

$$(6)$$

Основная идея метода состоит в использовании метода коллокаций в сочетании с методом наименьших невязок для получения численного решения. Такой комбинированный метод мы называем методом "коллокаций и наименьших невязок". Одной из причин использования этой комбинации было то, что применение метода наименьших невязок часто улучшает свойства численного метода. В свою очередь, метод коллокаций прост в реализации и дает хорошие результаты при решении краевых задач как для линейных, так и нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений [28].

Следуя [21], линеаризуем по Ньютону уравнения Навье–Стокса (6) для m = 1, 2, 3:

$$\xi \Big[\Delta u_m^{s+1} - (\operatorname{Re} \cdot h) \Big(u_1^s u_{m,y_1}^{s+1} + u_1^{s+1} u_{m,y_1}^s + u_2^s u_{m,y_2}^{s+1} + u_2^{s+1} u_{m,y_2}^s + u_3^s u_{m,y_3}^{s+1} + u_3^{s+1} u_{m,y_3}^s + p_{y_m}^{s+1} \Big) \Big] = \xi F_m.$$

$$(7)$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial y_1^2}$

Здесь s — номер итерации по нелинейности, $s = 0, 1, 2, \dots, F_m = \operatorname{Re}\left[h^2 f_m - h\left(u_1^s u_{m,y_1}^s + u_2^s u_{m,y_2}^s + u_3^s u_{m,y_3}^s\right)\right]$,

 $u_{m,y_l} = \frac{\partial u_m}{\partial y_l}, \ p_{y_m} = \frac{\partial p}{\partial y_m}, \ l, \ m = 1, 2, 3, \ \xi$ — положительный параметр, задаваемый пользователем. Как будет показано ниже на примерах расчетов, оптимальный подбор этого параметра позволяет ускорять сходимость итерационного метода.

Теперь представим приближенное решение в каждой ячейке $\Omega_{i,j,k}$ в виде линейной комбинации базисных вектор-функций φ_l :

$$(u_1^s, u_2^s, u_3^s, p^s)^{\mathrm{T}} = \sum_l b_{i,j,k,l}^s \varphi_l,$$
(8)

Таблица 1

где верхний индекс T обозначает операцию транспонирования. Базисные функции φ_l даны в табл. 1. Для аппроксимации составляющих скорости используются многочлены второй степени по переменным *y*₁, *y*₂, *y*₃, а для аппроксимации давления — многочлены первой степени. Базисные функции для составляющих скорости являются соленоидальными, т.е. div $\varphi_l = 0$. Благодаря этому уравнение неразрывности удовлетворяется тождественно в каждой ячейке. Использование соленоидального базиса уменьшает число неизвестных в ячейке с 34 до 30. Такое снижение числа неизвестных приводит к заметной экономии машинного времени.

 y_1 y_2 y_3 $-y_2$ φ_l y_1 y_2 y_1 $-y_3$ y_2 l y_{1}^{2} y_{1}^{2} y_{2}^{2} $-2y_1y_2$ $-2y_1y_3$ y_{1}^{2} $-2y_1y_2$ y_{2}^{2} φ_l $y_1 y_3$ y_3 y_{1}^{2} y_{3}^{2} $2y_1y_3$ $y_1 y_2$ l y_{3}^{2} $y_{2}y_{3}$ y_{2}^{2} y_{3}^{2} $-2y_2y_3$ φ_l y_{2}^{2} y_{3}^{2} $-2y_2y_3$ y_1 y_2 y_3

2.3. Вывод переопределенной системы из условий коллокации и согласования. Метод КНН существенно отличается от других методов решения краевых задач для дифференциальных уравнений тем, что его реализация сводится к решению переопределенных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). При этом на решении, полученном методом КНН, достигается минимум функционала невязки уравнений задачи. Возьмем ячейку $\Omega_{i,i,k}$ и зададим в ней точки коллокации. Количество этих точек и их расположение внутри ячейки задаются пользователем, и это может делаться различными способами. Мы реализовали в своей компьютерной программе четыре варианта задания координат точек коллокации. Обозначим через N_c число точек коллокации внутри каждой ячейки. В случае, когда $N_c = 6$, координаты точек коллокации таковы: $(\pm \omega, 0, 0)$, $(0, \pm \omega, 0)$, $(0, 0, \pm \omega)$, где ω – задаваемое пользователем значение в интервале $0 < \omega < 1$. На рис. 1 точки коллокации показаны черными кружками, при этом $\omega = 1/2$. Тонкими линиями на рис. 1а соединены пары точек коллокации, положения которых симметричны относительно начала локальных координат (0,0,0). На рис. 16 показано расположение точек коллокации при $N_c = 8$, при этом локальные координаты этих точек имеют вид $(\pm \omega, \pm \omega, \pm \omega)$, а при $\omega = 1/2$ указанные точки лежат в серединах полудиагоналей кубической ячейки, начерченных тонкими черными линиями на рис. 1б.

В случае $N_c = 14$ координаты точек коллокации задавались следующим образом: расположение первых восьми точек было взято таким же, как на рис. 16, а координаты следующих шести точек задавались

Вид базисных функций φ_l

по формулам $(\pm \omega, 0, 0), (0, \pm \omega, 0), (0, 0, \pm \omega)$. При этом каждая из трех пар этих точек соединена на рис. 1в тонкими линиями, чтобы можно было отличить эти точки от первых восьми точек коллокации.

В случае рис. 1
г 27 точек коллокации лежат в узлах равномерной сетки из
 $3\times3\times3$ узлов, и шаг сетки в каждом из пространственных направлений раве
н $\omega.$



Рис. 1. Варианты задания точек коллокации и точек согласования: а) $N_c = 6, N_m = 6; 6$) $N_c = 8, N_m = 12;$ в) $N_c = 14, N_m = 24;$ г) $N_c = 27$

Подставляя координаты точек коллокации в уравнения (8) и (7), получим $3N_c$ уравнений коллокации:

$$a_{\nu,m}^{(1)} b_m^{s+1} = f_{\nu}^s, \quad \nu = 1, \dots, 3N_c, \quad m = 1, \dots, 30.$$
 (9)

Теперь перейдем к выводу уравнений, вытекающих из условий согласования. По аналогии с [13] используем на гранях ячейки условия согласования, улучшающие свойства решения. Они являются условиями непрерывности решения на гранях ячейки и представляют собой линейные комбинации вида

$$h \frac{\partial (u^{+})^{n}}{\partial n} + \eta_{1} (u^{+})^{n} = h \frac{\partial (u^{-})^{n}}{\partial n} + \eta_{1} (u^{-})^{n},$$

$$h \frac{\partial (u^{+})^{\tau_{1}}}{\partial n} + \eta_{2} (u^{+})^{\tau_{1}} = h \frac{\partial (u^{-})^{\tau_{1}}}{\partial n} + \eta_{2} (u^{-})^{\tau_{1}},$$

$$h \frac{\partial (u^{+})^{\tau_{2}}}{\partial n} + \eta_{2} (u^{+})^{\tau_{2}} = h \frac{\partial (u^{-})^{\tau_{2}}}{\partial n} + \eta_{2} (u^{-})^{\tau_{2}},$$
(10)

$$h \frac{\gamma}{\partial n} + \eta_2 (u^+)^{r_2} = h \frac{\gamma}{\partial n} + \eta_2 (u^-)^{r_2},$$

$$p^+ = p^-.$$
(11)

