Алгоритмы расщепления при решении многомерных задач

В. М. Ковеня
Институт вычислительных технологий СО РАН,630090,Новосибирск, Россия,
kovenya@ict.nsc.ru

Бурное развитие ЭВМ в 60-х годах прошлого века способствовало активному внедрению математического моделирования в различные области науки и техники, и, как следствие, интенсивному развитию численных методов решения задач математической физики. Численные методы, и в частности, разностные схемы, должны удовлетворять ряду требований, таких как достаточная точность, устойчивость, консервативность и экономичность, понимаемая как минимизация числа арифметических операций на решение задач. При решении одномерных задач удовлетворение этим требованиям не вызывало затруднений, однако переход к решению многомерных задач потребовал разработки новых алгоритмов, так как обобщение предложенных ранее алгоритмов на многомерный случай приводило к потере экономичности вычислений, т.е. к существенному росту числа операций на узел сетки. И такие экономичные алгоритмы были предложены на основе методов расщепления (дробных шагов [1]), факторизации [2-4] и суммарной аппроксимации [5-8].

В работах Н.Н. Яненко [1] был предложен метод дробных шагов, послуживший основой для численного решения многомерных задач [7-10]. Основная идея метода – сведение решения многомерной задачи к решению их одномерных аналогов оказалась плодотворной. В дальнейшем идеология расщепления (дробных шагов) была успешно применена для решения различных классов задач. В докладе дается обзор методов расщепления и их развитие для численного решения уравнений в частных производных применительно к задачам аэро и гидродинамики [9-11].

При построении неявных разностных схем методы расщепления и факторизации позволяют свести решение исходных многомерных задач к решению их одномерных аналогов. Решение одномерных задач приводит к необходимости обращения матриц размером $m \times m$, где m– число уравнений, требующих $\approx m^3$ операций в каждом узле сетки. С ростом числа уравнений и размерности задач это приводит к степенному росту числа арифметических операций на узел сетки. Выходом их этой ситуации является введение расщепления в одномерных операторах таким образом, чтобы при сохранении безусловной устойчивости разностных схем их реализация могла бы находиться более эффективными алгоритмами. Такое расщепление трактуется как расщепление по физическим процессам [7-9].Отметим, что введение расщепления в исходной задаче приводит к появлению дополнительных членов в разностной схеме, отсутствующих в исходной системе уравнений - членов второго и более высокого порядка малости, что может приводить к ухудшению свойств численного алгоритма. Поэтому при построении экономичных алгоритмов расщепление операторов следует выбирать таким образом, чтобы минимизировать влияние этих членов при сохранении устойчивости схем.

При решении нелинейных уравнений неявными схемами расщепления и факторизации необходимо введение внутренних итераций (по нелинейности) или использование других подходов. Более эффективным может оказаться метод предиктор – корректор, в котором на этапе предиктора используются схемы расщепления, а на этапе корректора восстанавливается консервативность схемы, обеспечивающая выполнение разностных законов сохранения. Данный подход и описывается в настоящем докладе на примере уравнений Навье-Стокса сжимаемого газа и несжимаемой жидкости.

Разностные схемы для уравнений Навье-Стокса сжимаемого газа

Построение разностных схем решения многомерных задач проведем на примере уравнений Навье – Стокса сжимаемого теплопроводного газа, ограничившись для простоты изложения двумерным случаем. Представим их в дивергентном и недивергентном виде

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}=\mathbf{W}=-\sum_{j=1}^{2}\frac{\partial \mathbf{W}_j}{\partial x_j},\quad \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t}=-\sum_{j=1}^{2}\mathbf{B}_j\mathbf{f}+\mathbf{\Phi},\quad p=p(\rho,e),\quad e=e(T,),\text{ где} \tag{1}$$

$$\mathbf{U}=\begin{pmatrix}\rho\\ \rho v_1\\ \rho v_2\\ E\end{pmatrix},\quad \mathbf{W}_j=\begin{pmatrix}\rho v_j\\ \rho v_1 v_j-\delta_j^1 p-\tau_{1j}\\ \rho v_2 v_j-\delta_j^2 p-\tau_{2j}\\ v_j(E+p)-\kappa\dfrac{\partial T}{\partial x_j}-\sum\limits_{i=1}^{2}v_j\tau_{ij}\end{pmatrix},\quad \begin{array}{c} E=\rho\left[e+(v_1^2+v_2^2)/2\right],\quad \lambda=-2\mu/3,\\ \tau_{ij}=\delta_{ij}\lambda div\mathbf{V}+\mu(\dfrac{\partial v_i}{\partial x_j}+\dfrac{\partial v_j}{\partial x_i}).\end{array}.$$

