

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

В. А. КАЛІОН

**ОБЧИСЛЮВАЛЬНА
ГІДРОМЕХАНІКА**

РІВНЯННЯ НАВ'Є – СТОКСА

Навчальний посібник



УДК 532+(075.8)
ББК 22.253я73
К17

Рецензенти:

д-р фіз.-мат. наук, проф. О. А. Гуржій,
канд. фіз.-мат. наук, доц. Ю. В. Гончаренко

*Рекомендовано до друку
вченою радою механіко-математичного факультету
(протокол № 10 від 30 травня 2016 року)*

*Ухвалено науково-методичною радою
Київського національного університету імені Тараса Шевченка
10 жовтня 2016 року*

Каліон В. А.

К17 Обчислювальна гідромеханіка. Рівняння Нав'є – Стокса :
навч. посіб. / В. А. Каліон. – К. : Видавничо-поліграфічний
центр "Київський університет", 2016. – 221 с.

ISBN 978-966-439-402-1

Подано основні положення обчислювальної гідромеханіки. До кожного розділу підібрано характерні задачі для виконання на лабораторних практикумах, а також для самостійної роботи.

Розглянуто використання числових методів для розв'язання крайових задач для параболізованої та повної системи рівнянь Нав'є – Стокса. Для задачі про рух рідини з вільною поверхнею наведено метод сіток, а також ефективний метод згладжених частинок. Посібник є продовженням книг "Обчислювальна гідромеханіка. Модельні задачі" та "Обчислювальна гідромеханіка. Примезовий шар та нев'язкі течії".

Для студентів механіко-математичного факультету університету. Може використовуватись як довідник для всіх, хто цікавиться числовими методами для розв'язання задач гідромеханіки.

УДК 532+(075.8)
ББК 22.253я73

ISBN 978-966-439-402-1

© Каліон В. А., 2016
© Київський національний університет
імені Тараса Шевченка,
ВПЦ "Київський університет", 2016

Основні позначення

$\underline{A} = \{a_{jk}\}$	Матриця з елементами a_{jk}
\underline{A}^{-1}	Матриця, що обернена до матриці \underline{A}
\underline{A}^T	Матриця, що транспонована до матриці \underline{A} (рядки замінено стовпцями)
$\{\underline{A}^k\}$	Послідовність матриць
$ \underline{A} $	Детермінант (визначник) матриці \underline{A}
$\sum_{i=1}^N a_i$	Сума елементів a_i для i від $i = 1$ до $i = N$
$\sum_{j \neq k} a_{jk}$	Сума елементів a_{jk} для всіх $j \neq k$
$\angle(\vec{n}, Ox)$	Кут між вектором \vec{n} і віссю координат Ox
α	Коефіцієнт дифузії [m^2/c]
ADI	Неявна схема змінних напрямків (Alternating-Direction-Implicit scheme)
CTI	Центрована за часом неявна схема (Central Time Implicit)
CG	Метод спряжених градієнтів (Conjugate Gradients Method)
D	Область обчислень
\bar{D}	Область обчислень D , що включає межу Γ

D_h	Дискретна область обчислень (множина вузлів на перетині ліній сітки)
D_h^0	Множина внутрішніх вузлів сітки
det	Визначник
d/ds ,	Звичайні похідні за $s = \{x, y, \dots\}$
$\Delta x, \Delta y$	Приріст за координатами x та y , відповідно
\underline{I}	Одинична матриця (одиниці на головній діагоналі й нулі скрізь, окрім головної діагоналі)
$\vec{f} = \{f_i\}$	Вектор з елементами f_i
$f(x,y), u(x,y)$	Функції двох змінних x, y
$f _a^b$	$f(b) - f(a)$
$\int_a^\beta f(x) dx$	Інтеграл від $f(x)$ на відрізку від α до β
FI	Чисто неявна схема (Fully Implicit scheme)
FTCS	Схема вперед за часом, центральна за простором (Forward in Time, Central in Space scheme)
FS	Схема "класики" (Frog Step scheme)
FVM	Метод скінченних об'ємів (Finite Volume Method)
$\phi(M)$	Значення функції ϕ у точці M області обчислень
G2LS	Узагальнена двошарова схема (Generalized 2-Layer scheme)
G3LS	Узагальнена тришарова схема (Generalized 3-Layer scheme)

Γ	Межа області обчислень
Γ_h	Множина межових вузлів сітки
G_j^n (ГЧП)	Головна частина послідовності
$\underline{J}^{(k)}$	Якобіан (матриця Якобі) на k -му кроці
i, j	Індекси (цілі: 0, 1, 2, 3, ...)
$()_{ij}$	Значення функції у вузлі (i, j) сітки
∇^2	Оператор Лапласа
LAEA	Система лінійних алгебраїчних рівнянь (Linear Algebraic Equation Array)
$L(u)$	Лінійний диференціальний оператор на функції u
$(\vec{a}, \vec{b}) = \sum_{k=1}^n a_k b_k$	Скалярний добуток векторів $\vec{a} = \{a_k\}$, $\vec{b} = \{b_k\}$
$\underline{L} \cdot \underline{V}$	Скалярний добуток матриць \underline{L} та \underline{V}
λ_k	Власні числа матриці
$\underline{\Lambda} = \{\lambda_{kj}\}$	Матриця, де $\lambda_{kk} = \lambda_k$, $\lambda_{k, k+1} = 1 \vee 0$; $\lambda_{kj} = 0$, $j < k$, $j > j + 1$ (права канонічна форма Жордана (Jordan))
M	Число Маха (Mach' number)
MFS	Метод дробових кроків (Method of Fractional Steps)
μ	Динамічний коефіцієнт в'язкості [Па · с]
\vec{n}	Вектор нормалі
$N \times M$	Розмірність матриці (N рядків M стовпців)

NX, NY	Кількість вузлів сітки в напрямках X та Y , відповідно
ODE	Звичайне диференціальне рівняння (Ordinary Differential Equation)
$O, O(\Delta x)^2$	Порядок мализни величини, величина порядку $(\Delta x)^2$, відповідно
PDE	Рівняння в частинних похідних (Partial Differential Equation)
p	Тиск [Па]
Pr	Число Прандтля (Prandtl number)
R, φ	Осі полярної системи координат
Re	Число Рейнольдса (Reynolds number)
R_{cell}	Сіткове число Рейнольдса (Cell Reynolds number)
ρ	Густина [кг/м ³]
sin, cos, tg	Синус, косинус та тангенс, відповідно
sh, ch	Гіперболічні синус та косинус, відповідно
SOR	Метод послідовної верхньої релаксації (Successive Over Relaxation Method)
τ	Напруження [Па]
T	Температура [К]
t	Час [с]
TDMA	Метод прогонки (Tri-Diagonal-Matrix Algorithm)
$\text{tr}(\underline{A})$	Слід матриці \underline{A} (сума діагональних елементів)
$[u]_{\Gamma}$	Значення функції u на межі області Γ

u_x, u_y	Частинні похідні першого порядку за x та y , відповідно
u_{xx}, u_{yy}, u_{xy}	Частинні похідні другого порядку за x та y , відповідно
u_{jk}^n	Функція u у вузлі (j,k) просторової сітки й у вузлі n за часом
$\underline{V} \cdot \vec{v}$	Матриця V , помножена на вектор \vec{v}
(x,y)	Точка на площині з координатами x та y (двовимірний випадок)
Ox, Oy	Осі декартової системи координат
(x_i, y_j)	Точка з координатами x_i та y_j , що належить дискретній області обчислень D_h
(x_0, y_0)	Координати початку відліку ліній сітки (точка $O \in D$)
$x \rightarrow i, y \rightarrow j$	Замінити x на i та y на j , відповідно
$ \cdot _n, \ \cdot\ _n$	Скалярна та векторна норми в n -вимірному просторі, відповідно

Передмова

Посібник підготовлено на основі лекцій, які читає автор для магістрів-механіків механіко-математичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка протягом останніх п'ятнадцяти років. Видання містить основні теоретичні положення обчислювальної гідромеханіки. До кожного розділу дібрано характерні задачі та вправи для практичних занять і практикумів на комп'ютері, які передбачено навчальним планом. Ці задачі та вправи також рекомендуються для самостійного розв'язання студентам, що спеціалізуються з комп'ютерної механіки. Автор сподівається, що виконання запропонованих задач і вправ сприятиме закріпленню матеріалу та його глибшому розумінню, а також уможливить практичне застосування отриманих знань. Знати – значить уміти.

Книгу умовно поділено на три частини. Перша та друга частини вже вийшли у світ окремими виданнями [6, 7]. Перша частина містить класичні розділи: диференціальні рівняння в частинних похідних та їх математична класифікація, основи методу сіток для розв'язання крайових задач для диференціальних рівнянь у частинних похідних еліптичного типу; методи розв'язання стаціонарних задач механіки суцільних середовищ, основи методу сіток для розв'язання задачі Коші та крайової задачі для диференціальних рівнянь у частинних похідних параболічного типу, використання методу сіток для розв'язання крайових задач для модельних лінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних, використання методу сіток для розв'язання крайових задач для модельних нелінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних (одновимірне рівняння Бюргерса для нев'язкої і в'язкої течій, багатовимірне рівняння Бюргерса для в'язкої течії). Тут розглянуто також метод прямих для розв'язання крайових задач для еліптичних, параболічних та гіперболічних рівнянь у частинних похідних.

Друга частина містить матеріал, який дозволяє читачу самостійно будувати алгоритми розв'язання складних дво- і тривимірних крайових задач комп'ютерної механіки, у тому

числі: методи розв'язання дво- і тривимірних крайових задач для рівнянь Ейлера (панельний метод, надзвукові нев'язкі течії, розрахунок сильних стрибків ущільнення, одновимірний несталий рух нев'язкої стисливої рідини), методи сіток для розв'язання дво- і тривимірних крайових задач для системи рівнянь типу рівнянь примежового шару, а також числові методи перетворення основних рівнянь і побудови розрахункових сіток. У додатку наведено основні моделі турбулентності, які можна використати у числових розрахунках примежового шару.

Третя частина, яку читач зараз тримає в руках, містить матеріал, що дозволить йому самостійно будувати алгоритми розв'язання дво- і тривимірних крайових задач для вкорочених і повних рівнянь Нав'є – Стокса. Окремий розділ книги присвячений найновішим методам розв'язання задач руху рідини з вільною поверхнею: VOF-алгоритму методу сіток та безсітковому SPH-алгоритму. У додатку наведено процедури багатовимірної оптимізації.

Посібник призначений для студентів механіко-математичних факультетів університетів, а також буде корисний усім, хто цікавиться використанням числових методів у задачах механіки.

Автор висловлює щире подяку завідувачу кафедри механіки суцільних середовищ механіко-математичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка професору Лимарченку Олегу Степановичу за підтримку при підготовці книги.

Автор висловлює також подяку рецензентам: професору НТУУ "Київський політехнічний інститут", доктору фізико-математичних наук, Гуржію Олександрю Андрійовичу та доценту Київського національного університету імені Тараса Шевченка Гончаренку Юрію Вікторовичу.

Вступ

Для деяких задач, що описують течію в'язкої рідини, не вдається одержати точний розв'язок при використанні спрощених рівнянь примежового шару [7]. Прикладами таких задач є взаємодія ударної хвилі з примежовим шаром, обтікання вхідної кромки, деякі хвильові течії у сліді, а також інші течії із сильною в'язко-нев'язкою взаємодією і великими відривними зонами. У цих випадках, а також при прямому моделюванні турбулентних течій, необхідно розв'язувати повні рівняння Нав'є – Стокса. На жаль, повні рівняння Нав'є – Стокса дуже складні, їх розв'язання потребує великих витрат машинного часу й ресурсів комп'ютера. Проте для нестисливої рідини рівняння істотно спрощуються і відповідно зменшується час, необхідний для їх розв'язання. Зауважимо, що при розв'язанні стаціонарних рівнянь Нав'є – Стокса для нестисливої рідини потрібно розв'язувати мішану систему еліптично-параболічних рівнянь, а для стисливої рідини – систему гіперболічно-параболічних рівнянь. Нестационарні рівняння Нав'є – Стокса для двовимірного випадку мають параболічний тип, а для тривимірного – параболічно-гіперболічний. Для розв'язання системи рівнянь Нав'є – Стокса у цих випадках використовують різні числові методи, які ми й розглядатимемо далі.

Крайові задачі для повних рівнянь Нав'є – Стокса є найскладнішими з погляду їх розв'язання засобами комп'ютерної гідромеханіки. Особливо це стосується тривимірних течій. Саме тут ми зустрінемося з найскладнішими алгоритмами, саме тут нам знадобляться процедури розпаралелення, векторні та матричні процесори і суперкомп'ютери–кластери із швидкодією в сотні терафлопсів (або навіть десятки пентафлопсів) та з терабайтами оперативної пам'яті¹.

Більшість природних течій рідини і газу – турбулентні. Хоча концептуально для рівнянь Нав'є – Стокса можливе пряме

¹ **FLOPS (FL**oating-point **O**perations **P**er **S**econd) – кількість операцій із плаваючою крапкою за секунду. Терафлопс = 10^{12} флопсів. Пентафлопс = 10^{15} флопсів. Байт = 8 біт. Терабайт = 10^{12} байт.