Здесь $n = (n_1, n_2, n_3)$ — внешняя нормаль к грани ячейки, $(\cdot)^n, (\cdot)^{\tau_1}, (\cdot)^{\tau_2}$ — нормальные и касательные составляющие вектора скорости по отношению к грани между ячейками, u^+, u^- — пределы функции u при стремлении ее аргументов к грани ячейки изнутри и снаружи ячейки; η_1, η_2 — неотрицательные параметры, которые могут влиять на обусловленность полученной системы линейных алгебраических уравнений и скорость сходимости;

$$h\frac{\partial}{\partial n} = h\left(n_1\frac{\partial}{\partial x_1} + n_2\frac{\partial}{\partial x_2} + n_3\frac{\partial}{\partial x_3}\right) = n_1\frac{\partial}{\partial y_1} + n_2\frac{\partial}{\partial y_2} + n_3\frac{\partial}{\partial y_3}$$

Для единственности определения давления в решении можно задавать его значение в одной точке расчетной области либо аппроксимировать условие (4) по формуле

$$\frac{1}{h}\left(\int_{\Omega_{i,j,k}} p \, d\Omega_{i,j,k}\right) = \frac{1}{h}\left(-I^* + \int_{\Omega_{i,j,k}} p^* d\Omega_{i,j,k}\right). \tag{12}$$

Здесь I^* — интеграл по всей области, рассчитанный как сумма интегралов по каждой ячейке на предыдущей итерации, p^* — давление в ячейке с предыдущей итерации.

Отметим, что в условиях (10) при их записи в двух соседних ячейках на их общей грани направления внешних нормалей противоположны. Поэтому в одной из этих ячеек первые слагаемые в (10) войдут с одним знаком, а в соседней ячейке с противоположным. Благодаря этому уравнения (10) не повторяются в СЛАУ, к которой сводится решение задачи.

Точки, в которых записываются уравнения (10), называются точками согласования. Так же, как и в случае точек коллокации, задание количества точек согласования для составляющих вектора решения и

их расположения на каждой грани может осуществляться различными способами. Некоторые из способов задания точек согласования, которые были реализованы нами в нашей фортран-программе, показаны малыми кубиками на рис. 1. На рис. 1а координаты шести точек согласования для составляющих вектора скорости задавались в виде $(\pm 1, 0, 0)$, $(0, \pm 1, 0)$, $(0, 0, \pm 1)$.

В случае рис. 16 имеем 12 точек согласования с координатами $(\pm 1, -\zeta, -\zeta)$, $(\pm 1, \zeta, \zeta)$, $(-\zeta, \pm 1, -\zeta)$, $(\zeta, \pm 1, \zeta)$, $(-\zeta, -\zeta, \pm 1)$, $(\zeta, \zeta, \pm 1)$, где параметр ζ задается пользователем в интервале $0 < \zeta < 1$. В частности, на рис. 1 расположение точек согласования показано для случая, когда $\zeta = 1/2$. Для большей наглядности пары точек согласования, лежащие на одной грани, соединены соответствующей диагональю грани в виде тонкой линии. При $\zeta = 1/2$ каждая точка согласования лежит в середине полудиагонали грани.

В случае рис. 1в имеем 24 точки согласования с координатами $(\pm 1, -\zeta, -\zeta), (\pm 1, \zeta, -\zeta), (\pm 1, -\zeta, \zeta), (\pm 1, \zeta, \zeta), (\pm 1, \zeta, \zeta), (-\zeta, \pm 1, -\zeta), (\zeta, \pm 1, -\zeta), (-\zeta, \pm 1, \zeta), (\zeta, \pm 1, \zeta), (-\zeta, -\zeta, \pm 1), (\zeta, -\zeta, \pm 1), (-\zeta, \zeta, \pm 1), (\zeta, \zeta, \pm 1).$ Для большей наглядности четверки точек согласования, лежащие на каждой из двух противоположных граней, соединены тонкой сплошной линией одного цвета.

Обозначим через N_m число точек согласования для составляющих вектора скорости на гранях каждой ячейки. Используя представление решения (8), подставим координаты этих точек в каждое из трех условий согласования (10) и получим $3N_m$ условий согласования для составляющих скорости.

Условия согласования для давления (11) задаются в шести точках с координатами $(\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1)$. Эти точки показаны на рис. 1а.

Для того чтобы обеспечить единственность решения для давления, мы задавали значение давления в начале координат или использовали условие (12). Пусть $\Omega_{1,1,1}$ — ячейка, одна из вершин которой совпадает с началом координат (0,0,0). Этой точке соответствуют локальные координаты $y_1 = y_2 = y_3 = -1$. Мы задавали $p(-1, -1, -1) = p_0$, где p_0 — произвольная постоянная; ниже в разделе 3 она задавалась из точного решения тестовой задачи. В расчетах течения в каверне с движущейся крышкой использовалось значение $p_0 = 1$ в соответствии с рекомендацией [29]. Таким образом, условия согласования составляющих скорости и давления дают в общей сложности $3N_m + 6 + \delta_i^1 \delta_j^1 \delta_k^1$ линейных относительно искомых $b_{i,j,k,l}$ алгебраических уравнений в каждой ячейке (i, j, k), где δ_i^j — символ Кронекера, $\delta_i^j = 1$ при i = j и $\delta_i^j = 0$ при $i \neq j$.

Если грань ячейки совпадает с границей области Ω , то вместо условий согласования используются граничные условия $u_m = g_m, m = 1, 2, 3$.

Запишем уравнения, полученные из условий согласования, в виде

$$a_{\nu,m}^{(2)} b_m^{s+1} = g_{\nu}^{s,s+1}, \quad \nu = 1, \dots, 3N_m + 6 + \delta_i^1 \delta_j^1 \delta_k^1, \quad m = 1, \dots, 30.$$
 (13)

Здесь правые части $g_{\nu}^{s,s+1}$ зависят и от величин b_m^s , и от величин b_m^{s+1} , только что вычисленных в некоторых соседних ячейках.

Введем в рассмотрение матрицу $A_{i,j,k}$, объединяющую матрицы систем (9) и (13), а также векторстолбец правых частей $f_{i,j,k}^{s,s+1}$ для всех $i, j, k = 1, \ldots, I$:

$$A_{i,j,k} = \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & \dots & a_{1,30}^{(1)} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{3N_c,1}^{(1)} & \dots & a_{3N_c,30}^{(1)} \\ a_{1,1}^{(2)} & \dots & a_{1,30}^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{3N_m+6+\delta_i^1\delta_j^1\delta_k^{1,1}}^{(2)} \dots & a_{3N_m+6+\delta_i^1\delta_j^1\delta_k^{1,30}}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{f}_{i,j,k}^{s,s+1} = \begin{pmatrix} f_1^{s,s+1} \\ \dots \\ f_{3N_c}^{s,s+1} \\ g_1^{s,s+1} \\ \dots \\ g_{3N_m+6+\delta_i^1\delta_j^1\delta_k^{1,30}}^{s,s+1} \end{pmatrix}.$$

Далее в каждой ячейке (i, j, k) решается система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$A_{i,j,k} \boldsymbol{b}^{s+1} = \boldsymbol{f}_{i,j,k}^{s,s+1}, \tag{14}$$

где $\boldsymbol{b}^{s+1} = (b_{i,j,k,1}^{s+1}, \dots, b_{i,j,k,30}^{s+1})^{\mathrm{T}}$. Матрица $A_{i,j,k}$ содержит $3N_c + 3N_m + 6 + \delta_i^1 \delta_j^1 \delta_k^1$ строк и 30 столбцов. Система (14) решается относительно 30 неизвестных $b_{i,j,k,l}^{s+1}$, $l = 1, 2, \dots, 30$. Пусть $\delta_i^1 \delta_j^1 \delta_k^1 = 0$. Тогда матрица $A_{i,j,k}$ будет квадратной, если $3N_c + 3N_m + 6 = 30$ или $N_c + N_m + 2 = 10$. Даже при минимальном количестве точек коллокации $N_c = 6$ и точек согласования $N_m = 6$ получаем, что $N_c + N_m + 2 = 14 > 10$, т.е. система (14) переопределена. Все уравнения этой СЛАУ были получены в фортран-форме с помощью символьных вычислений на языке системы *Mathematica*.