и будем полагать известными зависимости коэффициентов вязкости и теплопроводности μ,κ. Выбор вектора $\mathbf{f}$ задает форму оператора $\mathbf{B}$, которая для различных компонент вектора $\mathbf{f}$ различна, что дает возможность строить различные классы разностных схем. Пусть, для определенности, уравнение состояния задано в виде $p=(\gamma-1)\rho e$. Выберем в качестве искомых функций плотность, импульс и температуру и тогда в (1) будем иметь

$$\mathbf{f}=\begin{pmatrix}\rho\\ \rho v_1\\ \rho v_2\\ T\end{pmatrix}, B_j=\begin{pmatrix} d_j v_j & 0 & 0 & 0\\ 0 & d_j v_j-b_j^1 & 0 & d_j a_j^1\\ 0 & 0 & d_j v_j-b_j^2 & d_j a_j^2\\ 0 & c_j^1 d_j\dfrac{1}{\rho} & c_j^2 d_j\dfrac{1}{\rho} & v_j d_j-b_j^3\end{pmatrix}, \text{ где}$$

$$d_j=\frac{\partial}{\partial x_j}, a_j^i=\delta_j^i(\gamma-1)\rho c_v, c_j^i=\delta_j^i(\gamma-1)T, b_j^i=d_j(\mu+\delta_j^i\lambda)d_j,\ b_j^3=\frac{1}{\rho c_v}d_j\kappa d_j\ (i,j=1,2),$$

а вектор $\mathbf{\Phi}$ содержит оставшиеся члены уравнений. Отметим, что в операторах B_j исходные уравнения записаны в консервативной форме, что позволяет упростить построение схем.

Введем в расчетной области разностную сетку с временным τ и пространственными h_j шагами соответственно. Аппроксимируем первые производные в операторах B_j разностными операторами Λ_j или $\overline{\Lambda}_j$ с порядком $O(h_j)$ по формулам (см., например,[9]): если $v_j\le 0$, то $\Lambda_j=\Lambda_{j+}$, $\overline{\Lambda}_j=\Lambda_{j-}$ и если $v_j\ge 0$, то $\Lambda_j=\Lambda_{j-}$, $\overline{\Lambda}_j=\Lambda_{j+}$, где $T_{\pm 1}f_l=f_{l\pm 1}$- оператор сдвига. Вторые производные в B_j и вектор потоков $\mathbf{W}$ аппроксимируем симметричными операторами с порядком $O(h^2)$. Тогда, с учетом введенных обозначений

$$B_{jh}=\begin{pmatrix} \Lambda_j v_j & 0 & 0 & 0\\ 0 & \Lambda_j v_j-b_j^1 & 0 & \overline{\Lambda}_j a_j^1\\ 0 & 0 & \Lambda_j v_j-b_j^2 & \overline{\Lambda}_j a_j^2\\ 0 & c_j^1\Lambda_j\dfrac{1}{\rho} & c_j^2\Lambda_j\dfrac{1}{\rho} & v_j\Lambda_j-b_j^3\end{pmatrix},\ \mathbf{W}_h=\mathbf{W}+O(h^2).$$

Нефакторизованная разностная схема предиктор-корректор

$$(I+\tau\alpha\sum_{j=1}^{2}B_{jh})\mathbf{f}^{n+1/2}=\mathbf{f}^n,\quad \frac{\mathbf{U}^{n+1}-\mathbf{U}^{n+1}}{\tau}=\mathbf{W}_h^{\,n+1/2} \tag{2}$$