моделювання турбулентності та через складнощі самих рівнянь Нав'є – Стокса для врахування впливу турбулентності найчастіше використовують прості моделі – це моделі вихрової в'язкості, алгебраїчні моделі та $(k-\epsilon)$ -модель [7]. Застосування моделей турбулентності дозволяє розв'язувати дуже складні системи рівнянь для складних областей без надмірного збільшення часу обчислення. Причому для чисел Маха $M \leq 5$ можна безпосередньо використовувати моделі турбулентності, що розроблені для нестисливих течій, якщо припустити зміну середніх значень густини у просторі й часі. Важливою є також та обставина, що найскладніша з моделей турбулентності – $(k-\epsilon)$ -модель – лінійна. А отже, її розв'язання набагато простіше за розв'язання нелінійних рівнянь Нав'є – Стокса і Рейнольдса для осередненої течії. Тому ми не розглядатимемо безпосередньо розв'язання крайових задач для турбулентних течій рідини, але постійно враховуватимемо особливості розрахунків таких течій у кожному конкретному випадку.

Якщо розглядувана течія дозвукова або трансзвукова і відсутні зовнішні джерела теплоти, рівняння енергії розв'язується незалежно, або навіть спрощується до алгебраїчного на основі гіпотези про збереження ентальпії.

Для стисливих течій при великих числах Рейнольдса, якщо відсутні великі зони зворотної течії, ефекти в'язкості й турбулентності суттєві лише поблизу твердих поверхонь. Отже, можна зберігати в рівняннях дисипативні члени, які пов'язані з напрямком нормалі до поверхні. Ця ідея є основою *наближення тонкого шару*. Використання наближення тонкого шару приводить до суттєвого спрощення програмування, особливо це стосується неявних методів.

Для дослідників, які не мають вільного доступу до суперкомп'ютера, доцільним є підхід, коли вся область течії поділяється на окремі підобласті таким чином, щоб у кожній підобласті можна було б використати простіші моделі на основі рівнянь Ейлера і примежового шару [7].

При трансзвукових течіях біля тривимірних крил складна взаємодія стрибка ущільнення із примежовим шаром приводить до утворення локальних відривних течій. Тоді поблизу стінки

потрібно скористатися повними рівняннями Нав'є – Стокса, а далеко від стінки – рівняннями Ейлера або навіть потенціальними рівняннями.

Нестисливість течії приводить до додаткових труднощів. Наприклад, у рівняння нерозривності входять лише компоненти швидкості, а отже, немає прямого зв'язку з тиском, який для стисливих течій здійснюється через густину. Тому необхідно на кожному кроці додатково розв'язувати крайову задачу для рівняння Пуассона для тиску.

У двовимірному випадку явного використання рівняння нерозривності можна взагалі позбутися, якщо ввести до розгляду *функцію течії*. Введення до того ж рівняння перенесення для завихреності дозволяє отримати опис течії в змінних *завихреність-функція* течії, що значно спрощує розв'язання задачі. Проте узагальнення цього підходу на тривимірний випадок не настільки очевидне, оскільки для тривимірних течій функція течії не існує. Хоча інколи для тривимірних течій поряд із вектором завихреності вводять векторний потенціал. Проте кількість рівнянь (шість), які необхідно розв'язати в цьому випадку зводить нанівець усі переваги подібного підходу.

На рис.1 зображено течію у двогранному куті (кут, що утворений двома площинами, які перетинаються). Це характерний приклад течії, коли використання рівнянь прирежового шару неможливе, а використання повних рівнянь Нав'є – Стокса є недоцільним. Як показано в [5, 7, 36], до

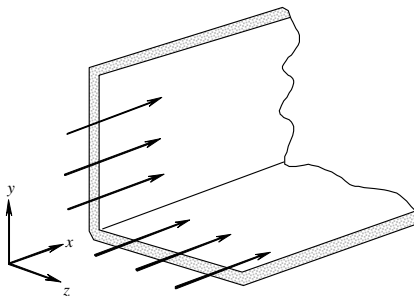


Рис.1. Течія у двогранному куті

рівнянь примежового шару включають дифузійні члени тільки по одній, так званій нормальній координаті. Проте поблизу вершини двогранного кута похідні по обох нормальних напрямках, що входять у в'язкі члени, будуть величинами одного порядку. Такі конфігурації часто зустрічаються, наприклад, у каналах прямокутного перерізу або в місцях з'єднання крило-фюзеляж. Очевидно, що в цьому випадку для розрахунку полів течій можна використовувати повні рівняння Нав'є – Стокса, як втім і для будь-якої іншої течії, де рівняння примежового шару не працюють. У деяких випадках лише їх і можна застосовувати.

Проте для багатьох пов'язаних із розрахунками в'язких течій задач, для яких рівняння примежового шару не працюють, можна використати систему рівнянь, яка за складністю займає проміжне положення між повними рівняннями Нав'є – Стокса і рівняннями примежового шару. Ці рівняння належать до класу так званих укорочених рівнянь Нав'є – Стокса (RNS від англійського Reduced Navier – Stokes) і розглянуті у першому розділі. У цей клас потрапляє декілька систем рівнянь: рівняння Нав'є – Стокса в наближенні тонкого шару, параболізовані рівняння Нав'є – Стокса, частково параболізовані рівняння Нав'є – Стокса, рівняння в'язкого ударного шару та конічні рівняння Нав'є – Стокса. Системи рівнянь цього класу мають таку особливість, що їх можна застосовувати як для нев'язкої, так і для в'язкої областей поля течії. Крім того, у нормальному напрямку всі ці рівняння мають ненульовий градієнт тиску. Останнє особливо необхідне у випадку, коли задачі для в'язкої і нев'язкої областей течії розв'язують одночасно.

Використання RNS-рівняння замість повних рівнянь Нав'є – Стокса має дві великі переваги. По-перше, ці рівняння складаються з меншої кількості членів, що скорочує час розрахунку. По-друге, що ще більш важливо, у *стаціонарному* випадку рівняння цього класу мають (при дотриманні деяких умов) за координатою в напрямку основного потоку *гіперболічно-параболічний тип*. Іншими словами, рівняння Нав'є – Стокса параболізуються у поздовжньому напрямку. Як наслідок, RNS-рівняння можна розв'язувати маршовими

методами, подібними до тих, які застосовуються і для розв'язання системи рівнянь примежового шару. Остання обставина зменшує для стисливої рідини кількість вимірів із чотирьох до трьох просторових. Тим самим досягають істотної економії пам'яті комп'ютера і зменшують час розрахунку.

Перша вдала спроба математичного моделювання складних течій рідини з вільною поверхнею належить Харлоу [55], який у 1965 році запропонував метод (Ейлера – Лагранжа) частинок у клітинці (PIC). Згідно з алгоритмом PIC-методу для відслідковування об'ємів використовувалися частинки-маркери, які рухалися через сітку Ейлера. Причому різні рідини зображалися маркерами різного типу (кольору), а густина частинок кожного типу у клітинці розрахункової сітки відповідала густині цієї рідини у клітинці. Клітинки сітки містять поверхню поділу, якщо в них містяться частинки-маркери двох різних типів. Таким чином, оскільки поверхня поділу може бути локально реконструйована в будь-який момент часу, то проблем, пов'язаних зі взаємодією поверхонь поділу із сильними деформаціями рідкого середовища, стає суттєво менше, і метод PIC досить просто узагальнити для довільної кількості рідин. Відмітимо, що кожна частинка-маркер тут має сталу масу, імпульс і внутрішню енергію, які переносяться з однієї клітинки сітки Ейлера в іншу, коли частинка-маркер перетинає їхню межу. Положення частинки-маркера в кожний момент часу знаходять, розв'язуючи рівняння руху Лагранжа.

Метод маркерів у клітинці (MAC) для розв'язання задач із вільною поверхнею запропоновано Ораном і Борисом [9] пізніше. Цей метод подібний PIC-методу, але тут уже частинки-маркери не мають маси, імпульсу і внутрішньої енергії. У цьому випадку для опису руху кожної частинки-маркера також потрібно розв'язувати додаткове рівняння руху Лагранжа.

До методів відслідковування об'ємів належить і найефективніший та найновіший серед них чисто ейлерів метод об'ємів рідини VOF [53, 54, 56, 59, 71, 80]. Ефективність методу VOF пов'язана, у першу чергу, із тією обставиною, що згідно з VOF-алгоритмом процедура відслідковування об'єму включає

розв'язання лише одного рівняння перенесення для параметра, що являє собою характеристику (колір) поверхні поділу (вільної поверхні). Докладно VOF-алгоритм описано у третьому розділі.

Зазначимо, що всі розглянуті вище алгоритми відслідковування об'ємів мають дуже суттєві недоліки, що характерні для всіх алгоритмів, які використовують сітки, – це числова дифузія та числова дисперсія. Числова дифузія спотворює одержаний числовий розв'язок. А загальним наслідком числової дисперсії є проблема дефекту маси. При цьому крок за часом стає дуже малим і розв'язок розбігається. Досі відомо єдиний сітковий алгоритм, в якому немає проблеми дефекту маси, за рахунок вдалої комбінації методів VOF і PIC. Проте його реалізація досить складна і для тривимірного випадку є секретом авторів [54].

Безсіткові методи (явний метод гідродинаміки згладжених частинок (SPH) [25, 30, 31, 49, 51, 64–66, 75, 77, 80] та неявний метод рухливих частинок (MPS) [53]) опираються тільки на модель Лагранжа і не використовують розрахункові сітки. Тому вони вільні й від числової дифузії, і від дефекту маси. Зараз лише почалося використання безсіткових методів у всіх сферах гідродинаміки, де спостерігається швидка зміна напрямку течії. Ці методи з успіхом використовуються при моделюванні складного руху рідини з вільною поверхнею, при моделюванні турбулентності з використанням моделі вихрової в'язкості (SPS), при моделюванні поведінки багатофазних сумішей, при моделюванні пересування річкового русла, при моделюванні плавання тіл, при моделюванні тривимірних течій тощо.

У методі SPH потік вважається трішки стисливим, а в методі MPS нестисливість потоку гарантується розв'язанням додаткового рівняння (подібного до рівняння вільної поверхні для VOF-алгоритму). Метод SPH вибрано тут для дослідження поведінки течії нестисливої в'язкої рідини з вільною поверхнею, бо його простіше реалізувати ніж метод MPS. Крім того, реалізації методу SPH для двовимірного (2D) і тривимірного (3D) випадків майже не відрізняються. Метод SPH описано у третьому розділі.

**МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ ВКОРОЧЕНИХ
РІВНЯНЬ НАВ'Є – СТОКСА****1.1. Рівняння Нав'є – Стокса в наближенні тонкого шару**

У наближенні тонкого шару в нестационарних рівняннях Нав'є – Стокса [33] нехтують в'язкими членами з похідними за напрямками, що паралельні поверхні тіла, але інші члени в рівняннях руху зберігають. Одна з основних позитивних якостей зберігання членів, якими звичайно нехтують в теорії примежового шару, полягає в можливості прямого розрахунку відривних і зворотних течій. Без зусиль розраховують і течії з великими градієнтами тиску в нормальному напрямку, наприклад, течії у двогранному куті (рис. 1.1).

Концепція наближення тонкого шару виникає також із детального розгляду типових випадків числового розв'язання повних рівнянь Нав'є – Стокса при великих числах Рейнольдса [20, 52]. У цих розрахунках значна частина ресурсів комп'ютера витрачається на обчислення нормальних градієнтів у примежовому шарі, бо для цього необхідна сітка з дуже малим кроком. У результаті градієнти в напрямках, що паралельні поверхні тіла, звичайно не мають адекватного розділення навіть якщо відповідні в'язкі члени у цих рівняннях і зберігаються. Отже, при числовому розв'язуванні рівнянь Нав'є – Стокса в багатьох випадках є сенс опускати члени, що не розділяються

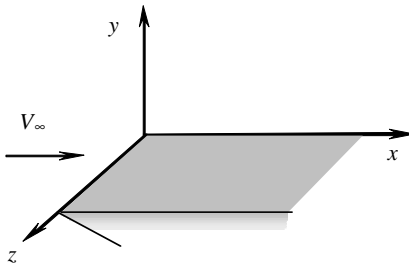


Рис. 1.1. Система координат та картина течії для наближення тонкого шару

адекватним чином, звичайно за умови, що вони малі. Ці міркування і приводять до рівнянь Нав'є – Стокса в наближенні тонкого шару.

Спрощуючи повні рівняння Нав'є – Стокса відповідно до наближення тонкого шару, одержуємо в декартовій системі координат для зображеної на рис. 1.1 течії такі рівняння:

рівняння нерозривності

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0, \quad (1.1)$$

рівняння руху за координатою x

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (p + \rho u^2) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho uv - \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho uw) = 0, \quad (1.2)$$

рівняння руху за координатою y

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y} \left(p + \rho v^2 - \frac{4}{3} \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho vw) = 0, \quad (1.3)$$

рівняння руху за координатою z

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho uw) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho vw - \mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} (p + \rho w^2) = 0, \quad (1.4)$$

рівняння енергії

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (E_t u + \rho u) + \frac{\partial}{\partial y} \left(E_t v + \rho v - \mu \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{4}{3} \mu v \frac{\partial v}{\partial y} - \right. \\ \left. - \mu w \frac{\partial w}{\partial y} - k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} (E_t w + \rho w) = 0. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Ці рівняння записано для ламінарної течії, але їх легко модифікувати і для турбулентної течії [7].