Система уравнений (14) решалась численно методом вращений [30] с выбором главного элемента по столбцу. Этот метод требует вычисления квадратного корня из суммы квадратов некоторых двух элементов матрицы системы. Осуществлялось уточнение численного значения квадратного корня, найденного соответствующей функцией Фортрана-90, с помощью итераций по Ньютону. Были проведены вычислительные эксперименты при различном числе итераций, которые показали, что одна итерация по Ньютону обеспечивала достаточную точность вычислений.

Расчеты по формулам (10), (11) были реализованы с помощью альтернирующего метода Шварца [31]. В соответствии с этим методом в качестве u^- , p^- в (14) берутся значения, известные на момент построения решения в данной ячейке. При этом (s + 1)-я итерация заключается в том, что на ней последовательно обходятся все ячейки области Ω .

Предположим, что длина итоговой компьютерной программы на языке Фортран-90, измеряемая количеством строк программы, равна 100%. Тогда уравнения коллокаций занимают 24%, а условия согласования — 15% всей программы, так что 39% всей фортран-программы были сгенерированы программой, написанной на языке системы *Mathematica*. Отметим, что соответствующие фортран-подпрограммы имеют решающее значение для реализации рассматриваемого трехмерного КНН-метода, потому что они позволяют пользователю получить полный набор уравнений переопределенной алгебраической системы (14). Очень важно то, что использование СКА экономит многие усилия и время математика и избавляет от многих возможных ошибок, которые были бы неизбежными при попытке вывести формулы метода КНН вручную.

Остающиеся 61% фортран-программы реализуют метод вращений, итерации по нелинейности, алгоритм Крылова ускорения сходимости и экспорт окончательного сошедшегося решения во внешние файлы в виде списков в синтаксисе системы *Mathematica* для последующей отрисовки и анализа результатов с помощью соответствующей *Mathematica*-программы (описание соответствующего интерфейса между фортран-программой и графической системой комплекса *Mathematica* имеется в [32]).

3. Новый вариант алгоритма Крылова. Для ускорения применяемых итераций и времени, необходимого для построения приближенного решения, здесь использован новый вариант [21, 18] известного метода ускорения сходимости итераций [33–36], основанного на подпространствах Крылова. Различные варианты этого метода описаны в [37]. Рассматриваемый вариант отличается по реализации от описанных в [37]. Приведем краткий вывод его формул на примере итерационного процесса

$$X^{n+1} = TX^n + f, \quad n = 0, 1, \dots,$$
 (15)

решения СЛАУ AX = d, где A, T — квадратные вещественные матрицы, f, d — векторы правых частей, X^n — приближение к решению на итерации с номером n. Пусть итерационный процесс (15) сходится и система AX = d эквивалентна системе

$$\boldsymbol{X} = T\boldsymbol{X} + \boldsymbol{f}.\tag{16}$$

Подставляя значение X^n в систему (16) и учитывая (15), имеем невязку уравнения (16) на n-й итерации:

$$\mathbf{r}^{n} = T\mathbf{X}^{n} + \mathbf{f} - \mathbf{X}^{n} = \mathbf{X}^{n+1} - \mathbf{X}^{n}.$$
 (17)

Вычитая (15) из (16), имеем зависимость погрешности

$$\boldsymbol{Z}^{n} = \boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}^{n} \tag{18}$$

на последовательности итераций

$$\boldsymbol{Z}^{n+1} = T\boldsymbol{Z}^n. \tag{19}$$

Тождественным преобразованием соотношения (17) с учетом (18) находим выражение невязки r^n через последовательные погрешности на итерациях:

$$r^{n} = X^{n+1} - X + X - X^{n} = Z^{n} - Z^{n+1}.$$
 (20)

Подействуем оператором T на (20). С учетом соотношения (19) получим $T\boldsymbol{r}^{n} = T\boldsymbol{Z}^{n} - T\boldsymbol{Z}^{n+1} = \boldsymbol{r}^{n+1}$, или $\boldsymbol{r}^{n+1} = T\boldsymbol{r}^{n}$. Подействуем оператором T на соотношение $\boldsymbol{Z}^{n} = \boldsymbol{Z}^{n+1} + \boldsymbol{r}^{n}$, которое следует из (20): $T\boldsymbol{Z}^{n} = \boldsymbol{Z}^{n+1} = T(\boldsymbol{Z}^{n+1} + \boldsymbol{r}^{n})$. Пусть T^{-1} — оператор обратный к оператору T. Проведем в полученном соотношении тождественное преобразование

$$(T^{-1} - E)\boldsymbol{Z}^{n+1} = \boldsymbol{r}^{n}.$$
(21)

Предположим, что начиная с некоторого начального приближения X^0 сделана k + 1 итерация, т.е. вычислены X^1X^2, \ldots, X^{k+1} , а по формуле (17) вычислены r^0, r^1, \ldots, r^k . Пусть k меньше размерности вектора X. Тогда, согласно (21), имеем $(T^{-1} - E)Z^{k+1} = r^k$. Если бы на (k + 1)-й итерации удалось точно вычислить погрешность Z^{k+1} , то согласно определению погрешности (18) сразу можно было бы вычислить точное решение $X = X^{k+1} + Z^{k+1}$. В общем случае итерационные методы не позволяют вычислить точно Z^{k+1} . Однако, имея несколько приближенных значений решения в сходящемся итера-ционном процессе (16), можно вычислить некоторое Y^{k+1} — хорошее приближение к Z^{k+1} и существенно уточнить найденное приближение к решению, полагая $X \cong X^{*k+1} = X^{k+1} + Y^{k+1}$. Вектор поправки

 $Y^{k+1} = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i r^i$ с неопределенными коэффициентами α_i ищется здесь в подпространстве Крылова [37, 21] $\mathcal{K}_k(\boldsymbol{r}^1,T) = \mathrm{span}\left\{\boldsymbol{r}^1,T\boldsymbol{r}^1,\ldots,T^{k-1}\,\boldsymbol{r}^1\right\}$, где $\mathrm{span}\left\{\boldsymbol{v}^1,\ldots,\boldsymbol{v}^k\right\}$ — линейная оболочка векторов $\boldsymbol{v}^1,\ldots,$ \boldsymbol{v}^k . Коэффициенты α_1,\ldots,α_k находятся из условия минимизации функционала невязки

$$\Phi(\alpha_1,\ldots,\alpha_k) = \left\| \boldsymbol{X}^{*k+1} - T\boldsymbol{X}^{*k+1} - \boldsymbol{f} \right\|_2^2,$$
(22)

которая возникает при подстановке $oldsymbol{X}^{*k+1}$ в (16). Здесь $\|oldsymbol{u}\|_2$ — евклидова норма вектора $oldsymbol{u}$ размерности

 $N: \|\boldsymbol{u}\|_2^2 = \sum_{i=1}^N u_i^2, \ \boldsymbol{u} = (u_1, \dots, u_N)^{\mathrm{T}}.$ Верхний индекс T у векторов и матриц обозначает операцию транс-

понирования. В точке минимума функционала (22) в пространстве параметров $\{\alpha_1, \ldots, \alpha_k\}$ должны быть равны нулю первые производные от правой части (22) по всем параметрам α_i , i = 1, 2, ..., k. Приравнивая нулю указанные производные, устанавливаем, что задача о нахождении минимума функционала (22) эквивалентна решению переопределенной СЛАУ

$$(\boldsymbol{r}^{1} - \boldsymbol{r}^{0})\alpha_{1} + \ldots + (\boldsymbol{r}^{k} - \boldsymbol{r}^{k-1})\alpha_{k} = -\boldsymbol{r}^{k}$$
⁽²³⁾

с неизвестными $\alpha_1, \ldots, \alpha_k$ методом наименьших невязок. Построенный таким образом вектор X^{*k+1} используется далее в качестве начального приближения для последующих итераций.