аппроксимирует уравнения Навье-Стокса (1) с порядком $O(\tau^2+h^2)$ при $\alpha=0.5+O(\tau)$, безусловно устойчива при $\alpha\ge 0.5$и реализуется матричными прогонками. Схемы приближенной факторизации или схема предиктор-корректор с расщеплением по направлениям на этапе корректора (см. [4,10])

$$(I+\tau\alpha B_{1h})\mathbf{f}^{n+1/4}=\mathbf{f}^{n},\quad (I+\tau\alpha B_{2h})\mathbf{f}^{n+1/2}=\mathbf{f}^{n+1/4}$$
$$\frac{\mathbf{U}^{n+1}-\mathbf{U}^{n+1}}{\tau}=\mathbf{W}^{n+1/2} \qquad (3)$$

аппроксимирует исходные уравнения с тем же порядком, что и базовая схема (2). Она реализуется на этапе предиктора векторными прогонками по каждому направлению.

Для построения экономичных разностных схем введем оптимальное расщепление операторов $B_j = B_j^1 + B_j^2$ таким образом, чтобы его влияние расщепления было минимальным (см. замечание 1). Этому требованию удовлетворяет расщепление в виде

$$B_j^1=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \overline{\Lambda}_j a_j^1\\ 0 & 0 & 0 & \overline{\Lambda}_j a_j^2\\ 0 & c_j^1\Lambda_j\dfrac{1}{\rho} & c_j^2\Lambda_j\dfrac{1}{\rho} & \nu_j\Lambda_j-b_j^3\end{pmatrix},\ B_j^2=\begin{pmatrix}\Lambda_j\nu_j & 0 & 0 & 0\\ 0 & \Lambda_j\nu_j-b_j^1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \Lambda_j\nu_j-b_j^2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}.$$

Для численного решения уравнений Навье-Стокса (1) рассмотрим схему предиктор–корректор

$$(I+\tau\alpha B_{1h}^1)\mathbf{f}^{n+1/8}=\mathbf{f}^{n},\quad (I+\tau\alpha B_{1h}^2)\mathbf{f}^{n+2/8}=\mathbf{f}^{n+1/8}$$
$$(I+\tau\alpha B_{2h}^1)\mathbf{f}^{n+3/8}=\mathbf{f}^{n+2/8},\quad (I+\tau\alpha B_{2h}^2)\mathbf{f}^{n+1/2}=\mathbf{f}^{n+3/8} \qquad (4)$$
$$\frac{\mathbf{U}^{n+1}-\mathbf{U}^{n+1}}{\tau}=\mathbf{W}^{n+1/2}$$

Она аппроксимирует исходные уравнения с порядком $O(\tau^2+h^2)$ при $\alpha=0.5+O(\tau)$, реализуется скалярными прогонками и консервативна и, как показывает линейный анализ устойчивости, является безусловно устойчивой при $\alpha\geq 0.5$. Ее реализация на этапе предиктора сводится к трехточечным скалярным прогонкам (см., например. [9,10]), причем число скалярных прогонок по каждому направлению совпадает с числом уравнений. На этапе корректора значения функций вычисляются явно.

Замечание 1. Остановимся на исследовании диссипативных свойств разностных схем. После исключения промежуточных шагов на этапе предиктора схема (3) приводится к виду

$$\prod_{j=2}^{2}(I+\tau\alpha B_{jh})\mathbf{f}^{n+1/2}=\mathbf{f}^{n},\quad \frac{\mathbf{U}^{n+1}-\mathbf{U}^{n+1}}{\tau}=\mathbf{W}^{n+1/2}$$

и ее отличие от нефакторизованной схемы (2) состоит в наличии дополнительных членов

$$D=\prod_{j=1}^{2}(I+\tau\alpha B_{jh})-(I+\tau\alpha\sum_{j=1}^{2}B_{jh})=\tau^2\alpha^2B_{1h}B_{2h}\quad \text{порядка } O(\tau^2).$$

Схема предиктор-корректор (4) приводится к виду

$$\prod_{j=2}^{2}(I+\tau\alpha B_{jh}+\tau^2\alpha^2B_{jh}^1B_{jh}^2)\mathbf{f}^{n+1/2}=\mathbf{f}^{n},\quad \frac{\mathbf{U}^{n+1}-\mathbf{U}^{n+1}}{\tau}=\mathbf{W}^{n+1/2},$$

т.е. введение расщепления одномерных операторов приводит к появлению дополнительных диссипативных членов также второго порядка малости, как и в схеме (3), причем число дополнительных членов минимально, так как матричные операторы содержат ненулевые члены лишь в уравнении энергии. Напомним, что схема (4) в отличие от (3) реализуется на дробных шагах скалярными прогонками.