Для тіл складнішої форми необхідно відобразити поверхню тіла з фізичного простору на обчислювальний і вже там застосовувати наближення тонкого шару. Задамо це відображення перетворенням загального вигляду

$$\xi = \xi(x, y, z, t), \quad \eta = \eta(x, y, z, t), \quad \zeta = \zeta(x, y, z, t), \quad t = t, \quad (1.6)$$

і нехай поверхня тіла визначається рівнянням $\eta = 0$. Перетворені рівняння Нав'є – Стокса дивергентній формі мають вигляд

$$\left(\frac{\bar{U}}{J}\right)_t + \left(\frac{\bar{U}\xi_t + \bar{E}\xi_x + \bar{F}\xi_y + \bar{G}\xi_z}{J}\right)_\xi + \left(\frac{\bar{U}\eta_t + \bar{E}\eta_x + \bar{F}\eta_y + \bar{G}\eta_z}{J}\right)_\eta + \left(\frac{\bar{U}\zeta_t + \bar{E}\zeta_x + \bar{F}\zeta_y + \bar{G}\zeta_z}{J}\right)_\zeta = 0 \quad (1.7)$$

де

$$\bar{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E_t \end{bmatrix}, \quad \bar{E} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p - \tau_{xx} \\ \rho uv - \tau_{xy} \\ \rho u w - \tau_{xz} \\ (E_t + p)u - u\tau_{xx} - v\tau_{xy} - w\tau_{xz} + q_x \end{bmatrix}, \quad (1.8a)$$

$$\bar{F} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv - \tau_{xy} \\ \rho v^2 + p - \tau_{yy} \\ \rho vw - \tau_{yz} \\ (E_t + p)v - u\tau_{xy} - \\ -v\tau_{yy} - w\tau_{yz} + q_y \end{bmatrix}, \quad \bar{G} = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho uw - \tau_{xz} \\ \rho v w - \tau_{yz} \\ \rho w^2 + p - \tau_{zz} \\ (E_t + p)w - u\tau_{xz} - \\ -v\tau_{yz} - w\tau_{zz} + q_z \end{bmatrix}, \quad (1.8б)$$

J – якобіан перетворення [7].

Тепер застосуємо наближення тонкого шару до перетворених рівнянь Нав'є – Стокса. У межах цього наближення можна знехтувати усіма в'язкими членами, що містять частинні похідні за напрямками ξ та ζ . Рівняння тонкого шару запишемо в такому вигляді:

$$\frac{\partial U_2}{\partial t} + \frac{\partial E_2}{\partial \xi} + \frac{\partial F_2}{\partial \eta} + \frac{\partial G_2}{\partial \zeta} = \frac{\partial S_2}{\partial \eta}, \quad (1.9)$$

де

$$U_2 = U / J,$$

$$E_2 = \frac{1}{J} \left[\rho U; \rho u U + \xi_x p; \rho v U + \xi_y p; \rho w U + \xi_z p; (E_t + p)U - \xi_t p \right]^T, \quad (1.10a)$$

$$F_2 = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \rho V \\ \rho u V + \eta_x p \\ \rho v V + \eta_y p \\ \rho w V + \eta_z p \\ (E_t + p)V - \eta_t p \end{bmatrix}, \quad G_2 = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \rho W \\ \rho u W + \zeta_x p \\ \rho v W + \zeta_y p \\ \rho w W + \zeta_z p \\ (E_t + p)W - \zeta_t p \end{bmatrix}, \quad (1.10b)$$

а всі в'язкі члени містяться в S_2 :

$$S_2 = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} 0 \\ \mu(\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2)u_\eta + \frac{\mu}{3}(\eta_x u_\eta + \eta_y v_\eta + \eta_z w_\eta)\eta_x \\ \mu(\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2)v_\eta + \frac{\mu}{3}(\eta_x u_\eta + \eta_y v_\eta + \eta_z w_\eta)\eta_y \\ \mu(\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2)w_\eta + \frac{\mu}{3}(\eta_x u_\eta + \eta_y v_\eta + \eta_z w_\eta)\eta_z \\ (\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2) \left[\frac{\mu}{2}(u^2 + v^2 + w^2)_\eta + kT_\eta \right] + \\ + \frac{\mu}{3}(\eta_x u + \eta_y v + \eta_z w)(\eta_x u_\eta + \eta_y v_\eta + \eta_z w_\eta) \end{bmatrix}. \quad (1.11)$$

Для компактності вирази (1.10) записано через контраваріантні компоненти швидкості U , V та W , які визначаються у вигляді

$$\begin{aligned} U &= \xi_t + \xi_x u + \xi_y v + \xi_z w, & V &= \eta_t + \eta_x u + \eta_y v + \eta_z w, \\ W &= \zeta_t + \zeta_x u + \zeta_y v + \zeta_z w. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Рівняння тонкого шару утворюють мішану систему гіперболічно-параболічних рівнянь у частинних похідних, що залежать від часу. Тому для їх розв'язання можна використовувати всі скінченнорізницеві методи, придатні для розв'язання нестационарних рівнянь. Зауважимо, що ці самі методи застосовують і для розв'язання повних рівнянь Нав'є – Стокса для стисливого газу. Тому відкладемо обговорення

методів розв'язання рівнянь тонкого шару до розділу 2, де докладно розглядатимуться методи розв'язання повних рівнянь Нав'є – Стокса.

1.2. Параболізовані рівняння Нав'є – Стокса

1.2.1. Виведення параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса

У цьому підрозділі RNS-рівняння будуть отримані з повних рівнянь Нав'є – Стокса для двовимірних стаціонарних стисливих та нестисливих ламінарних течій. Для опису турбулентних течій ці RNS-рівняння необхідно додатково модифікувати [7]. Проте сам процес виведення RNS-рівнянь для усереднених параметрів турбулентної течії по суті залишається тим самим, бо його також засновано на порівнянні порядків величин. Зауважимо, що виведення параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса в основному збігається з виведенням рівнянь примежового шару. Ефекти в'язкості тут також вважаються істотними лише в шарі, товщина якого δ мала порівняно з характерним розміром у напрямку потоку L . Для ламінарних примежових шарів величина δ/L має порядок $O(\text{Re}^{-1/2})$. Для типових чисел Рейнольдса $\text{Re} = 10^6$, це означає, що $\delta/L \approx 0,001$. Одна із причин необхідності виведення RNS-рівнянь пов'язана з потребою у розрахунках в'язких шарів, товщина яких більша, ніж товщина примежового шару. Так, для δ/L у діапазоні від 0.01 до 0.1, очевидно, варто використовувати RNS-рівняння. У свою чергу це означає, що в повних рівняннях Нав'є – Стокса можна опустити члени порядку $O((\delta/L)^2)$, але необхідно залишити члени порядку $O(\delta/L)$. Зауважимо, що при виведенні рівнянь примежового шару нехтувалися лише члени порядку $O(\delta/L)$.

Для стаціонарної ламінарної нестислової двовимірної течії рівняння Нав'є – Стокса в безрозмірній формі мають вигляд:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (1.13)$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{1}{\mathbf{Re}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (1.14)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1}{\mathbf{Re}} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right), \quad (1.15)$$

де число Рейнольдса $\mathbf{Re} = \rho U_\infty L / \mu$.

Для визначення відносної величини різних членів у рівняннях (1.13)–(1.15) вважатимемо, що u та v $\partial/\partial x$ мають порядок $O(1)$, $\partial/\partial y$ – порядок $O(L/\delta)$, а $\partial^2/\partial y^2$ – порядок $\approx O((L/\delta)^2)$. Оскільки тоді $v \approx O(\delta/L)$, то рівняння (1.13) спростити не вдається. Усі члени в лівій частині рівняння (1.14) мають порядок мализни $\approx O(1)$. У правій частині рівняння (1.14) $\partial^2 u/\partial x^2 \approx O(1)$, а $\partial^2 u/\partial y^2 \approx O((L/\delta)^2)$; тому членом $\partial^2 u/\partial x^2$ можна знехтувати. У класичній теорії примежового шару величина $1/\mathbf{Re}$ має порядок $O((\delta/L)^2)$. У наближенні RNS-рівнянь передбачається, що $1/\mathbf{Re} \ll O((\delta/L)^2)$; тобто $1/\mathbf{Re}$ має порядок $O((\delta/L)^3)$, а, отже, член $(1/\mathbf{Re}) \partial^2 u/\partial y^2$ має порядок $O(\delta/L)$. Усі члени в лівій частині рівняння (1.15) мають порядок $O(\delta/L)$. У правій частині порядок члена $(1/\mathbf{Re}) \partial^2 v/\partial x^2$ дорівнює $O((\delta/L)^4)$, а порядок члена $(1/\mathbf{Re}) \partial^2 v/\partial y^2 \approx O((\delta/L)^2)$. Тому похідною $\partial^2 v/\partial x^2$ можна знехтувати. Таким чином, RNS-рівняння мають вигляд:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (1.16)$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{1}{\mathbf{Re}} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (1.17)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1}{\mathbf{Re}} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}. \quad (1.18)$$

Згідно із класичною теорією примежового шару рівняння (1.18) спрощується до вигляду $\partial p/\partial y = 0$. Проте у випадку товстіших в'язких шарів, для розрахунку яких і вводять RNS-рівняння, слід зберегти всі члени у рівнянні (1.18).

Зауваження:

- При значній кривині лінії течії в (1.18) потрібно також включити додатковий відцентровий член. При використанні узагальнених криволінійних координат, які звичайно вводять для фізичних областей складної форми, цей член виникає природним чином.
- Відповідно до проведеного аналізу, порядок члена $(1/\mathbf{Re}) \partial^2 v / \partial y^2$ буде $O((\delta/L)^2)$, і цим членом Рубін [70] рекомендує також знехтувати. У розглянутій вище системі RNS-рівнянь цей член збережено, оскільки він не приводить до еліптичної взаємодії. А пов'язана з ним додаткова дисипація є корисною при числових розрахунках.
- Якщо знехтувати в'язкістю, то рівняння (1.16)–(1.18) зводяться до рівнянь Ейлера, що описують незбурену течію далеко від тіла.

Крайові умови для нестисливих RNS-рівнянь залежать від типу системи (1.16)–(1.18).

Результуюча система рівнянь для стаціонарного руху стисливої рідини в декартовій системі координат $Oxuz$ у наближенні тонкого шару виглядає так (x – поздовжній напрямок):

рівняння нерозривності

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0, \quad (1.19)$$

рівняння руху за координатою x

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} + \rho w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right), \quad (1.20)$$

рівняння руху за координатою y

$$\begin{aligned} \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} + \rho w \frac{\partial v}{\partial z} = & -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (1.21)$$

рівняння руху за координатою z

$$\begin{aligned} \rho u \frac{\partial w}{\partial x} + \rho v \frac{\partial w}{\partial y} + \rho w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (1.22)$$

рівняння енергії

$$\begin{aligned} \rho u c_v \frac{\partial T}{\partial x} + \rho v c_v \frac{\partial T}{\partial y} + \rho w c_v \frac{\partial T}{\partial z} = -p \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \mu \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] + \\ + \frac{4}{3} \mu \left[\left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 - \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial z} \right]. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Запишемо параболізовані рівняння Нав'є – Стокса для стисливої рідини в системі координат загального вигляду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\vec{U}}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ \frac{1}{J} \left[\xi_x (\vec{E}_i - \vec{E}_v) + \xi_y (\vec{F}_i - \vec{F}_v) + \xi_z (\vec{G}_i - \vec{G}_v) \right] \right\} + \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ \frac{1}{J} \left[\eta_x (\vec{E}_i - \vec{E}_v) + \eta_y (\vec{F}_i - \vec{F}_v) + \eta_z (\vec{G}_i - \vec{G}_v) \right] \right\} + \\ + \frac{\partial}{\partial \zeta} \left\{ \frac{1}{J} \left[\zeta_x (\vec{E}_i - \vec{E}_v) + \zeta_y (\vec{F}_i - \vec{F}_v) + \zeta_z (\vec{G}_i - \vec{G}_v) \right] \right\} = 0, \end{aligned} \quad (1.23)$$

$$\text{де } \vec{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E_t \end{bmatrix}, \quad \vec{E}_i = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u v \\ \rho u w \\ (E_t + p)u \end{bmatrix}, \quad \vec{E}_v = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + \\ + w\tau_{xz} - q_x \end{bmatrix}, \quad (1.24a)$$

$$\vec{F}_i = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (E_t + p)v \end{bmatrix}, \quad \vec{F}_v = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yz} \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz} - q_y \end{bmatrix}, \quad (1.24б)$$

$$\vec{G}_i = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (E_t + p)w \end{bmatrix}, \quad \vec{G}_v = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zz} \\ u\tau_{xz} + v\tau_{yz} + w\tau_{zz} - q_z \end{bmatrix}, \quad (1.24в)$$

$$E_t = \rho \left(e + \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} \right). \quad (1.24г)$$

Тут вирази для напружень і теплових потоків у криволінійній системі координат мають вигляд:

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \frac{2}{3} \mu \left[2(\xi_x u_\xi + \eta_x u_\eta + \zeta_x u_\zeta) - (\xi_y v_\xi + \eta_y v_\eta + \zeta_y v_\zeta) - \right. \\ &\quad \left. - (\xi_z w_\xi + \eta_z w_\eta + \zeta_z w_\zeta) \right], \\ \tau_{yy} &= \frac{2}{3} \mu \left[2(\xi_y v_\xi + \eta_y v_\eta + \zeta_y v_\zeta) - (\xi_x u_\xi + \eta_x u_\eta + \zeta_x u_\zeta) - \right. \\ &\quad \left. - (\xi_z w_\xi + \eta_z w_\eta + \zeta_z w_\zeta) \right], \\ \tau_{zz} &= \frac{2}{3} \mu \left[2(\xi_z w_\xi + \eta_z w_\eta + \zeta_z w_\zeta) - (\xi_x u_\xi + \eta_x u_\eta + \zeta_x u_\zeta) - \right. \\ &\quad \left. - (\xi_y v_\xi + \eta_y v_\eta + \zeta_y v_\zeta) \right], \\ \tau_{xy} &= \mu (\xi_y u_\xi + \eta_y u_\eta + \zeta_y u_\zeta + \xi_x v_\xi + \eta_x v_\eta + \zeta_x v_\zeta), \\ \tau_{xz} &= \mu (\xi_z u_\xi + \eta_z u_\eta + \zeta_z u_\zeta + \xi_x w_\xi + \eta_x w_\eta + \zeta_x w_\zeta), \\ \tau_{yz} &= \mu (\xi_z v_\xi + \eta_z v_\eta + \zeta_z v_\zeta + \xi_y w_\xi + \eta_y w_\eta + \zeta_y w_\zeta), \end{aligned} \quad (1.25)$$

$$\begin{aligned}
q_x &= -k(\xi_x T_\xi + \eta_x T_\eta + \zeta_x T_\zeta), \\
q_y &= -k(\xi_y T_\xi + \eta_y T_\eta + \zeta_y T_\zeta), \\
q_z &= -k(\xi_z T_\xi + \eta_z T_\eta + \zeta_z T_\zeta).
\end{aligned}$$