Одним из достоинств рассматриваемого метода ускорения итераций является то, что он легко может быть применен к уже запрограммированным итерационным процессам. Для этого достаточно внести в существующую программу небольшую процедуру подсчета поправки.

Заметим, что $\lim_{n\to\infty} ||r^n||_2 = 0$ в случае сходящегося итерационного процесса. При вычислении ком-понент вектора невязки r^n производится вычитание близких между собой чисел (компонент двух последовательных приближений \dot{X}^i и X^{i+1}). При вычислении элементов матрицы системы (23) происходит вычитание близких между собой малых величин $r^{i} - r^{i-1}$, i = 1, 2, ..., k. Такие арифметические операции из-за ошибок округления на ЭВМ приводят к значительной относительной погрешности в вычислении вектора невязки r^i , $i = 0, 1, \ldots, k$, и к еще большей относительной погрешности при вычислении элементов матрицы системы (23). В результате по мере достижения все большей точности решения СЛАУ рассматриваемый метод ускорения становится все менее устойчивым и менее эффективным. Другая неприятность, которая снижает эффективность поправки в области малых невязок, заключается в том, что в условиях ограниченной разрядности представления чисел на ЭВМ система (23) нередко может быть плохо обусловленной или вырожденной. У нее с точностью до небольшого числа, близкого к машинному нулю, могут быть нулевые или линейно зависимые между собой столбцы.

Сделаем предположение CR: допустим, что В является матрицей полного ранга (complete rank).

Для достижения большей устойчивости процесса вычисления коэффициентов поправки $oldsymbol{Y}^{k+1}$ в области малых невязок здесь применяются несколько приемов. Первый прием — нормировка столбцов матрицы системы (23). Это позволяет избежать арифметических действий с числами, близкими к машинному нулю. Нормировка уравнений в (23) производилась здесь при помощи замены неизвестных $eta_i = lpha_i \|m{r}^{\,i} - m{r}^{\,i-1}\|_2, \; i = 1, \dots, k.$ В результате СЛАУ (23) принимает вид

$$B\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{B}_1)\beta_1 + \ldots + (\boldsymbol{B}_k)\beta_k = -\boldsymbol{r}^k, \qquad (24)$$

где $\boldsymbol{B}_{i} = rac{\boldsymbol{r}^{\,i} - \boldsymbol{r}^{\,i-1}}{\left\|\boldsymbol{r}^{\,i} - \boldsymbol{r}^{\,i-1}\right\|_{2}}, \, i = 1, \dots, k, -$ столбцы матрицы B.

Вторым приемом является применение ортогонального метода для решения переопределенной системы (24). Здесь использовался метод вращений с выбором главного элемента в i-м столбце $B_i, i = 1, 2, \dots, k$. Иными словами, для прямоугольной матрицы B системы (24) строилось QR-разложение с матрицей вращений Q и прямоугольной матрицей R, у которой ненулевые элементы расположены на главной диагонали и, возможно, в треугольнике над ней, а под главной диагональю все элементы нули. Таким образом, в первых k строках матрицы R расположена квадратная верхнетреугольная матрица, а решение переопределенной системы $B\beta = r^k$ (24) свелось к решению системы

$$R\boldsymbol{\beta} = -Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{\,k}.\tag{25}$$

Отметим, что примененный здесь ортогональный метод вращений хорош тем, что решение заданной системы он сводит к решению системы, обусловленность которой не хуже обусловленности исходной. Имеет место равенство чисел обусловленности матриц *B* и *R*. Заметим, что применение классического МНК решение системы (24) сводит к решению системы

$$B^{\mathrm{T}}B\boldsymbol{\beta} = -B^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{\,k}.\tag{26}$$

с квадратной матрицей $B^{T}B$. При этом обусловленность последней системы может быть много хуже обусловленности системы (24), так как число обусловленности матрицы $B^{T}B$ равно квадрату числа обусловленности матрицы B. Это обстоятельство имеет существенное значение при попытке построить итерационным методом решение большой точности системы уравнений значительного размера, так как плохая обусловленность системы и большое число арифметических действий приводят к накоплению погрешности из-за ошибок округлений.

Решение системы (26) является по определению некоторым псевдорешением системы (24). Решение первых k уравнений системы (25) также является некоторым псевдорешением системы (24).

Допустим, что со строками исходной матрицы *B* системы (24) априори были произведены все перестановки, которые потребовались при выборе главных элементов в ходе построения указанного *QR*разложения. Иными словами, при построении этого разложения для матрицы *B* не происходит перестановка строк. Рассмотрим следующие равенства: $B^{T}B = (QR)^{T}QR = R^{T}Q^{T}QR = R^{T}ER = R^{T}R$. Это означает, что при выполнении последнего допущения решение системы (26) совпадает с псевдорешением системы (25), полученным применением к ней МНК. Поскольку у матрицы *R* все нижние строки, начиная с номера k + 1, нулевые, то очевидно, что системы (25) и $R^{T}R\beta = -R^{T}Q^{T}r^{k}$ эквивалентны. Отсюда следует, что при отсутствии округления чисел в арифметических операциях решение системы (26) совпадает с решением первых *k* уравнений системы (25). Отметим, что в более ранних работах по методу КНН и реализациях рассматриваемого здесь варианта метода Крылова для решения переопределенных систем применялся [35, 36] именно метод наименьших квадратов (МНК). Преимущество перед ними примененных здесь подходов существенно проявляется при численном решении прикладных задач на компьютерах как в случаях применения сеток большого размера, так и в случае наличия особенностей в решении задач.

При решении переопределенной СЛАУ (14) применяется тот же самый ортогональный метод, как и для решения системы (24). Выше показано, что этот метод доставляет минимум функционалу невязки решаемой СЛАУ, к которой сводится решение исходной задачи. При этом он, в отличие от МНК, не ухудшает обусловленности решаемой СЛАУ, поэтому рассматриваемый метод точнее назвать методом наименьших невязок.

Из сказанного выше и наблюдений при численном решении прикладных задач в начале итерационного процесса, когда невязки r^i (i = 0, 1, ...) не маленькие (существенно больше машинного нуля), с большой вероятностью матрица B имеет полный ранг — предположение CR не нарушается. Однако по мере сходимости итерационного процесса при небольших r^i с ненулевой вероятностью предположение CRможет не выполниться. При этом попытка построить QR-разложение не дает в первых k строках матрицы R верхнетреугольную матрицу размера k. Если этот факт имеет место с точностью, близкой к машинному нулю, т.е. по крайней мере один из элементов на диагонали верхней треугольной матрицы R близок к машинному нулю, то попытка решить систему (25) (или (26)) может дать большое число, не представимое в арифметике с конкретной используемой разрядностью представления чисел в ЭВМ. Это может привести (или приведет) к автоматическому останову машины (ABOCTy). Если даже система (25) будет решена, то это может быть сделано с плохой точностью. Можно говорить, что поправки Y^{k+1} к решению системы (16) вычисляются "неустойчиво". При этом в вычислительном эксперименте можно наблюдать немонотонность и осцилляции в графике погрешности.