При проведении численных расчетов обычно применяются неравномерные сетки путем введения преобразования координат, переводящие исходную расчетную область в единичный квадрат или полосу, а требуемое сгущение координат задается преобразованием координат (см., например [9,10]). Отметим, что и в новых координатах система уравнений Навье-Стокса вновь может быть записана в дивергентной форме, причем структура матричных операторов B_j сохраняется, что позволяет применять рассмотренные выше алгоритмы.

Схемы для уравнений Навье-Стокса вязкой несжимаемой жидкости.

Рассмотрим уравнения Навье-Стокса вязкой несжимаемой жидкости в декартовых координатах в векторном виде:

$$M\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = -\mathbf{W} = -\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial \mathbf{W}_j}{\partial x_j},\quad M\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} + B\mathbf{f} = 0,\quad B = \sum_{j=0}^{3} B_j \text{ , где} \tag{5}$$

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} p \\ v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix},\ \mathbf{W}_j = \begin{pmatrix} v_j \\ v_1 v_j + p - \tau_{1j} \\ v_2 v_j + \delta_j^2 p - \tau_{2j} \\ v_3 v_j + \delta_j^3 p - \tau_{3j} \end{pmatrix},\quad B_0 = \begin{pmatrix} 0 & d_1 & d_2 & d_3 \\ d_1 & 0 & 0 & 0 \\ d_2 & 0 & 0 & 0 \\ d_3 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad B_j = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_j^1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_j^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_j^3 \end{pmatrix},$$

$d_j = \dfrac{\partial}{\partial x_j}$, $b_j^i = v_j d_j - (1+\delta_j^i)\mu d_j d_j$.Отметим, что матрица M в (5) вырожденная. При записи уравнений (5) матричный оператор B представлен в виде расщепления по физическим процессам и пространственным направлениям. Оператор B_0 учитывает члены в уравнении неразрывности и члены с давлением в уравнениях движения, а операторы B_j $(j = 1,2,3)$ - конвективные и вязкие члены в уравнениях движения. Отметим эквивалентность представления уравнений (5) в дивергентном и недивергентном виде. Определим сеточные функции в узлах сетки и аппроксимируем первые и вторые производные симметричными операторами со вторым порядком.

Для численного решения уравнений (5) рассмотрим разностную схему (см. [12])

$$(M + \tau\alpha\sum_{j=0}^{3} B_{jh})\frac{\mathbf{f}^{n+1} - \mathbf{f}^{n}}{\tau} = -\mathbf{W}_h^n \tag{6}$$

Она линейна относительно $(n+1)$- го слоя и аппроксимирует уравнения (2) с порядком $O(\tau^2 + h^2)$ при $\alpha = 0.5$. Хотя матрица М в (6) и является вырожденной, справедливо приближенное равенство

$$M + \tau\alpha B_h = (M + \tau\alpha B_{0h})\prod_{j=1}^{3}(I + \tau\alpha B_{jh}) + O(\tau^2)$$

и тогда вместо схемы (6) может быть рассмотрена схема приближенной факторизации

$$(M + \tau\alpha B_{0h})\prod_{j=1}^{3}(I + \tau\alpha B_{jh})\frac{\mathbf{f}^{n+1} - \mathbf{f}^{n}}{\tau} = -\mathbf{W}_h^n, \tag{7}$$