Зазначимо, що вектори \vec{E} , \vec{F} та \vec{G} розкладаються на нев'язку (нижній індекс i) та в'язку (нижній індекс v) частини. Навіщо це зроблено, стане зрозуміло з наступного опису процедури числового розв'язання параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса. Параболізовані рівняння у криволінійних координатах отримуємо, просто опускаючи нестационарні та в'язкі члени з похідними у поздовжньому напрямку ξ . У результаті маємо систему рівнянь:

$$\frac{\partial \vec{E}_3}{\partial \xi} + \frac{\partial \vec{F}_3}{\partial \eta} + \frac{\partial \vec{G}_3}{\partial \zeta} = 0, \quad (1.26)$$

де

$$\vec{E}_3 = \frac{1}{J}(\xi_x \vec{E}_i + \xi_y \vec{F}_i + \xi_z \vec{G}_i), \quad (1.27a)$$

$$\vec{F}_3 = \frac{1}{J}[\eta_x (\vec{E}_i - \vec{E}'_v) + \eta_y (\vec{F}_i - \vec{F}'_v) + \eta_z (\vec{G}_i - \vec{G}'_v)], \quad (1.27б)$$

$$\vec{G}_3 = \frac{1}{J}[\zeta_x (\vec{E}_i - \vec{E}'_v) + \zeta_y (\vec{F}_i - \vec{F}'_v) + \zeta_z (\vec{G}_i - \vec{G}'_v)]. \quad (1.27в)$$

Тут штрих показує, що члени, які містять частинні похідні за напрямком ξ , опущено. Зсувні напруження і теплові потоки в рівняннях (1.26) тоді матимуть вигляд:

$$\begin{aligned}
\tau'_{xx} &= \frac{2}{3}\mu \left[2(\eta_x u_\eta + \zeta_x u_\zeta) - (\eta_y v_\eta + \zeta_y v_\zeta) - (\eta_z w_\eta + \zeta_z w_\zeta) \right], \\
\tau'_{yy} &= \frac{2}{3}\mu \left[2(\eta_y v_\eta + \zeta_y v_\zeta) - (\eta_x u_\eta + \zeta_x u_\zeta) - (\eta_z w_\eta + \zeta_z w_\zeta) \right], \\
\tau'_{zz} &= \frac{2}{3}\mu \left[2(\eta_z w_\eta + \zeta_z w_\zeta) - (\eta_x u_\eta + \zeta_x u_\zeta) - (\eta_y v_\eta + \zeta_y v_\zeta) \right], \\
\tau'_{xy} &= \mu(\eta_y u_\eta + \zeta_y u_\zeta + \eta_x v_\eta + \zeta_x v_\zeta),
\end{aligned} \quad (1.28)$$

$$\begin{aligned}\tau'_{xz} &= \mu(\eta_z u_\eta + \zeta_z u_\zeta + \eta_x w_\eta + \zeta_x w_\zeta), \\ \tau'_{yz} &= \mu(\eta_z v_\eta + \zeta_z v_\zeta + \eta_y w_\eta + \zeta_y w_\zeta), \\ q'_x &= -k(\eta_x T_\eta + \zeta_x T_\zeta), \quad q'_y = -k(\eta_y T_\eta + \zeta_y T_\zeta), \\ q'_z &= -k(\eta_z T_\eta + \zeta_z T_\zeta).\end{aligned}$$

1.2.2. Особливості розв'язання параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса

Розв'язок параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса, який отримано маршовим методом за просторовою координатою Ox , є нестійким (розбігається), якщо поздовжній градієнт тиску цілком зберігається в дозвукових частинах примежового шару, оскільки при цьому в рівняння вводиться елемент еліптичності. Запропоновано різноманітні засоби подолання цих труднощів, які розглядатимемо далі.

Найочевидніший засіб боротьби з нестійкістю – цілком відкинути градієнт тиску в дозвукових зонах. Це дасть стійку маршову схему, проте призведе до помилок при розрахунках течій із великими поздовжніми градієнтами тиску. Зауважимо, що варіації тиску в поздовжньому напрямку будуть завжди позначатися на числовому розв'язку у випадку, коли тиск визначатиметься з рівняння руху за координатою y та рівняння енергії. Альтернативним підходом є попереднє задання зміни поздовжнього градієнта тиску. Очевидно, що прирівнювання до нуля градієнта тиску – один із таких шляхів. Якщо ж поздовжній градієнт тиску визначено, то його можна розглядати як джерельний член. А отже, поздовжній градієнт тиску вже не впливатиме на математичну природу рівнянь. При розв'язанні рівнянь примежового шару поздовжній градієнт тиску звичайно вже відомий із розрахунку зовнішньої течії нев'язкої рідини, а у випадку внутрішніх течій визначається із закону збереження маси. На жаль, для параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса

поздовжній градієнт тиску заздалегідь не відомий і його потрібно визначати у процесі розв'язування.

У роботах деяких авторів, наприклад [69, 70, 73, 74], поздовжній градієнт тиску зберігається в дозвукових зонах і апроксимується різницями назад, які, у свою чергу, розраховуються з використанням інформації з попереднього шару за маршовою координатою. Наприклад, коли знаходиться розв'язок на шарі $j+1$, то похідна $\partial p / \partial x$ представляється у вигляді

$$\frac{\partial p}{\partial x} \approx \frac{p_j - p_{j-1}}{\Delta x},$$

тобто різницею назад першого порядку. Досліджено стійкість (розбіжність) подібного методу, в якому використовувалися різниці назад для поздовжнього градієнта тиску в рівняннях руху та енергії і неявна різницева схема. Аналіз стійкості за Фур'є показав, що нестійкість матиме місце, якщо

$$\Delta x < (\Delta x)_{\min}. \quad (1.29)$$

Ця умова стійкості дуже незвична. Як правило, з аналізу стійкості за Фур'є випливає, що нестійкість спостерігається у випадку, якщо Δx більше деякого $(\Delta x)_{\min}$. Показано також, що у випадку, коли поздовжній градієнт тиску апроксимувати на неявному шарі аналогічно усім іншим членам параболізованих рівнянь, то мінімально допустимий крок $(\Delta x)_{\min}$ подвоюється. Для пояснення настільки незвичної умови стійкості Рубін [69] висловив припущення, що $(\Delta x)_{\min}$ є масштабом області передачі еліптичної взаємодії вгору за потоком. У випадку, коли $(\Delta x) > (\Delta x)_{\min}$, ця взаємодія немов би "не помічається" і маршова процедура виявляється стійкою. У протилежному випадку, коли $(\Delta x) < (\Delta x)_{\min}$, числовий розв'язок намагається врахувати еліптичну взаємодію. Це і веде до розбіжності розв'язку, оскільки передача впливу вгору за потоком для маршової процедури заборонена. Рубін та Лін [70] показали, що розмір області еліптичної взаємодії має порядок товщини дозвукової зони. Тому, коли дозвукова зона порівняно велика, то мінімальна допустима величина Δx може бути занадто велика для здійснення точних (або стійких) обчислень.

Інший метод врахування градієнта тиску в поздовжньому напрямку називається *наближенням підшару*. Першими його запропонували Рубін і Лін [70], а дещо пізніше застосував Стегер [74] для параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса. У наближенні підшару градієнт тиску у в'язкій дозвуковій області обчислюється в точці поза підшаром, де швидкість надзвукова. Таке наближення засноване на припущенні, що в тонкому дозвуковому в'язкому підшарі градієнт dp/dx дуже малий. А оскільки градієнт тиску не задається в дозвуковій зоні, маршовий за просторовою координатою метод певне дасть стійкий розв'язок.

Новий підхід до врахування поздовжнього градієнта тиску запропоновано Віньєроном та ін. [78]. Відповідно до цього підходу в дозвуковій в'язкій зоні частина поздовжнього градієнта тиску $\omega (\partial p / \partial x)$ у рівнянні зберігається, а залишок $(1-\omega)(\partial p / \partial x)$ або опускається, або розраховується на явному шарі з використанням різниць назад або наближення підшару.

У багатьох задачах механіки рідин еліптичні ефекти передачі впливу вгору за потоком порівняно малі і при використанні згаданих вище методів вдається запобігти виникненню нестійкості, причому досить точний розв'язок маємо за одне-єдине проходження поля течії. В інших задачах, де вплив поширення збурень вгору за потоком великий (через відрив, наявності сліду, ударної хвилі тощо), ці методи виявляються неможливими. У результаті або виникає нестійкість, або міри, до яких вдаються щоб її зменшити, призводять до великих помилок. У цих випадках потрібно використовувати процедуру глобальної релаксації по тиску. Згідно з цією процедурою спочатку задається деякий розподіл тиску в усьому полі течії для визначення градієнта тиску в кожній точці. Початковий розподіл тиску можна одержати, наприклад, якщо вважати його градієнт нульовим. Або, якщо застосувати метод Віньєрона при $\partial \bar{P} / \partial x = 0$, де

$$\bar{P} = [0, (1-\omega)p, 0, 0]^T.$$

Або, якщо обрати достатньо великий крок Δx . А коли градієнт тиску – відомий і апроксимується належним чином,

параболізовані рівняння Нав'є – Стокса можна розв'язати з використанням стійкої скінченнорізницевої маршової процедури. Цей розв'язок дає новий розподіл тиску, який можна знову застосувати для розрахунку градієнта тиску, що необхідний для наступного проходження області, що обчислюється. Така ітераційна процедура продовжується до одержання збіжності. Для адекватного моделювання еліптичного характеру поля течії градієнт тиску повинен впливати на течію вгору за потоком. Цього можна домогтися, апроксимуючи його різницями вперед, тобто, коли обчислюється розв'язок на шарі $j+1$, градієнт тиску подають у дискретному вигляді

$$\frac{\partial p}{\partial x} \approx \frac{P_{j+2} - P_{j+1}}{\Delta x}. \quad (1.30)$$

Такого роду дискретизація можлива лише при використанні глобальної релаксаційної процедури по тиску, бо звичайно p_{j+2} нам невідоме. Рубін і Лін [70] дослідили стійкість алгоритму за умови, коли $\partial p / \partial x$ у відповідних рівняннях апроксимується різницею вперед, і показали, що в цьому випадку маємо безумовну стійкість.

Зауваження:

- Проблеми стійкості стають домінуючими тільки у випадку, коли дозвукові області дуже великі.
- Глобальна релаксаційна процедура по тиску є багатообіцяючою для задач, щодо яких вплив угору за потоком є істотним. Проте варто пам'ятати, що ця процедура вимагає значно більших витрат машинного часу, ніж типові розрахунки параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса з одним проходженням поля течії. У деяких випадках витрати машинного часу для глобальної релаксаційної процедури по тиску порівнянні з тими, що потрібні для обчислень повних рівнянь Нав'є – Стокса. Отже, для цих задач параболізовані рівняння Нав'є – Стокса вже не мають жодної переваги порівняно з повними рівняннями Нав'є – Стокса.

- *Параболізовані рівняння Нав'є – Стокса утворюють мішану систему гіперболічно-параболічних рівнянь щодо координати у поздовжньому напрямку при виконанні таких умов:*
 - 1) *нев'язкий потік надзвуковий;*
 - 2) *поздовжня компонента швидкості всюди відмінна від нуля;*
 - 3) *градієнт тиску в рівнянні руху за поздовжньою координатою або опущений, або нестійкість зменшується одним із засобів, що описані раніше у цьому підрозділі.*
- *Якщо всіх згаданих вище умов дотримано, параболізовані рівняння Нав'є – Стокса можна розв'язувати скінченно-різницевиими методами, подібними до тих, що використовуються для розв'язання параболічних рівнянь примезового шару. Тому стійка маршова за просторовою координатою процедура може застосовуватися для одержання розв'язання в усій розрахунковій області, починаючи з поверхні, де задають початкові дані, і далі вниз за потоком до кінцевого перетину.*

Деякі з ранніх розв'язків параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса отримано з використанням явних схем. Це робилося скоріше для зручності, ніж із міркувань ефективності, бо в [7] показано, що неявні схеми для рівнянь такого типу ефективніші. У сучасних роботах для розв'язання параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса застосовуються різноманітні неявні алгоритми: неявна схема змінних напрямків Пісмента – Речфорда, неявні схеми з ітераціями та ін. Одна з найбільш вдалих серед запропонованих схем є схема предиктор–коректор з ітераціями Рубіна – Ліна [70], яка розглядалася при розв'язанні багатовимірного рівняння Бюргерса [6]. Ця схема неявна за координатою y , де градієнти найбільші, але явна за координатою z , що для тривимірних параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса приводить до такої умови стійкості:

$$\Delta x \leq \Delta z |w/u|. \quad (1.31)$$

1.2.3. Ефективна неявна наближено факторизована схема без ітерацій

Найчастіше параболізовані рівняння Нав'є – Стокса розв'язували, використовуючи неявні різницеві схеми з ітераціями. Віньєрон [78] запропонував ефективнішу неявну приблизно факторизовану схему без ітерацій. Алгоритм цієї схеми належить до класу неявних схем змінних напрямків. Розроблено його цілою групою авторів та оптимізовано для розв'язання рівнянь, що залежать від часу (у тому числі системи рівнянь Нав'є – Стокса). Застосуємо цей алгоритм при розв'язанні тривимірних параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса у декартових координатах (x – поздовжній напрямок) для випадку ідеального газу. Тоді нехай $\xi \rightarrow x$, $\eta \rightarrow y$, $\zeta \rightarrow z$ і рівняння (1.26)–(1.28) зводяться до векторного рівняння:

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial z} = 0, \quad (1.32)$$

де $\vec{E} = \vec{E}_i$, $\vec{F} = \vec{F}_i - \vec{F}_v$, $\vec{G} = \vec{G}_i - \vec{G}_v$. Вектори $\vec{E}_i, \vec{F}_i, \vec{F}_v, \vec{G}_i, \vec{G}_v$ задаються виразами (1.24) і містять параболізовані члени зі зсувними напруженнями та тепловими потоками:

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= 2/3\mu (-v_y - w_z), \quad \tau_{yy} = 2/3\mu (2v_y - w_z), \\ \tau_{zz} &= 2/3\mu (2w_z - v_y), \\ \tau_{xy} &= \mu u_y, \quad \tau_{xz} = \mu u_z, \quad \tau_{zz} = \mu (v_z - w_y), \\ q_x &= 0, \quad q_y = -kT_y, \quad q_z = -kT_z. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Наслідуючи Віньєрона, уведемо градієнт тиску в напрямку течії, замінюючи $\vec{E} = \vec{E}' + \vec{P}$; тоді рівняння (1.32) набуває вигляду

$$\frac{\partial \vec{E}'}{\partial x} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial z} = 0, \quad (1.34)$$

де

$$\vec{G}_i = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + \omega p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (E_t + p)u \end{bmatrix}, \quad \vec{P} = \begin{bmatrix} 0 \\ (1-\omega)p \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (1.35)$$

Для побудови неявної схеми для рівняння (1.34) попередньо перепишемо його у вигляді

$$\frac{\partial \vec{E}'}{\partial x} = - \left(\frac{\partial \vec{P}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial z} \right),$$

який еквівалентний наступному дискретному виразу, що запропонований Бімом і Уормінгом [3]:

$$\begin{aligned} \Delta^j \vec{E}' = & -\Delta^j \vec{P} - \frac{\theta_1 \Delta x}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial y} (\Delta^j \vec{F}) + \frac{\partial}{\partial z} (\Delta^j \vec{G}) \right] - \\ & - \frac{\Delta x}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial y} (\vec{F}^j) + \frac{\partial}{\partial z} (\vec{G}^j) \right] + \frac{\theta_2}{1 + \theta_2} \{ \Delta^{j-1} \vec{E} + \Delta^{j-1} \vec{P} \} + \\ & + O \left[\left(\theta_1 - \frac{1}{2} - \theta_2 \right) (\Delta x)^2 + (\Delta x)^3 \right], \end{aligned} \quad (1.36)$$

де $\Delta^j \vec{E}' = \vec{E}'^{j+1} - \vec{E}'^j$, $\Delta^j \vec{F} = \Delta^j \vec{F}_i - \Delta^j \vec{F}_v$, $\Delta^j \vec{G} = \Delta^j \vec{G}_i - \Delta^j \vec{G}_v$, $x = j \Delta x$.

Ця різницева схема загального вигляду за рахунок вибору параметрів θ_1 та θ_2 дозволяє одержати різницеві схеми, які наведено в табл. 1.1. Для параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса використовують звичайно або неявну схему Ейлера першого порядку ($\theta_1=1$, $\theta_2=0$), або триточкову схему другого порядку з різницями назад ($\theta_1=1$, $\theta_2=1/2$).

Як показали Бім і Уормінг, неявна центрована за часом схема другого порядку ($\theta_1=1/2$, $\theta_2=0$) у випадку її застосування до параболічних рівнянь приводить до нестійкості. Зазначимо, що в табл. 1.1 наведено також і помилку апроксимації для Δ^j .

Таблиця 1.1. Різницеві схеми для рівняння (1.36)

θ_1	θ_2	Схема	Помилка апроксимації в рівнянні (1.36)
0	0	Явна схема Ейлера	$O[(\Delta x)^2]$
0	- 1/2	Схема з переступанням "чехарда" (явна)	$O[(\Delta x)^3]$
1/2	0	Неявна центрована за часом схема	$O[(\Delta x)^3]$
1	0	Неявна схема Ейлера	$O[(\Delta x)^2]$
1	1/2	Неявна триточкова схема з різницями назад	$O[(\Delta x)^3]$

Пам'ятаємо, що коли в різницевій схемі похідну $\partial \bar{E} / \partial x$ міняють на $\Delta^j / \Delta x$, помилку апроксимації також необхідно поділити на Δx .

Різницеве співвідношення (1.36) записане в так званій дельта-формі. Щоб лінеаризувати нев'язкі дельта-члени $\Delta^j \bar{E}'$, $\Delta^j \bar{F}_i$, $\Delta^j \bar{G}_i$, скористаємося тим, що вони є функціями лише вектора \vec{U} :

$$\vec{U} = [p, \rho u, \rho v, \rho w, E_t]^T = [U_1, U_2, U_3, U_4, U_5]^T. \quad (1.37)$$

Наприклад, \bar{F}_i для ідеального газу можна визначити через компоненти вектора \vec{U} в такий спосіб:

$$\bar{F}_i = \begin{bmatrix} U_3 \\ \frac{U_2 U_3}{U_1} \\ \frac{U_3^2}{U_1} + (\gamma - 1) \left(U_5 - \frac{U_2^2 + U_3^2 + U_4^2}{2U_1} \right) \\ \frac{U_3 U_4}{U_1} \\ \left[U_5 + (\gamma - 1) \left(U_5 - \frac{U_2^2 + U_3^2 + U_4^2}{2U_1} \right) \right] \frac{U_3}{U_1} \end{bmatrix}. \quad (1.38)$$

Отже, ми можемо розвинути $\vec{E}', \vec{F}_i, \vec{G}_i$ у ряд:

$$\begin{aligned}(\vec{E}')^{j+1} &= (\vec{E}')^j + \left(\frac{\partial \vec{E}'}{\partial \vec{U}} \right)^j \Delta^j \vec{U} + [(\Delta x)^2], \\(\vec{F}_i')^{j+1} &= (\vec{F}_i')^j + \left(\frac{\partial \vec{F}_i'}{\partial \vec{U}} \right)^j \Delta^j \vec{U} + [(\Delta x)^2], \\(\vec{G}_i')^{j+1} &= (\vec{G}_i')^j + \left(\frac{\partial \vec{G}_i'}{\partial \vec{U}} \right)^j \Delta^j \vec{U} + [(\Delta x)^2].\end{aligned}\tag{1.39}$$

або

$$\begin{aligned}\Delta^j \vec{E}' &= \underline{Q}^j \Delta^j \vec{U} + O[(\Delta x)^2], \\ \Delta^j \vec{F}_i' &= \underline{R}^j \Delta^j \vec{U} + O[(\Delta x)^2], \\ \Delta^j \vec{G}_i' &= \underline{S}^j \Delta^j \vec{U} + O[(\Delta x)^2],\end{aligned}\tag{1.40}$$

де $\underline{Q}^j, \underline{S}^j, \underline{R}^j$ – матриці Якобі $\partial \vec{E}' / \partial \vec{U}, \partial \vec{F}_i' / \partial \vec{U}, \partial \vec{G}_i' / \partial \vec{U}$, відповідно. Вираз для матриці Якобі $\partial \vec{E}' / \partial \vec{U}$ отримано у припущенні, що ω локально не залежить від \vec{U} . В'язкі дельта-члени можна лінеаризувати за методом, що запропонував Стегер [73, 74]. За цим методом коефіцієнти в'язкості μ та теплопровідності k вважаються локально незалежними від \vec{U} і нехтуються в'язкими членами з мішаними похідними. У результаті елементи \vec{F}_v, \vec{G}_v набувають загального вигляду

$$f_k = \alpha_k \frac{\partial}{\partial y}(\beta_k), \quad g_k = \alpha_k \frac{\partial}{\partial z}(\beta_k),\tag{1.41}$$

де α_k не залежить від \vec{U} , а β_k – функція лише від \vec{U} . Ці елементи за Стегером лінеаризуються в такий спосіб:

$$f^{j+1} = f^j + \alpha_k^j \frac{\partial}{\partial y} \left[\sum_{\ell=1}^5 \left(\frac{\partial \beta_k}{\partial U_\ell} \right)^j \Delta^j U_\ell \right] + O[(\Delta x)^2],\tag{1.42a}$$

$$g^{j+1} = g^j + \alpha_k^j \frac{\partial}{\partial z} \left[\sum_{\ell=1}^5 \left(\frac{\partial \beta_k}{\partial U_\ell} \right)^j \Delta^j U_\ell \right] + O[(\Delta x)^2], \quad (1.426)$$

тому можна переписати

$$\Delta^j \vec{F}_v = \underline{V}^j \Delta^j \vec{U} + O[(\Delta x)^2], \quad \Delta^j \vec{G}_v = \underline{W}^j \Delta^j \vec{U} + O[(\Delta x)^2], \quad (1.43)$$

де \underline{V} та \underline{W} – матриці Якобі $\partial \vec{F}_v / \partial \vec{U}$, $\partial \vec{G}_v / \partial \vec{U}$.

Підставляючи тепер (1.39), (1.40) та (1.43) у рівняння (1.35), отримаємо

$$\left\{ \left(\frac{\partial \vec{E}'}{\partial \vec{U}} \right)^j + \frac{\theta_1 \Delta x}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \vec{F}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{F}_v}{\partial \vec{U}} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \vec{G}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{G}_v}{\partial \vec{U}} \right) \right] \right\}^j \Delta^j \vec{U} =$$

$$= - \frac{\Delta x}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial y} (\vec{F}^j) + \frac{\partial}{\partial z} (\vec{G}^j) \right] + \frac{\theta_2}{1 + \theta_2} \Delta^{j-1} \vec{E} - \Delta^j \vec{P}, \quad (1.44)$$

де запис $\left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \vec{F}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{F}_v}{\partial \vec{U}} \right) \right] \Delta^j \vec{U}$ означає $\frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\frac{\partial \vec{F}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{F}_v}{\partial \vec{U}} \right) \Delta^j \vec{U} \right]$

і частинні похідні в $\partial \vec{F}_v / \partial \vec{U}$, $\partial \vec{G}_v / \partial \vec{U}$ необхідно брати від усіх членів, що до них входять, включаючи $\Delta^j \vec{U}$. Зауважимо, що в рівнянні (1.44) усі неявні члени містяться в лівій частині, а явні – у правій. Узятий на явному шарі та включений у праву частину рівняння градієнт тиску $\Delta^j \vec{P}$ можна апроксимувати різницею назад. Відповідно до неявної схеми Ейлера такою скінченнорізницевою формулою першого порядку є

$$\Delta^j \vec{P} = \Delta^{j-1} \vec{P} + O[(\Delta x)^2], \quad (1.45)$$

у схемах другого порядку з різницями назад можна скористатися формулою

$$\Delta^j \vec{P} = 2\Delta^{j-1} \vec{P} - \Delta^{j-2} \vec{P} + O[(\Delta x)^3]. \quad (1.46)$$

Ліва частина рівняння (1.44) факторизується в такий спосіб:

$$\left\{ \left[\left(\frac{\partial \vec{E}'}{\partial \vec{U}} \right)^j + \frac{\theta_1 \Delta x}{1 + \theta_2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \vec{G}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{G}_v}{\partial \vec{U}} \right)^j \right] \left[\left(\frac{\partial \vec{E}'}{\partial \vec{U}} \right)^j \right]^{-1} \right. \\ \left. \times \left[\left(\frac{\partial \vec{E}'}{\partial \vec{U}} \right)^j + \frac{\theta_1 \Delta x}{1 + \theta_2} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \vec{F}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{F}_v}{\partial \vec{U}} \right)^j \right] \right\} \Delta^j \vec{U} = \quad (1.47)$$

= Права частина рівняння (1.44).

Точність факторизації виразу (1.47) перевіряємо, виконавши множення й порівнюючи результат із лівою частиною рівняння (1.44). Отже, маємо

$$\left\{ \left(\frac{\partial \vec{E}'}{\partial \vec{U}} \right)^j + \frac{\theta_1 \Delta x}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \vec{F}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{F}_v}{\partial \vec{U}} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \vec{G}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{G}_v}{\partial \vec{U}} \right) \right] \right\}^j + \\ + \left(\frac{\theta_1 \Delta x}{1 + \theta_2} \right)^2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \vec{G}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{G}_v}{\partial \vec{U}} \right)^j \left[\left(\frac{\partial \vec{E}'}{\partial \vec{U}} \right)^j \right]^{-1} \times \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \vec{F}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{F}_v}{\partial \vec{U}} \right)^j \Delta^j \vec{U} = \\ = \text{Права частина рівняння (1.44)}. \quad (1.48)$$

Отже,

$$\begin{aligned} \text{Ліва частина рівняння (1.47)} &= \\ &= \text{Ліва частина рівняння (1.44)} + O[(\Delta x)^2]. \end{aligned}$$

Таким чином, наближена факторизація не впливає на формальну точність скінченнорізницевого алгоритму.