Как и первые два, третий существенный прием, примененный здесь, направлен на увеличение устойчивости вычисления поправок (устойчивого построения подпространства Крылова). Суть его заключается в ограничении числа используемых невязок r^i , i = 1, 2, ..., s - 1 < k, при вычислении поправок к приближенным значениям решения в области плохой обусловленности системы (16). Здесь применялся достаточно простой и легко реализуемый критерий (S-критерий) для выбора числа невязок, пригодных с точки зрения устойчивого построения подпространства Крылова. В [21] был использован и реализован некоторый его вариант.

Пусть в процессе QR-разложения на диагонали матрицы R в s+1 строке появился элемент по модулю меньше некоторого числа δ , близкого к машинному нулю, в то время как все элементы под диагональю равны нулю. Тогда для построения поправки используются только первые s невязок r^i (i = 1, ..., s). В системе (23) оставляются первые s столбцов, а в правой части "ограниченной системы" вместо вектора $-r^k$ берется вектор $-r^s$. Далее описанным выше способом решается полученная ограниченная система и делается поправка (S-поправка) приближения X^{s+1} , которая берется в качестве начальной в следующем цикле процесса ускорения итераций с помощью подпространств Крылова. Ясно, что здесь возможны несущественные с точки зрения результата варианты в последовательности вычисления S-поправки. Следует также отметить, что в применении S-критерия можно использовать варианты его реализации с применение матриц R с косыми треугольниками в первых ее s строках. Однако у авторов пока нет проведенных численных экспериментов, которые показали бы преимущество последнего перед изложенным и примененым здесь вариантом реализации S-критерия.

При проведении численных экспериментов с применением подпространств Крылова и использованием S-критерия программа автоматически фиксировала факт его применения выводом сообщения в отдельный текстовый файл с числовыми значениями исходных k невязок и оставленных после ограничения их числа согласно критерию. Как показали результаты большого количества итерационного решения тестовых примеров, применение S-критерия позволяет избежать некоторого количества авостов при приближении величин невязок к машинному нулю и получить более точные решения СЛАУ, чем без применения критерия. Это наглядно наблюдалось при решении примеров с отключением в программе автоматического применения S-критерия.

Очевидно, что программная реализация автоматического применения S-критерия позволяет применять метод ускорения итераций также и в случае, когда матрица B системы (24) не является матрицей полного ранга.

4. Результаты тестовых расчетов. Рассмотрим следующее точное решение уравнений Навье– Стокса (1), (2) в кубической области (5):

$$u_{1} = -\cos(x_{1})\sin(x_{2})\sin(x_{3}), \qquad u_{2} = 0.5\sin(x_{1})\cos(x_{2})\sin(x_{3}), u_{3} = 0.5\sin(x_{1})\sin(x_{2})\cos(x_{3}), \qquad p = \cos(x_{1}) + \cos(x_{2}) + \cos(x_{3}) - (3/X)\sin(X).$$
(27)

Заметим, что решение (27) удовлетворяет уравнению неразрывности (2). Выпишем правые части f_1, f_2, f_3 уравнений (1):

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{1}{\text{Re}} \Biggl(3\cos(x_1)\sin(x_2)\sin(x_3) + \text{Re } \sin(x_1) \Biggl(1 + \cos(x_1) \Bigl(0.5\cos^2(x_3)\sin^2(x_2) + \\ &+ \Bigl(0.5\cos^2(x_2) + \sin^2(x_2) \Bigr) \sin^2(x_3) \Bigr) \Biggr) \Biggr), \\ f_2 &= \frac{1}{\text{Re}} \Biggl(-1.5\cos(x_2)\sin(x_1)\sin(x_3) + \text{Re } \sin(x_2) \Biggl(1 + \cos(x_2) \Bigl(-0.25\cos^2(x_3)\sin^2(x_1) + \\ &+ \Bigl(0.5\cos^2(x_1) + 0.25\sin^2(x_1) \Bigr) \sin^2(x_3) \Bigr) \Biggr) \Biggr), \\ f_3 &= \frac{1}{\text{Re}} \Biggl(\text{Re } \sin(x_3) + \cos(x_3) \Bigl(-1.5\sin(x_1)\sin(x_2) + 0.5\text{Re } \cos^2(x_1)\sin^2(x_2)\sin(x_3) + \\ &+ \text{Re } \sin^2(x_1) \Bigl(-0.25\cos^2(x_2) + 0.25\sin^2(x_2) \Bigr) \sin(x_3) \Bigr) \Biggr). \end{aligned}$$

Тестовое решение (27) не имеет особенностей, поэтому можно наблюдать порядок сходимости численного решения уже на грубых сетках. Область (5) покрывалась равномерной сеткой кубических ячеек. Размер h половины ребра ячейки был равен h = X/(2M), где M — количество ячеек вдоль каждого координатного направления. Припишем индексы i, j, k ячейки к ее геометрическому центру, где i, j, kменяются, соответственно, вдоль осей x_1, x_2, x_3 . Поскольку описываемый метод использует линеаризацию уравнений Навье–Стокса, необходимы итерации по нелинейности. Использовалось нулевое начальное приближение для величин U_i и P.

Для того чтобы определить абсолютные численные ошибки метода на конкретной равномерной сетке с полушагом h, мы вычисляли следующие среднеквадратичные ошибки:

$$\delta \boldsymbol{u}(h) = \left[\frac{1}{3M^3} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^M \sum_{\nu=1}^3 (u_{\nu,i,j,k} - u_{\nu,i,j,k}^{\text{ex}})^2\right]^{1/2}, \quad \delta p(h) = \left[\frac{1}{M^3} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^M (p_{i,j,k} - p_{i,j,k}^{\text{ex}})^2\right]^{1/2}.$$

Здесь $u_{i,j,k}^{\text{ex}}$ — вектор скорости и давление, вычисленные из точного решения (27). Величины $u_{i,j,k}$ и $p_{i,j,k}$ обозначают численное решение, полученное по методу КНН, описанному в предыдущих разделах. Будем вычислять порядки сходимости ν_u и ν_p из численных решений для вектора скорости u и для давления p по следующим формулам, известным в численном анализе:

$$\nu_u = \frac{\log[\delta \boldsymbol{u}(h_{m-1})] - \log[\delta \boldsymbol{u}(h_m)]}{\log(h_{m-1}) - \log(h_m)}, \quad \nu_p = \frac{\log[\delta p(h_{m-1})] - \log[\delta p(h_m)]}{\log(h_{m-1}) - \log(h_m)},$$

где h_m , $m = 2, 3, \ldots, -$ некоторые значения шага h, такие, что $h_{m-1} \neq h_m$. Пусть $b_{i,j,k,l}^s$, $s = 0, 1, \ldots, -$ значение коэффициента $b_{i,j,k,l}$ в (8) на *s*-й итерации. Использовалось следующее условие для окончания итераций по нелинейности: $\| \delta b^{s+1} \| < \varepsilon$, где

$$\delta b^{s+1} = \max_{i,j,k} \left(\max_{1 \le l \le 30} \left| b_{i,j,k,l}^{s+1} - b_{i,j,k,l}^s \right| \right)$$
(28)

и ε — малая положительная величина, задаваемая пользователем, $\varepsilon < h^2$. В дальнейшем будем называть величину (28) псевдоошибкой.