аппроксимирующая исходные уравнения с тем же порядком, что и базовая схема (6). Ей эквивалентна схема в дробных шагах

$$
\begin{gathered}
\boldsymbol{\xi}^n = -\mathbf{W}_h^n, \\
(M + \tau\alpha B_{0h})\boldsymbol{\xi}^{n+1/2} = \boldsymbol{\xi}^n, \quad (I + \tau\alpha B_{1h})\boldsymbol{\xi}^{n+4/6} = \boldsymbol{\xi}^{n+1/2}, \\
(I + \tau\alpha B_{2h})\boldsymbol{\xi}^{n+5/6} = \boldsymbol{\xi}^{n+4/6}, \quad (I + \tau\alpha B_{3h})\boldsymbol{\xi}^{n+1} = \boldsymbol{\xi}^{n+5/6}, \\
\mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{f}^{n+1} + \tau\boldsymbol{\xi}^{n+1}
\end{gathered} \tag{8}
$$

Остановимся на ее реализации (см.[10]). На нулевом шаге значения вектора невязок $\boldsymbol{\xi} = (\xi_p, \xi_1, \xi_2, \xi_3)^T$ во внутренних узлах области вычисляется явно из первого уравнения (8). На первом дробном шаге схемы (8) решение системы разностных уравнений

$$
\tau\alpha \sum_{j=1}^{3} \Lambda_j \xi_j^{n+1/2} = \xi_p^n, \quad \xi_l^{n+1/2} = \xi_l^n - \tau\alpha\Lambda_l \xi_p^{n+1/2} (l = 1, 2, 3),
$$

после исключения невязок для компонент скорости из уравнения неразрывности, сводится к решению уравнения Пуассона

$$
\tau\alpha \sum_{j=1}^{3} \Lambda_{jj} \xi_p^{n+1/2} = f_h, \quad f_p^n = \sum_{j=1}^{3} \Lambda_j \xi_j^n - \frac{1}{\tau\alpha} \xi_p^n \ ,
$$

Его решение находится как предельное решение нестационарного уравнения методом установления, например, по схеме приближенной факторизации

$$
\prod_{j=1}^{3} (I - \tau\alpha\Lambda_{jj}) \frac{\xi_p^{\nu+1} - \xi_p^{\nu}}{\tau} = \sum_{j=1}^{3} \Lambda_{jj} \xi_p^{\nu} - f_h, \tag{9}
$$

реализуемой скалярными прогонками по каждому пространственному направлению. На последующих дробных шагах в схеме (8) система разностных уравнений

$$
(I + \tau\alpha B_{jh})\boldsymbol{\xi}^{n+(3+j)/6} = \boldsymbol{\xi}^{n+(2+j)/6} \quad (j = 1, 2, 3),
$$

реализуется скалярными прогонками для каждой компоненты вектора скорости. Наконец, новые значения функций вычисляются явно из последнего уравнения схемы (8). Отметим, что в предложенном алгоритме разностное уравнение неразрывности выполняется точно. Предложенная разностная схема пригодна для решения как нестационарных, так и стационарных задач.

По данным алгоритмам проведены многочисленные расчеты течений вязкого сжимаемого газа и несжимаемой жидкости. Некоторые примеры расчетов приведены в докладе.

Литература

1. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука , 1967
2. Douglas J. Alternating direction method for three space variables, Num. math., 1962, № 4
3. J. Douglas, jr., H.H. Rachford, jr. On the numerical solution of heat conditional problems in two and three space variables// Transactions of Amer. Math. Soc., 1956, V 82, № 2.
4. Beam R.M., Warming R. F. Implicit factored scheme for the compressible Navier-Stokes equations // AIAA .j.-1978, v 16, N 4.
5. Самарский А.А. Теория разностных схем. М: Наука, 1977.
6. Годунов С.К., Рябенький В.С. Разностные схемы (Введение в теорию), М: Наука,1973
7. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М: Наука, 1980
8. Шокин Ю.И. Метод дифференциального приближения. Новосибирск: Наука,1979
9. Ковеня В.М., Яненко Н.Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики. Новосибирск: Наука, 1981
10. Ковеня В.М. Разностные методы решения многомерных задач: Курс лекций,- Новосибирск: Изд-во Новосиб. гос. ун-та, 2004
11. Ковеня В.М., Слюняев А.Ю. Алгоритмы расщепления при решении уравнений Навье - Стокса // ЖВМ и МФ, 2009, т. 49, № 4
12. Ковеня В.М. Об одном алгоритме решения уравнений Навье-Стокса вязкой несжимаемой жидкости // Вычислительные технологии, 2006. – т. 11, № 2.