Частинні похідні $\partial/\partial y$ та $\partial/\partial z$ у рівнянні (1.47) апроксимуються центральними різницями другого порядку малізми. Наприклад, нев'язкий член

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \vec{F}_i}{\partial \vec{U}} \right)^j \Delta^j \vec{U} \text{ дискретизується як} \\ \frac{\left[\left(\partial \vec{F}_i / \partial \vec{U} \right)^j \Delta^j \vec{U} \right]_{k+1} - \left[\left(\partial \vec{F}_i / \partial \vec{U} \right)^j \Delta^j \vec{U} \right]_{k-1}}{2 \Delta y}. \quad (1.49)$$

А кожний елемент в'язкого члена типу

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \vec{F}_v}{\partial \vec{U}} \right)^j \Delta^j \vec{U}, \text{ що має вигляд } \frac{\partial}{\partial y} \left[\alpha \frac{\partial}{\partial y} (\beta \Delta^j U_\ell) \right],$$

дискретизується таким чином:

$$\begin{aligned} & \frac{\left\{ \alpha \left[\frac{\partial (\beta \Delta^j U_\ell)}{\partial y} \right] \right\}_{k+1/2} - \left\{ \alpha \left[\frac{\partial (\beta \Delta^j U_\ell)}{\partial y} \right] \right\}_{k-1/2}}{\Delta y} \\ & \approx \frac{\alpha_{k+1/2} \left[(\beta \Delta^j U_\ell)_{k+1} - (\beta \Delta^j U_\ell)_k \right] - \alpha_{k-1/2} \left[(\beta \Delta^j U_\ell)_k - (\beta \Delta^j U_\ell)_{k-1} \right]}{(\Delta y)^2}. \end{aligned} \quad (1.50)$$

Для розв'язання задач, що описуються рівнянням (1.47), маємо чотирикроковий алгоритм:

Крок 1

$$\begin{aligned} & \left[\left(\frac{\partial \vec{E}'}{\partial \vec{U}} \right)^j + \frac{\theta_1 \Delta x}{1 + \theta_2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \vec{G}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{G}_v}{\partial \vec{U}} \right)^j \right] \Delta^j \vec{U}_1 = \\ & = \text{Права частина рівняння (1.44)}. \end{aligned} \quad (1.51a)$$

Крок 2

$$\Delta^j \vec{U}_2 = \left(\frac{\partial \vec{E}'}{\partial \vec{U}} \right)^j \Delta^j \vec{U}_1. \quad (1.51б)$$

Крок 3

$$\left[\left(\frac{\partial \vec{E}'}{\partial \vec{U}} \right)^j + \frac{\theta_1 \Delta x}{1 + \theta_2} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \vec{F}_i}{\partial \vec{U}} - \frac{\partial \vec{F}_v}{\partial \vec{U}} \right)^j \right] \Delta^j \vec{U} = \Delta^j \vec{U}_2. \quad (1.51в)$$

Крок 4

$$\vec{U}^{j+1} = \vec{U}^j + \Delta^j \vec{U}. \quad (1.51г)$$

На кроці 1 із розв'язання системи рівнянь визначається векторна величина $\Delta^j \vec{U}_1$. Ця система рівнянь має блокову тридіагональну структуру:

$$\begin{bmatrix} \underline{B}_1 & \underline{C}_1 & \dots & \dots & 0 \\ \underline{A}_2 & \underline{B}_2 & \underline{C}_2 & \dots & \vdots \\ \vdots & \underline{A}_3 & \underline{B}_3 & \underline{C}_3 & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & \underline{A}_{NX-1} & \underline{B}_{NX-1} & \underline{C}_{NX-1} \\ 0 & \dots & \dots & \underline{A}_{NX} & \underline{B}_{NX} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} [\Delta^j \vec{U}_1]_1 \\ [\Delta^j \vec{U}_1]_2 \\ \vdots \\ [\Delta^j \vec{U}_1]_{NX-1} \\ [\Delta^j \vec{U}_1]_{NX} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [RHS]_1 \\ [RHS]_2 \\ \vdots \\ [RHS]_{NX-1} \\ [RHS]_{NX} \end{bmatrix}, \quad (1.52)$$

де $\underline{A}_j, \underline{B}_j, \underline{C}_j$ – матриці розміром 5×5 , $[\Delta^j \vec{U}_1]_j$ та $[RHS]_j$ – вектори-стовпці, елементи яких є компонентами векторів $\Delta^j \vec{U}_1$ і правої частини рівняння (1.44). Систему (1.52) можна розв'язати за процедурою розв'язання системи рівнянь із блоковою тридіагональною матрицею [1]. Визначивши $\Delta^j \vec{U}_1$, на кроці 2 цей вектор-стовпець множать на $(\partial \bar{E}' / \partial \vec{U})^j$, що дозволяє уникнути у процесі розв'язання необхідності обчислення оберненої матриці $[(\partial \bar{E}' / \partial \vec{U})^j]^{-1}$. На кроці 3 блокова тридіагональна система розв'язується в напрямку у. Нарешті, на кроці 4 вектор невідомих на шарі $j+1$ (тобто \vec{U}^{j+1}) визначають додаванням $\Delta^j \vec{U}$ до вектора невідомих на шарі j . Потім із \vec{U}^{j+1} знаходять примітивні змінні:

$$\rho^{j+1} = U_1^{j+1}, \quad u^{j+1} = \frac{U_2^{j+1}}{U_1^{j+1}}, \quad v^{j+1} = \frac{U_3^{j+1}}{U_1^{j+1}}, \quad w^{j+1} = \frac{U_4^{j+1}}{U_1^{j+1}},$$

$$e^{j+1} = \frac{U_5^{j+1}}{U_1^{j+1}} - \frac{(u^{j+1})^2 + (v^{j+1})^2 + (w^{j+1})^2}{2}.$$

Зауваження:

- В алгоритмах розглянутого вище типу для зменшення високочастотних осциляцій необхідно додавати члени для згладжування розв'язку. Це легко здійснити, якщо додати на явному шарі до правої частини рівняння (1.44) дисипативний член четвертого порядку

$$-\varepsilon_e \left[(\Delta y)^4 \frac{\partial^4}{\partial y^4} (U^j) + (\Delta z)^4 \frac{\partial^4}{\partial z^4} (U^j) \right]. \quad (1.53)$$

- *На формальну точність алгоритму додавання члена четвертого порядку мализни не впливає. Від'ємний знак перед цим членом необхідний для того, щоб демпфування було додатним. Для збереження стійкості алгоритму згладжувальний коефіцієнт ε_e повинен бути менше 1/16. Члени з четвертими похідними розраховуються за такими скінченнорізницевиими виразами:*

$$(\Delta y)^4 \frac{\partial^4}{\partial y^4} (U^j) \approx U_{k+2,\ell}^j - 4U_{k+1,\ell}^j + 6U_{k,\ell}^j - 4U_{k-1,\ell}^j + U_{k-2,\ell}^j.$$

Для розв'язання параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса запропоновано й інші неявні алгоритми, які використовують відповідним чином розщеплену неявну лінеаризовану блокову (LBI) схему та неявну факторизовану схему з ітераціями. Найвідоміший із них – це неявна лінеаризована блокова схема Брайлі – Макдональда [19], що має структуру, подібну до структури схеми Біма – Уормінга в дельта-формі.

Зауваження:

- *Якщо стисливість течії пов'язана з рухом (число Маха велике), то в багатьох випадках виявляються великими і числа Рейнольдса, тобто течія – турбулентна. Більшість з існуючих неявних алгоритмів нейтрально стійкі, тому в них необхідно додатково вводити числову дисипацію, подібну до (1.53). Це дозволяє зменшити нелінійну нестійкість, яка реально виникає і спостерігається в тих частинах розрахункової області, де фізична дисипація мала.*
- *Для локальних надзвукових течій реальною є поява ударних хвиль. Якщо ці хвилі слабкі, то розв'язок можна отримати без модифікації всього алгоритму, за винятком уведення додаткової числової дисипації. Проте, якщо інтенсивність ударних хвиль велика, то застосовують ті самі методи виділення стрибка, що і за розв'язання системи рівнянь Ейлера [7].*

1.3. Методи розв'язання тривимірних параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса для дозвукових течій

Запропонований нижче метод найчастіше застосовують для розрахунків внутрішніх течій, де можна виділити переважний напрямок. Компонента швидкості в цьому переважному напрямку має бути додатною, тобто зворотна течія в напрямку основного потоку заборонена. Проте на компоненти швидкості вторинної течії обмежень немає. Як і для інших форм параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса, дифузією в поздовжньому напрямку нехтують, але враховують передачу інформації через поздовжній градієнт тиску.

Еліптичний характер поведінки схеми в поздовжньому напрямку зменшується застосуванням апроксимації, яку вперше запропоновано Госманом і Сполдінгом [52] для прямого каналу прямокутного перерізу. Аналогічно розраховуються й течії у викривлених каналах зі сталим поперечним перерізом, але при цьому потрібно вже використовувати недекартову систему координат.

Нехай вісь каналу збігається з напрямком осі Ox . Тоді координатна площина Oyz перпендикулярна до напрямку основної течії. Запишемо рівняння у вигляді, що придатний для опису і ламінарних, і турбулентних течій. Змінні вважатимемо осередненими за часом. При виведенні параболізованих рівнянь Рейнольдса нехтуватимемо ламінарною і турбулентною дифузією в поздовжньому напрямку. Більше того, оскільки ми розглядаємо тільки дозвукові задачі, то вважатимемо, що відношення $\overline{\rho'u'}/\overline{\rho u}$, $\overline{\rho'v'}/\overline{\rho v}$ та $\overline{\rho'w'}/\overline{\rho w}$ настільки малі, що немає різниці між величинами, які осереднені звичайним засобом та осередненими з використанням густини як вагової функції. Членами із флуктуаціями тиску в рівняннях енергії також нехтуємо. Символами τ та q позначимо напруження і теплові потоки, що містять, як молекулярні, так і турбулентні складові.

Основні рівняння після параболізації мають такий вигляд:

рівняння нерозривності

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} + \rho w \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (1.54a)$$

$$\int_A \rho u \, dA = \text{const} \quad (\text{повна витрата газу}), \quad (1.54б)$$

рівняння руху за координатою x

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} + \rho w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\partial \hat{p}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z}, \quad (1.55)$$

рівняння руху за координатою y

$$\rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} + \rho w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z}, \quad (1.56)$$

рівняння руху за координатою z

$$\rho u \frac{\partial w}{\partial x} + \rho v \frac{\partial w}{\partial y} + \rho w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z}, \quad (1.57)$$

рівняння енергії

$$\begin{aligned} \rho u c_p \frac{\partial T}{\partial x} + \rho v c_p \frac{\partial T}{\partial y} + \rho w c_p \frac{\partial T}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial y}(-q_y) + \frac{\partial}{\partial z}(-q_z) + \\ &+ \beta T u \frac{d\hat{p}}{dx} + \tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{xz} \frac{\partial u}{\partial z}, \end{aligned} \quad (1.58)$$

рівняння стану

$$\rho = \rho(\hat{p}, T). \quad (1.59)$$

За Госманом і Сполдінгом [53] тиск $\hat{p}(x)$ залежить від поздовжньої координати Ox і входить у рівняння руху тільки за цією координатою. Цей тиск буде знайдено пізніше із заданої повної витрати маси. Багато в чому така процедура подібна до процедури знаходження тиску для двовимірних і вісесиметричних течій, які розраховуються з використанням рівнянь прилежового шару [7]. З іншого боку, тиск p , що входить до рівнянь руху за напрямками y та z , змінюється тільки в поперечному перерізі каналу. При цьому припускається, що повний тиск у каналі P дорівнює сумі \hat{p} та p .

Фізичні міркування на користь наведеної вище процедури розкладання тиску пов'язані з тим, що зміни тиску впоперек каналу настільки малі, що їх включення у рівняння руху в поздовжньому напрямку дає дуже малий ефект. Тому у проекції рівняння руху на поздовжній напрямок і нехтують змінами тиску в поперечному перерізі. Водночас ці малі зміни тиску включають у рівняння руху за напрямками y та z , бо вони грають важливу роль у розподілі звичайно малих компонент швидкості за напрямками, які нормальні до стінок. Якщо для визначеності вважати тиск \hat{p} функцією тільки від x , то \hat{p} можна знайти однозначно в кожному поперечному перерізі за заданою повною витратою і рівнянням руху. А це дозволяє звести задачу до параболічної. З іншого боку, оскільки p залежить як від y , так і від z , то для дозвукових течій рівняння будуть еліптичними у площині Oyz . Фактично для $p(y,z)$ у поперечному перерізі з рівнянь руху за напрямками y та z можна отримати рівняння Пуассона. Глобальна процедура обчислень вимагає тоді розв'язання еліптичних рівнянь у кожній поперечній площині, а при просуванні за координатою Ox розв'язок отримують, використовуючи параболічну процедуру.

Відповідно до гіпотези Бусинеска напруження в наведених вище рівняннях обчислюються (з урахуванням угоди про підсумовування за індексами, що повторюються) за формулами

$$\tau_{jk} = (\mu + \mu_T) \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{jk}. \quad (1.60)$$

Для теплових потоків, за аналогічних припущень, маємо такі вирази:

$$q_y = - \left(k + \frac{\mu_T c_p}{Pr_T} \right) \frac{\partial T}{\partial y}, \quad q_z = - \left(k + \frac{\mu_T c_p}{Pr_T} \right) \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (1.61)$$

Подальше спрощення рівняння (1.60) пов'язане із припущенням про нестисливість рідини для деяких специфічних додатків. Маємо

$$\tau_{jk} = (\mu + \mu_T) \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{jk}. \quad (1.62)$$

Для замикання системи рівнянь варто використати підхідну математичну модель турбулентності для μ_T та \mathbf{Pr} . Крайові умови тут звичайні для течії в каналі.