Рис. 2. Влияние величины kв (23) на скорость сходимости метода КНН: а) логарифм псевдопогрешности $\delta b^n;$ б) логарифм ошибки $\delta \boldsymbol{u}$

Рис. 2 иллюстрирует влияние величины k в (23) на скорость сходимости метода КНН. Эти расчеты были выполнены на сетке из $20 \times 20 \times 20$ ячеек; $\eta_1 = \eta_2 = 2$ в (10), $\xi = 0.01$ в (7). Критерием останова счета было выполнение неравенства $\delta b^n < 2 \times 10^{-7}$. Расчету без применения алгоритма Крылова соответствует случай k = 0. Видно, что с увеличением числа невязок k, используемых в методе Крылова, скорость сходимости численного решения по методу КНН растет. При этом количество итераций, необходимых для достижения неравенства $\delta b^n < 2 \times 10^{-7}$, было меньше, чем без применения алгоритма Крылова, в 11, 13 и 17 раз соответственно при k = 2, k = 5 и k = 9.

Таблица 2 иллюстрирует влияние параметра ξ в уравнениях коллокации на точность решения по методу КНН при Re = 1000. Использовались значения M = 20, $\omega = 1/2$, $\zeta = 0.6$, $\eta_1 = \eta_2 = 2.0$, $N_{\rm cl} = 14$, $N_m = 4$, число невязок в алгоритме Крылова равно четырем. Давалась команда на прекращение расчета по методу КНН, как только обеспечивалось выполнение неравенства $\delta b^{s+1} < 10^{-8}$. Далее, $N_{\rm it}$ количество итераций, минимально необходимое для достижения указанного неравенства. Из табл. 2 видно, что параметр ξ заметно влияет на количество итераций, требуемых для достижения одной и той же малости псевдопогрешности. С ростом ξ погрешность δu растет, а погрешность δp убывает.

Таблица 3 показывает, что конкретные значения параметров η_1 , η_2 в условиях согласования влияют в большей степени на точность вычисления составляющих вектора скорости, чем на точность вычисления давления по методу КНН.

Изучалось также влияние числа точек коллокации N_c на точность расчетов по методу КНН. Результаты, представленные в табл. 4, были получены на сетке из $30 \times 30 \times 30 \times 30$ ячеек при $\eta_1 = \eta_2 = 2$, $N_m = 24$, $\omega = 0.5$, $\zeta = 0.6$, $\xi = 0.01$, k = 9 в алгоритме ускорения итераций по Крылову.

Таблица	3
---------	---

Влияние параметров η_1, η_2 в условиях согласования (10) на точность решения по методу КНН

η_1	η_2	$N_{\rm it}$	$\delta oldsymbol{u}$	δp
1	1	566	0.293×10^{-3}	0.247×10^{-2}
1.5	1.5	928	0.233×10^{-3}	0.243×10^{-2}
2.0	2.0	1373	0.189×10^{-3}	0.239×10^{-2}
2.0	1.0	1171	0.217×10^{-3}	0.240×10^{-2}

Таблиц	a 2
Влияние параметра ξ в уравнениях	
коллокации (см. (7)) на точность решен	ния
по методу КНН	

ξ	$N_{\rm it}$	$\delta oldsymbol{u}$	δp
0.005	1788	0.177×10^{-3}	0.248×10^{-2}
0.01	1373	0.189×10^{-3}	0.239×10^{-2}
0.02	4196	0.283×10^{-3}	0.167×10^{-2}

Таблица 4 Влияние N_c на точность расчетов по методу КНН, Re = 1000

N_c	$\delta oldsymbol{u}$	δp
6	0.117×10^{-3}	0.159×10^{-2}
8	0.114×10^{-3}	0.156×10^{-2}
14	0.112×10^{-3}	0.155×10^{-2}
27	0.115×10^{-3}	0.151×10^{-2}

Таблица 5

Влияние локальных координат ω и ζ на точность расчетов по методу КНН,

Re	=	10	00

ω	$\delta oldsymbol{u}$	δp
0.5	0.113×10^{-3}	0.158×10^{-2}
0.55	0.118×10^{-3}	0.159×10^{-2}
0.60	0.120×10^{-3}	0.160×10^{-2}
0.65	0.123×10^{-3}	0.160×10^{-2}

В табл. 5 представлены численные результаты, иллюстрирующие влияние локальных координат ω и ζ , задающих положения точек коллокации и согласования, на точность расчетов по методу КНН. В этой серии расчетов мы полагали $\omega = \zeta$, $N_c = 6$, $N_m = 24$, M = 30. Видно, что в рассмотренном интервале значений $\omega = \zeta$ результаты по точности близки друг к другу и в то же время погрешности δu и δp оказались наименьшими при $\omega = \zeta = 0.5$.

Таблица 6

Таблица 7

Ошибки $\delta \boldsymbol{u}, \delta p$ и порядки сходимости ν_u, ν_p на последовательности сеток, Re = 100

M	$\delta oldsymbol{u}$	δp	$ u_u$	$ u_p$
10	0.364×10^{-3}	0.585×10^{-2}		
20	0.852×10^{-4}	0.232×10^{-2}	2.10	1.33
30	0.247×10^{-4}	0.131×10^{-2}	3.05	1.41

Ошибки $\delta u, \delta p$ и порядки сходимости ν_u, ν_p на последовательности сеток, Re = 1000

M	$\delta oldsymbol{u}$	δp	$ u_u$	$ u_p$
10	0.462×10^{-3}	0.341×10^{-2}		
20	0.189×10^{-3}	0.240×10^{-2}	1.29	0.51
30	0.112×10^{-3}	0.155×10^{-2}	1.29	1.08

Численные результаты, представленные в табл. 6 и 7, были получены с использованием значения $\omega = 1/2$ при задании точек коллокации; кроме того, $\eta_1 = \eta_2 = 2.0$ в (10), k = 9 в (23). Далее, $\xi = 0.1$ в (7) в случае табл. 6 и $\xi = 0.01$ в случае табл. 7.

Из табл. 6 видно, что при Re = 100 порядок сходимости ν_u лежит в интервале 2.10 $\leq \nu_u \leq$ 3.05, т.е. он несколько выше, чем второй порядок. Из табл. 6 и 7 видно, что абсолютные ошибки в скорости меньше, чем абсолютные ошибки в давлении. Это объясняется тем, что для аппроксимации давления используются многочлены первой степени, в то время как для составляющих скорости используются многочлены второй степени (табл. 1). Использование квадратичной аппроксимации давления в методе КНН рассматривалось в [13, 21] в двумерном случае; было показано, что точность вычисления давления увеличивается по сравнению со случаем использования линейной аппроксимации. Конечно, можно применить квадратичную аппроксимацию давления и в трехмерном случае, но это приведет к увеличению расхода машинного времени из-за появления нескольких дополнительных членов разложения $b_{i,j,k,l}$ в локальном представлении давления.

Заметим, что при использовании метода наименьших невязок для решения любых задач важно, чтобы уравнения переопределенной системы, которые играют равноправную роль при приближенном решении,

имели одинаковые весовые коэффициенты. Например, в данном случае точность решения может ухудшиться, если уравнения коллокаций включены в систему с весовыми коэффициентами, отличными от весовых коэффициентов других уравнений.

На рис. 3 сравнивается приближенное решение, полученное по описанному в разделе 2 методу коллокаций и наименьших невязок, с точным решением (27). Численный расчет по методу КНН выполнен на относительно грубой сетке из $20 \times 20 \times 20$ ячеек при Re = 100. Обозначение кривых представлено в табл. 8.

		Таблица 8
Профиль решения	Точное решение	Приближенное решение
u_1	- · - · -	$\Delta \Delta \Delta$
u_2		0 0 0
u_3		• • •
p		$\nabla \nabla \nabla$



Рис. 3. Сравнение профилей приближенного решения с точным решением в сечении $x_2 = 0.5, x_3 = 0.5$

5. Течение в кубической каверне с движущейся крышкой. Рассмотрим течение вязкой несжимаемой жидкости в пространственной расчетной области, представляющей собой куб (5). Начало координат лежит в одном из углов куба, а ось Ox_3 направлена вверх. Верхняя крышка куба движется в безразмерных координатах с единичной скоростью в положительном направлении оси Ox_1 (рис. 4). Остальные грани куба (5) покоятся. На всех гранях куба заданы условия прилипания $v_1 = 1$, $v_2 = v_3 = 0$ при $x_3 = X$; $v_m = 0$, m = 1, 2, 3, на остальных гранях.





Течение в каверне с движущейся крышкой имеет сингулярности в углах области, для которых $x_3 = X$, которые все сильнее влияют на точность численного решения с увеличением числа Рейнольдса. Поэтому при увеличении числа Рейнольдса необходимо применять все более мелкие сетки в окрестности сингулярностей для получения более точного решения. В настоящей работе мы использовали только равномерные сетки, размер которых не превосходил $160 \times 160 \times 160$ ячеек.

На рис. 4 и 5 представлены некоторые результаты численного расчета течения вязкой несжимаемой жидкости в кубической каверне для числа Рейнольдса Re = 100. Расчет выполнен на равномерной сетке

из 40 × 40 × 40 ячеек. Стрелки указывают локальные направления движения частиц жидкости. Сплошные линии на рис. 46 и 4в — результат расчета по вышеописанному методу КНН.

В работе [38] численное решение задачи о течении в кубической каверне было получено с помощью неявного метода переменных направлений Дугласа–Ганна. Результаты расчетов рассматриваемой задачи сравнивались в [38] с расчетами [39], выполненными псевдоспектральным методом. Для сравнения на рис. 46 приводится также решение, полученное в [38] на равномерной сетке из $33 \times 17 \times 33$ узлов. При этом в [38] использовалась симметрия течения относительно плоскости $x_2 = 0.5$, что позволило авторам [38] уменьшить в два раза число узлов сетки в направлении оси x_2 . Мы в своих расчетах по методу КНН не пользовались этим приемом, хотя реализация граничного условия $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ на плоскости $x_2 = 0.5$ в методе КНН не сложнее, чем реализация условия Дирихле.



Рис. 5. Псевдолинии тока в различных сечениях кубической каверны при Re = 100: а) сечение $x_2 = 0.5$; б) сечение $x_1 = 0.5$; в) сечение $x_3 = 0.5$

Как указывалось в [40], высокоточные численные решения задачи о течении в кубической каверне с движущейся крышкой, полученные в [41], являются на сегодняшний день единственными эталонными решениями данной задачи. Расчеты проводились в [41] с помощью метода, представляющего собой обобщение метода [23] на случай трех пространственных переменных. Вдоль ребер между подвижной стенкой и стационарными стенками поля течений сингулярны. Эти сингулярности ухудшают сходимость численного метода и точность итогового решения. Поэтому в [41] применялась суперпозиция стационарных локальных асимптотических решений для всех сингулярных ребер и остального гладкого решения. Для сравнения на рис. 4в приводится также решение, полученное в [41]. Видно, что численное решение по методу КНН очень хорошо согласуется с результатом из [41] несмотря на то, что мы в своем расчете не применяли асимптотические решения вблизи ребер, где есть сингулярности решения.

В целях наглядности графического представления результатов трехмерных расчетов мы использовали так называемые псевдолинии тока. Дадим определение этого понятия. Спроектируем вектор скорости каждой частицы жидкости, лежащей в выбранной плоскости, на эту плоскость. Это дает плоское векторное поле. Назовем линии, касательные к векторам этого поля, псевдолиниями тока. На рис. 5 представлены картины псевдолиний тока в различных сечениях, и только в сечении $x_2 = 0.5$ псевдолинии тока совпадают с истинными линиями тока. Можно отметить на рис. 5 следующие черты рассматриваемого течения: в сечении $x_3 = 0.5$ имеется линия растекания (рис. 5в); уравнение этой линии имеет вид $x_2 = 0.5$. Вблизи стенки $x_1 = 0$ частицы жидкости движутся при $x_2 < 0.5$ в направлении стенки $x_2 = 0$, а при $x_2 > 0.5 -$ в направлении стенки $x_2 = 0.5$ (рис. 5а) наблюдается вихрь, аналогичный получаемому при расчете течения в двумерной каверне [13]. Из рис. 5б и 5в видно, что в области течения возникают новые типы особенностей, которые отличаются от двумерного случая. Например, наблюдаются точки бифуркации линий тока, и соответствующие картины течения существенно отличаются от картины течения в двумерном случае.

На рис. 6 и 7 представлены некоторые результаты численного расчета течения вязкой несжимаемой жидкости в кубической каверне для числа Рейнольдса Re = 1000. Расчет выполнен на равномерной сетке из $160 \times 160 \times 160$ ячеек. Сплошные линии на рис. 6 — результат расчета по вышеописанному методу КНН. Рис. 66 показывает динамику сходимости с увеличением числа ячеек сетки M в каждом пространственном направлении. По сравнению со случаем Re = 100 можно отметить следующие отличия при Re = 1000: в сечении $x_1 = 0.5$ появились два вихря вблизи нижних углов расчетной области; в сечении $x_3 = 0.5$

наблюдаются два больших вихря, прилегающих к стенке $x_1 = 0$, при этом, как и при Re = 100, имеется линия растекания $x_2 = 0.5$.

Заключение. Представлен новый численный метод коллокаций и наименьших невязок для численного решения трехмерных стационарных уравнений Навье–Стокса. Метод верифицирован на тестовой задаче, имеющей точное аналитическое решение. Метод применен для эталонной задачи расчета течения вязкой несжимаемой жидкости в кубической каверне.

Представленный метод может быть обобщен на случай нестационарных задач. Применение символьных вычислений для построения метода численного решения нестационарных уравнений тече-



Рис. 6. Сравнение профилей составляющей скорости v_1 на центральной линии $x_1 = x_2 = 0.5$, Re = 1000

ния будет очень полезно также и для вывода основных формул метода для нестационарного случая. Кроме того, авторы имеют опыт реализации метода коллокаций и наименьших невязок с использованием символьных вычислений для более простого случая скалярного нестационарного уравнения, а именно, одномерного уравнения теплопроводности.



Рис. 7. Псевдолинии тока в различных сечениях кубической каверны при Re = 1000: а) сечение $x_2 = 0.5$; б) сечение $x_1 = 0.5$; в) сечение $x_3 = 0.5$

Следует также отметить, что представленный численный метод очень хорошо подходит для распараллеливания, так как вычисления в каждой ячейке пространственной сетки могут выполняться на каждой итерации независимо от других ячеек. Можно разбить расчетную область на любое количество подобластей, равное числу доступных процессоров, таким образом, что вычисления в каждой подобласти осуществляются независимо друг от друга, а их взаимодействие друг с другом осуществляется путем уточнения условий согласования на границах между ними после каждой итерации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Kirkpatrick M.P., Armfield S.W., Kent J.H. A representation of curved boundaries for the solution of the Navier– Stokes equations on a staggered three-dimensional Cartesian grid // J. Comput. Phys. 2003. 184, N 1. 1–36.
- Marella S., Krishnan S., Liu H., Udaykumar H.S. Sharp interface Cartesian grid method I: an easily implemented technique for 3D moving boundary computations // J. Comput. Phys. 2005. 210, N 1. 1–31.
- 3. Uhlmann M. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows // J. Comput. Phys. 2005. **209**, N 2. 448–476.
- Pinelli A., Naqavi I.Z., Piomelli U., Favier J. Immersed-boundary methods for general finite-difference and finitevolume Navier–Stokes solvers // J. Comput. Phys. 2010. 229, N 24. 9073–9091.