Три рівняння імпульсу утворюють наступну векторну систему рівнянь:

$$u \frac{\partial \vec{\Phi}}{\partial x} = A^* \vec{\Phi} + \vec{S}_p, \quad (1.63)$$

де

$$\begin{aligned} \vec{\Phi} &= \{u, v, w\}^T, \\ A^* \vec{\Phi} &= \frac{1}{\mathbf{Re}} \left(\frac{\partial^2 \vec{\Phi}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \vec{\Phi}}{\partial z^2} \right) - v \frac{\partial \vec{\Phi}}{\partial y} - w \frac{\partial \vec{\Phi}}{\partial z}, \\ \vec{S}_p &= \left\{ -\frac{\partial \hat{p}}{\partial x}, -\frac{\partial p'}{\partial y}, -\frac{\partial p'}{\partial z} \right\}^T. \end{aligned}$$

Поперечні похідні вектора $A^* \vec{\Phi}$ на однорідній сітці апроксимуються триточковими центральними різницями. На неоднорідній сітці використовуються інші апроксимації.

Запишемо дискретне представлення рівняння (1.63), пригідне для маршового розв'язку вздовж каналу (в напрямку Ox):

$$u^n \frac{\Delta \vec{\Phi}^{n+1}}{\Delta x} = A_d^y \cdot \vec{\Phi}^{n+1/2} + A_d^z \cdot \vec{\Phi}^{n+1/2} + \vec{S}_p^n. \quad (1.64)$$

Тут

$$\Delta \vec{\Phi}^{n+1} = \vec{\Phi}^{n+1} - \vec{\Phi}^n, \quad \vec{\Phi}^{n+1/2} = 0.5 \cdot (\vec{\Phi}^{n+1} + \vec{\Phi}^n),$$

$$A_d^y \cdot \vec{\Phi}^{n+1/2} = \left(\frac{1}{\mathbf{Re}} \right) L_{yy} \vec{\Phi}^{n+1/2} - v^n \cdot L_y \vec{\Phi}^{n+1/2},$$

$$A_d^z \cdot \vec{\Phi}^{n+1/2} = \left(\frac{1}{\mathbf{Re}} \right) L_{zz} \vec{\Phi}^{n+1/2} - w^n \cdot L_z \vec{\Phi}^{n+1/2},$$

$$L_y \Phi = \frac{1}{2\Delta y} (\Phi_{j+1,k} - \Phi_{j-1,k}) + O(\Delta y^2),$$

$$L_{yy} \Phi = \frac{1}{\Delta y^2} (\Phi_{j+1,k} - 2\Phi_{jk} + \Phi_{j-1,k}) + O(\Delta y^2).$$

Рівняння (1.59) лінеаризують у вигляді

$$\left[u^n - 0.5\Delta x (A_d^y + A_d^z) \right] \Delta \vec{\Phi}^{n+1} = \Delta x (A_d^y + A_d^z) \vec{\Phi}^n + \Delta x \vec{S}_p^n. \quad (1.65)$$

Якщо тепер додати до лівої частини рівняння (1.65) член $0.25\Delta x^2 A_d^y A_d^z \Delta \vec{\Phi}^{n+1}$, можлива його факторизація, яка приводить до трикрокового алгоритму:

Крок 1

$$\left[u^n - 0.5\Delta x A_d^y \right] \Delta \vec{\Phi}^* = \Delta x (A_d^y + A_d^z) \vec{\Phi}^n + \Delta x \vec{S}_p^n. \quad (1.66)$$

Крок 2

$$\left[u^n - 0.5\Delta x A_d^z \right] \Delta \vec{\Phi}^{n+1} = \Delta \vec{\Phi}^*. \quad (1.67)$$

Крок 3

$$\vec{\Phi}^{n+1} = \vec{\Phi}^n + \Delta \vec{\Phi}^{n+1}. \quad (1.68)$$

Рівняння (1.66) й (1.67) для кожної компоненти вектора $\Delta \vec{\Phi}^*$ й вектора $\Delta \vec{\Phi}^{n+1}$, відповідно, мають тридіагональну матрицю й розв'язуються методом прогонки Томаса [6].

Коротко опишемо найпоширенішу стратегію розв'язання системи (1.54)–(1.59). Зауважимо, що для заданого поля тиску рівняння руху й енергії мають параболічний тип, а отже, можна одержати розв'язок, використовуючи маршові процедури розв'язання рівнянь руху за напрямками x , y та z для визначення, відповідно, компонент швидкості u , v та w . Розв'язуючи рівняння енергії, знаходимо T , а з рівняння стану – густину. Отримані за маршовою процедурою компоненти швидкості зразу не задовольнятимуть рівняння нерозривності, крім випадку, коли розподіл тиску у площині поперечного перерізу є точним. Отже, потрібно знайти правильний розподіл тиску. Для цього створено спеціальну процедуру корекції поля тиску, до якої ми звернемося нижче.

Загалом рівняння, що утворюють замкнену систему, можна було б розв'язати одночасно яким-небудь прямим методом, а потім, використовуючи метод ітерацій, зробити поправку на нелінійність. Проте найефективніші прямі алгоритми розв'язання тут застосовні лише для спеціального класу рівнянь і крайових умов, що сильно обмежує їх придатність для даної задачі. Водночас, якщо скористатися сильноеявною процедурою, для тривимірних параболізованих рівнянь можна розробити ефективніші алгоритми одночасного розрахунку тиску і швидкості. До таких ефективних алгоритмів і належить *підхід із сегрегуванням*.

Стратегія підходу із сегрегуванням така¹.

1. Лінеаризуючи коефіцієнти рівняння (1.55) підхідним способом, тиск \hat{p}^{j+1} можна визначити за процедурою, подібною до процедури, яка запропонована для розрахунку двовимірних або вісесиметричних течій у каналах із використанням рівнянь примежового шару з урахуванням вимоги збереження повної масової витрати [7]. Потім із скінченнорізницевого рівняння (1.55) визначимо $u_{k,l}^{j+1}$. Далі з рівняння енергії знайдемо $T_{k,l}^{j+1}$, а з рівняння стану – $\rho_{k,l}^{j+1}$. При розв'язанні рівнянь руху й енергії дуже добре себе зарекомендувала неявна схема змінних напрямків.
2. Використовуючи прийнятий розподіл тиску, із розв'язання рівнянь (1.56) та (1.57) маршовим методом можна визначити попередні значення v та w (так само як і при розв'язанні рівняння руху за координатою Ox рекомендується знову скористатися неявною схемою змінних напрямків).
3. Результати цього попереднього розв'язку для v та w у площині поперечного перерізу звичайно не задовольняють рівняння нерозривності, що записане в різницевому вигляді. Застосовуючи рівняння нерозривності до попередніх

¹ Верхній індекс $j+1$ належить до поточного перерізу за поздовжньою координатою.

розв'язків для компонент швидкості, можна розрахувати дисбаланс маси в кожній точці сітки. Шукатимемо засіб підправити поле тиску в поперечному перерізі таким чином, щоб усунути цей дисбаланс маси. Саме за способом обчислення поправок до швидкості й тиску і відрізняються тривимірні параболічні методи один від одного. Деякі автори пропонують вважати, слідом за Чоріним [47], підправлений потік безвихровим у площині поперечного перерізу. Тоді можна ввести потенціал, що пов'язаний із тиском, таким чином, щоб перетворити на нуль дисбаланс маси. Підставляючи цей потенціал у рівняння нерозривності, маємо для нього рівняння Пуассона. Позначимо нижнім індексом p попередні значення швидкостей, а нижнім індексом c скориговані (поправочні) їх значення і вимагатимемо, щоб

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} [\rho(v_p + v_c)] + \frac{\partial}{\partial z} [\rho(w_p + w_c)] = 0. \quad (1.69)$$

Тут поздовжній градієнт тиску і похідні від попередніх значень швидкостей відомі в момент часу, коли визначаються поправки, і тому можуть об'єднуватись у джерельний член S_Φ . Таким чином, ми можемо визначити потенціал $\hat{\phi}$ через

$$\rho v_c = \partial \hat{\phi} / \partial y, \quad \rho w_c = \partial \hat{\phi} / \partial z \quad (1.70)$$

і записати рівняння (1.69) у вигляді

$$\frac{\partial^2 \hat{\phi}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \hat{\phi}}{\partial z^2} = S_\Phi. \quad (1.71)$$

Тоді шукані поправки швидкості можна обчислити за розподілом $\hat{\phi}$, який отримано з розв'язку рівняння Пуассона в поперечній площині. При цьому зберігається завихреність початкових полів швидкості v_p та w_p .

Поправки до швидкості визначаються з поправок до тиску відповідно до дуже наближених рівнянь руху, у яких поздовжні конвективні члени врівноважені членами з тиском. Символічно це можна записати у вигляді

$$\rho u \frac{\partial v_c}{\partial x} = -\frac{\partial p'}{\partial y}, \quad \rho u \frac{\partial w_c}{\partial x} = -\frac{\partial p'}{\partial z}. \quad (1.72)$$

Тут p' можна вважати деякою потенційною функцією (подібною до $\hat{\phi}$), яка використовується для розрахунку поправок до швидкості і задовольняє рівняння нерозривності. Деякі автори вважають p' поточною поправкою, яка додається до попереднього значення тиску. Оскільки в попередньому перерізі по поздовжній координаті поправки до швидкості можна вважати нульовими, то рівняння (1.72) можна зінтегрувати. Маємо

$$v_c = -A \frac{\partial p'}{\partial y}, \quad w_c = -B \frac{\partial p'}{\partial z}, \quad (1.73)$$

де A і B – коефіцієнти, до яких входять ρ , u та Δx . Похідні від p' звичайно записують у дискретному вигляді. Значимо подібність між рівняннями (1.73) і наведеними вище виразами (1.70) для поправок швидкостей через потенціал $\hat{\phi}$. Далі рівняння (1.73) підставимо в рівняння нерозривності й одержимо для p' рівняння Пуассона у вигляді

$$\frac{\partial^2 p'}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p'}{\partial z^2} = S_{p'}. \quad (1.74)$$

Шукані поправки до швидкостей тепер можна одержати числовим розв'язанням рівнянь (1.74) із використанням рівнянь (1.73). Зазначений підхід відомий як p' -процедура Патанкара – Сполдінга для визначення поправок до швидкості [11, 12]. Далі запропоновано й удосконалення цієї процедури за рахунок використання повнішої форми рівняння руху для визначення поправок до p' .

4. Тепер необхідно побудувати уточнене поле тиску в поперечному перерізі, що для повних рівнянь руху породжуватиме розподіл швидкостей, які повністю задовольняють рівняння нерозривності. Для цього застосовують різні підходи. Скориговані значення швидкостей можна використати в дискретизованих рівняннях руху для одержання градієнтів тиску, що вже узгоджені з

новими значеннями швидкостей. Символічно це запишеться у вигляді

$$\partial p / \partial y = F_1, \partial p / \partial z = F_2. \quad (1.75)$$

Одну з оцінок "найкращого" оновленого поля тиску можна отримати, якщо розв'язати рівняння Пуассона, одержане з рівнянь (1.75):

$$\frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = \frac{\partial F_1}{\partial y} + \frac{\partial F_2}{\partial z} = S_p. \quad (1.76)$$

Праву частину рівняння (1.76) можна досить просто обчислити з дискретизованих рівнянь руху з урахуванням скоригованих швидкостей, а отже, її можна вважати джерельним членом.

Для правильно скоригованих величин швидкості v та w обчислена за цією процедурою зміна тиску між двома довільними точками у площині поперечного перерізу не залежить від шляху інтегрування. Якщо значення швидкостей v та w скориговані не зовсім точно (точність буде досягнута тільки тоді, коли є збіжність), то для двох різних шляхів між двома точками результати будуть різними. Тоді одну точку беремо як опорну й обчислюємо тиск в інших точках поперечного перерізу шляхом осереднення величин, що отримані інтегруванням по декількох різних шляхах між опорними й цікавими для нас точками. Отримано добрі результати при осередненні тиску при інтегруванні тільки вздовж двох шляхів від опорної до розглянутої точки: (а) спочатку вздовж $y = \text{const}$, а потім уздовж $z = \text{const}$; (б) спочатку вздовж $z = \text{const}$, а потім уздовж $y = \text{const}$.

Тиск також можна оновити зовсім просто: прийняти за поправку до тиску величину p' , що одержана з (1.74).

5. Оскільки не вдається одночасно задовольнити рівняння руху і нерозривності, то перед тим, як перейти до наступного шару, кроки (2)–(4) повторюють з ітеруванням для кожного поперечного перерізу. При цьому звичайно застосовується нижня релаксація для поправок до швидкості й тиску. Тобто при переході від кроку (3) до кроку (4) лише деяка визначена частка обчислених поправок додається до попередніх значень

у та w . Розмір цієї частки досить суттєво змінюється у працях різних авторів. Аналогічно перед переходом до кроку (2) змінюють тиск, додаючи лише частину розрахованої поправки.

Ітерування кроків (2)–(4) закінчується тоді, коли поле тиску встановлюється. При цьому розв'язки рівнянь руху вже задовольняють рівняння нерозривності в межах заданих відхилень і немає потреби далі коригувати швидкість.

Зауваження:

- *Оскільки на кроках (2)–(4) необхідні ітерації, прийнято зупиняти розв'язання проміжного рівняння Пуассона для поправок до швидкості й тиску (особливо в останньому випадку) на декількох перших ітераціях, не чекаючи повної збіжності. Проте доти, поки збіжність у цілому досягнута не буде, мало користі у прагненні одержати найкращий розподіл тиску, заснований на неправильному розподілі швидкості.*
 - *Іноді для організації ітераційного процесу використовують рівняння, що залежать від часу, тобто розв'язують для них задачу на встановлення.*
- б. Після досягнення збіжності кроки (1)–(5) повторюються в наступному перерізі, що розташований нижче за потоком.