- Kim J., Moin P. Application of a fractional-step method to incompressible Navier–Stokes equations // J. Comput. Phys. 1985. 59, N 2. 308–323.
- 6. Wesseling P. Principles of computational fluid dynamics. Heidelberg: Springer, 2001.
- Chibisov D., Ganzha V., Mayr E.W., Vorozhtsov E.V. Stability investigation of a difference scheme for incompressible Navier–Stokes equations // Lecture Notes in Computer Science. Vol. 4770. Heidelberg: Springer, 2007. 102–117.
- Brown D.L., Cortez R., Minion M.L. Accurate projection methods for the incompressible Navier–Stokes equations // J. Comput. Phys. 2001. 168, N 2. 464–499.
- 9. Ferziger J.H., Peric M. Computational Methods for Fluid Dynamics. Heidelberg: Springer, 2002.
- Malan A.G., Lewis R.W., Nithiarasu P. An improved unsteady, unstructured artificial compressibility, finite volume scheme for viscous incompressible flows. Part I. Theory and implementation // Int. J. Numer. Meth. Engng. 2002. 54, N 5. 695–714.
- Muldoon F., Acharya S. A modification of the artificial compressibility algorithm with improved convergence characteristics // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 2007. 55, N 4. 307–345.
- 12. Семин Л.Г., Слепцов А.Г., Шапеев В.П. Метод коллокаций-наименьших квадратов для уравнений Стокса // Вычисл. технологии. 1996. 1, № 2. 90–98.
- Semin L., Shapeev V. Constructing the numerical method for Navier–Stokes equations using computer algebra system // Lecture Notes in Computer Science. Vol. 3718. Heidelberg: Springer, 2005. 367–378.
- 14. Валиуллин А.Н., Ганжа В.Г., Мурзин Ф.А., Шапеев В.П., Яненко Н.Н. Применение символьных преобразований на ЭВМ для построения и анализа разностных схем. Препринт № 7. Ин-т теорет. и прикл. механики АН СССР. Новосибирск, 1981.
- 15. Валиуллин А.Н., Ганжа В.Г., Ильин В.П., Шапеев В.П., Яненко Н.Н. Задача автоматического построения и исследования на ЭВМ разностных схем в аналитическом виде // Доклады АН СССР. 1984. 275, № 3. 528–532.
- Ganzha V.G., Mazurik S.I., Shapeev V.P. Symbolic manipulations on a computer and their application to generation and investigation of difference schemes // Lecture Notes in Computer Science. Vol. 204. Berlin: Springer, 1985. 335–347.
- Shapeev A. V. Application of computer algebra systems to construct high-order difference schemes // Proc. 6th IMACS Int. IMACS Conf. on Applications of Computer Algebra. June 25–28, 2000. Univ. of St. Petersburg. St. Petersburg, 2000. 92–93.
- 18. Shapeev V.P., Isaev V.I., Idimeshev S.V. The collocations and least squares method: application to numerical solution of the Navier-Stokes equations // CD-ROM Proc. 6th ECCOMAS. Sept. 2012. Vienna Univ. of Tech. Vienna, 2012.
- Shapeev V.P., Vorozhtsov E.V. Symbolic-numeric implementation of the method of collocations and least squares for 3D Navier–Stokes equations // Lecture Notes in Computer Science. Vol. 7442. Heidelberg: Springer, 2012. 321–333.
- 20. Исаев В.И., Шапеев В.П. Развитие метода коллокаций и наименьших квадратов // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2008. 14, № 1. 41–60.
- 21. Исаев В.И., Шапеев В.П. Варианты метода коллокаций и наименьших квадратов повышенной точности для численного решения уравнений Навье–Стокса // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2010. **50**, № 10. 1758–1770.
- 22. Исаев В.И., Шапеев В.П. Метод коллокаций и наименьших квадратов повышенной точности для решения уравнений Навье–Стокса // Доклады РАН. 2012. **442**, № 4. 442–445.
- Botella O., Peyret R. Benchmark spectral results on the lid-driven cavity flow // Comput. Fluids. 1998. 27, N 4. 421–433.
- Shapeev A.V., Lin P. An asymptotic fitting finite element method with exponential mesh refinement for accurate computation of corner eddies in viscous flows // SIAM J. Sci. Comput. 2009. 31, N 3. 1874–1900.
- 25. Гаранжа В.А., Коньшин В.Н. Численные алгоритмы для течений вязкой жидкости, основанные на консервативных компактных схемах высокого порядка аппроксимации // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1999. 39, № 8. 1378–1392.
- Erturk E., Gokcol C. Fourth order compact formulation of Navier–Stokes equations and driven cavity flow at high Reynolds numbers // Int. J. Numer. Methods Fluids. 2006. 50, N 4. 421–436.
- 27. Темам Р. Уравнения Навье-Стокса. Теория и численный анализ. М.: Мир, 1981.
- Ascher U., Christiansen J., Russell R.D. A collocation solver for mixed order systems of boundary value problems // Math. Comput. 1979. 33, N 146. 659–679.
- 29. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980.
- 30. Воеводин В.В. Вычислительные основы линейной алгебры. М.: Наука, 1977.
- Schwarz H.A. Uber einen Grenzübergang durch alternierendes Verfahren // Vierteljahrsschrift der naturforschenden Gesellschaft in Zürich. 1870. 15. 272–286.
- 32. Ворожцов Е.В. Некоторые особенности применения системы Mathematica в научных исследованиях и образовательном процессе // Информатизация образования и науки. 2012. № 3. 116–127.
- 33. Крылов А.Н. О численном решении уравнения, которым в технических вопросах определяются частоты малых колебаний материальных систем // Изв. АН СССР. Отд. матем. и естеств. наук. 1931. № 4. 491–539.
- 34. Saad Y., Schultz M.H. GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems // SIAM J. Sci. Stat. Comput. 1986. 7. 856–869.
- 35. Слепцов А.Г. Об ускорении сходимости линейных итераций // Моделирование в механике. 1989. 3, № 3. 132–147.

- 36. Слепцов А.Г. Об ускорении сходимости линейных итераций II // Моделирование в механике. 1989. **3**, № 5. 118–125.
- 37. Saad Y. Numerical methods for large eigenvalue problems. Manchester: Manchester Univ. Press, 1991.
- Babu V., Korpela S. Numerical solution of the incompressible three-dimensional Navier–Stokes equations // Computers & Fluids. 1994. 23, N 5. 675–691.
- Ku H., Hirsh R., Taylor T. A pseudo-spectral method for solution of the three-dimensional incompressible Navier– Stokes equations // J. Comput. Phys. 1987. 70. 439–462.
- 40. Feldman Yu., Gelfgat A.Yu. Oscillatory instability of a three-dimensional lid-driven flow in a cube // Phys. Fluids. 2010. 22. 093602-1–093602-9.
- 41. Albensoeder S., Kuhlmann H.C. Accurate three-dimensional lid-driven cavity flow // J. Comput. Phys. 2005. 206, N 2. 536–558.

Поступила в редакцию 12.05.2013