Зауваження. Для течій у каналах зі змінним перерізом із метою часткового врахування впливу еліптичності в напрямку основної течії згідно з Флетчером [17] деякі автори включають до аналізу визначений заздалегідь тиск у нев'язкому потоці. При цьому використовують як регулярні сітки, так і сітки з розташуванням вузлів у шаховому порядку.

1.4. Модель частково параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса

Модель частково параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса для дозвукових течій засновано на рівняннях, що концептуально близькі до параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса. Дифузія в

поздовжньому напрямку – єдиний фізичний процес, що його виключають із розгляду, а відповідні члени в рівняннях Нав'є – Стокса опускають. Зараз ця модель застосовна лише у випадку нестисливої рідини, причому члени з в'язкими напруженнями, що залишаються в рівняннях, беруть у спрощеному вигляді порівняно з тими, що були використані вище. У моделі частково параболізованих рівнянь еліптичні ефекти виявлятимуться через поле тиску, що обчислене на поточний момент часу. Тому модель і є тільки частково параболізованою, оскільки її еліптичні властивості, пов'язані з полем тиску, зберігаються. Останнє потребує ітераційного уточнення отриманого розв'язку при послідовному переході в поздовжньому напрямку від одного перерізу до іншого.

Рівняння для тривимірної частково параболізованої моделі, коли основна течія направлена вздовж осі x , збігаються з рівняннями (1.54)–(1.59), лише з урахуванням того, що $d\hat{p}/dx$ замінено на $\partial p/\partial x$. Досі вважалося, що застосування цієї моделі обмежене лише випадком, коли зворотні течії в поздовжньому напрямку відсутні. Тоді тривимірні масиви будуть потрібні лише для збереження значень тиску (і значень джерельного члена рівнянь Пуассона). У цьому і полягає основна перевага частково параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса порівняно з цими самими рівняннями у повному вигляді з погляду організації обчислень. Але недавно було показано, що модель частково параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса можна поширити і на двовимірні додатки зі зворотними течіями в поздовжньому напрямку. Проте при цьому потрібно зберігати ще й компоненти швидкості в зонах зворотних течій та в їх околі.

Опишемо коротко модель частково параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса, яку застосовують для двовимірних стаціонарних ламінарних течій нестисливої рідини:

рівняння нерозривності

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (1.77)$$

рівняння руху за координатою x

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (1.78)$$

рівняння руху за координатою y

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + v \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}. \quad (1.79)$$

Скористаємося сіткою з розташуванням вузлів у шаховому порядку (рознесена сітка) і методом об'ємів. Ідея рознесеної сітки полягає в тому, що для кожної компоненти швидкості визначається своя сітка, як це показано на рис. 1.2. Щоб уникнути плутанини на рисунку позначено тільки вузли сітки (жирною крапкою), де розраховують значення скалярних величин (тиск і поправки до потенціалу швидкості $\hat{\phi}$ у нашому випадку). Компоненти швидкості обчислюють у точках, що розташовані на гранях контрольного об'єму, який можна окреслити навколо точок, де розраховують значення тиску. Точки, де обчислюють компоненти швидкості, розташовані посередині відрізка між сусідніми точками, в яких обчислюється тиск. Для нерівномірної сітки це означає, що точки, де обчислюють тиск, не обов'язково є геометричним центром контрольного об'єму. Точки, в яких розраховують компоненти швидкості, показано на рис. 1.2 стрілками: вертикальні стрілки позначають точки для v , горизонтальні – точки для u . Незважаючи на те, що різні змінні обчислюються в різних точках, зручно позначати змінні одним набором індексів. Таким чином, позначення $(j+1, k)$ належить до набору із трьох незбіжних точок у формі бумеранга на рис. 1.2. На сітці з розташуванням вузлів у шаховому порядку точка $v_{j+1, k}$ міститься нижче точки $p_{j+1, k}$, а точка $u_{j+1, k}$ – правіше точки $p_{j+1, k}$.

На сітці з розташуванням вузлів у шаховому порядку для рівномірної за просторовими координатами сітки поле швидкості можна апроксимувати із другим порядком мализни у вузлах, що позначені жирною точкою, використовуючи компоненти швидкості в суміжних точках. Така конфігурація надає різницевої апроксимації ще і властивість

консервативності. До того ж різниця тисків між двома сусідніми точками стає природною рушійною силою для компонент швидкості, що розташовані між цими точками. Іншими словами, проста апроксимація похідних тиску різницями вперед є "центральною" стосовно "точок", де обчислюються компоненти швидкості. Це дозволяє записати рівняння Пуассона для тиску, яке автоматично задовольняє теорему Гаусса про дивергенцію, якщо особливим чином задавати крайові умови. Останнє

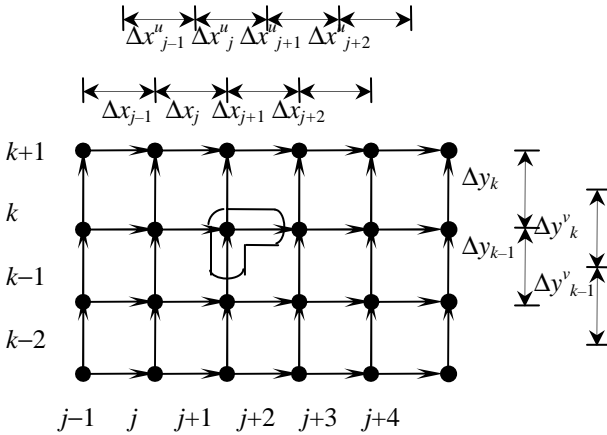


Рис. 1.2. Схема з розташуванням вузлів у шаховому порядку

простіше здійснити на сітці з розташуванням вузлів у шаховому порядку.

Межі розрахункової області найзручніше розташувати вздовж ліній сітки, у вузлах якої обчислюються нормальні до межі компоненти швидкості. Приклад для нижньої межі показано на рис. 1.3. Фіктивні точки розташовані поза фізичними межами, що необхідно для реалізації підхідних крайових умов

Нехай, наприклад, ми хочемо задати на нижній межі (рис. 1.3) умову "прилипання". Компонента швидкості v береться саме на лінії, що збігається з фізичною межею, тому задаємо просто $v_{j+1,k}=0$. Задання компоненти швидкості u не настільки очевидне, бо точки, де вона обчислюється, не лежать

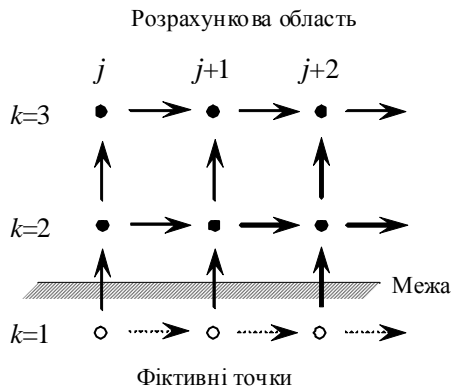


Рис. 1.3. Крайові умови для шахового розташування вузлів

на цій межі. Проте головне, щоб у результаті дотична компонента швидкості дорівнювала нулю в місці розташування фізичної межі. Цього можна домогтися, або дискретизуючи особливим чином рівняння збереження для контрольного об'єму на межі області, або накладаючи обмеження на розв'язок поблизу межі таким чином, щоб його екстраполяція на межі задовольняла умову прилипання. Є ще і третя можливість, якою найчастіше й користуються, – задають швидкість у фіктивних точках, що лежать нижче межі таким чином, щоб $(u_{j+1,1} + u_{j+2,2})/2 = 0$. Останнє почасти нагадує крайову умову віддзеркалювання для нев'язких течій. Значення швидкості у фіктивних точках потім за потреби використовують у рівняннях руху для внутрішньої області. Необхідні для корекції швидкості значення потенціалу одержують, використовуючи точки, що лежать поза фізичними межами. Проте немає потреби обчислювати тиск у цих фіктивних точках на межі. Швидкість у цих точках задається особливим чином, як це буде показано нижче. Подробиці задання крайових умов на сітці з розташуванням вузлів у шаховому порядку можна знайти у роботі [43].

Існує вибір і в представленні конвективних похідних у рівняннях руху. У наведеній далі схемі використовують триточкові апроксимації другого порядку з різницями проти

потоків для конвективних членів, що подібні $u \partial \phi / \partial x$. Для членів типу $u \partial \phi / \partial y$ застосовано гібридну схему. Отримані різниці вирази лінеаризуються екстраполяцією коефіцієнтів за значеннями у двох сусідніх перерізах, що розташовані вище за потоком. Коли виникає зворотна течія, напрямом "вітру" змінюється на протилежний і це враховується під час апроксимації похідних у поздовжньому напрямку і при екстраполяції коефіцієнтів.

Розглянемо екстраполяцію докладніше. Верхній індекс $n+1$ належить до поточної глобальної ітерації (тобто до проходження розрахункової області у процесі числового інтегрування), нижній індекс $j+1$ означає поточний переріз за поздовжньою координатою, а нижній індекс k – точки сітки в напрямку y . Для течії в додатному напрямку осі Ox коефіцієнт $u_{j+1,k}^{n+1}$ екстраполюється в такий спосіб:

$$\hat{u}_{j+1,k}^{n+1} = \left(1 + \frac{\Delta x_j^u}{\Delta x_{j-1}^u} \right) u_{j,k}^{n+1} - \frac{\Delta x_j^u}{\Delta x_{j-1}^u} u_{j-1,k}^{n+1}. \quad (1.80)$$

Знак $\hat{}$ вказує на те, що $\hat{u}_{j+1,k}^{n+1}$ – відома величина, яка визначається шляхом екстраполяції. Екстрапольована величина $\hat{v}_{j+1,k}^{n+1}$ утворюється аналогічно. Якщо величина $\hat{u}_{j+1,k}^{n+1}$ у наведеному вище виразі стає від'ємною, то вважають, що в точці $(j+1, k)$ виникає зворотна течія. При цьому в розглянутій моделі $\hat{u}_{j+1,k}^{n+1}$ замінюють на $u_{j+1,k}^n$, а $\hat{v}_{j+1,k}^{n+1}$ – на $v_{j+1,k}^n$, тобто використовують значення компонент швидкості з попередньої ітерації, що зберігається для точок усередині й поблизу зони зворотної течії. Як альтернативу такої заміни використовують екстраполяцію згідно з виразом

$$\hat{u}_{j+1,k}^{n+1} = \left(1 + \frac{\Delta x_{j+1}^u}{\Delta x_{j+2}^u} \right) u_{j+2,k}^{n+1} - \frac{\Delta x_{j+1}^u}{\Delta x_{j+2}^u} u_{j+3,k}^{n+1}. \quad (1.81)$$

Величину $\hat{v}_{j+1,k}^{n+1}$ також можна одержати екстраполяцією в область зворотної течії. Конвективні похідні в поздовжньому напрямку подаються таким чином:

1) за відсутності зворотної течії

$$\left(u \frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+1,k}^{n+1} \approx \hat{u}_{j+1,k}^{n+1} \left(\frac{\Delta x_{j-1}^u + 2\Delta x_j^u}{\Delta x_j^u (\Delta x_{j-1}^u + \Delta x_j^u)} u_{j+1,k}^{n+1} - \frac{\Delta x_{j-1}^u + \Delta x_j^u}{\Delta x_{j-1}^u \Delta x_j^u} u_{j,k}^{n+1} + \frac{\Delta x_j^u}{\Delta x_{j-1}^u (\Delta x_{j-1}^u + \Delta x_j^u)} u_{j-1,k}^{n+1} \right); \quad (1.82)$$

2) в області зворотної течії

$$\left(u \frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+1,k}^{n+1} \approx -\hat{u}_{j+1,k}^{n+1} \left(\frac{\Delta x_{j+2}^u + 2\Delta x_{j+1}^u}{\Delta x_j^u (\Delta x_{j+2}^u + \Delta x_{j+1}^u)} u_{j+1,k}^{n+1} - \frac{\Delta x_{j+2}^u + \Delta x_{j+1}^u}{\Delta x_{j+2}^u \Delta x_{j+1}^u} u_{j+2,k}^{n+1} + \frac{\Delta x_{j+1}^u}{\Delta x_{j+2}^u (\Delta x_{j+2}^u + \Delta x_{j+1}^u)} u_{j+3,k}^{n+1} \right). \quad (1.83)$$

Член $v \partial u / \partial y$ апроксимується за гібридною схемою [7]:

$$\begin{aligned} \left(v \frac{\partial u}{\partial y}\right)_{j+1,k}^{n+1} \approx & \left[\hat{v}_{j+1,k}^{n+1} \frac{u_{j+1,k}^{n+1} - u_{j+1,k-1}^{n+1}}{\Delta y_{k-1}} \frac{\Delta y_k}{\Delta y_k + \Delta y_{k-1}} + \right. \\ & \left. + \hat{v}_{j+1,k+1}^{n+1} \frac{u_{j+1,k+1}^{n+1} - u_{j+1,k}^{n+1}}{\Delta y_k} \frac{\Delta y_{k-1}}{\Delta y_k + \Delta y_{k-1}} \right] W + \\ & + \hat{v}_{j+1,k}^{n+1} \frac{u_{j+1,k}^{n+1} - u_{j+1,k-1}^{n+1}}{\Delta y_{k-1}} (1-W) A + \\ & + \hat{v}_{j+1,k+1}^{n+1} \frac{u_{j+1,k+1}^{n+1} - u_{j+1,k}^{n+1}}{\Delta y_k} (1-W) B. \end{aligned} \quad (1.84)$$

Величини W , A та B визначаються нижче. Отже, нехай

$$\mathbf{Re}_m^+ = \frac{\hat{v}_{j+1,k+1}^{n+1} \Delta y_{k-1}}{\nu}, \quad \mathbf{Re}_m^- = \frac{\hat{v}_{j+1,k}^{n+1} \Delta y_k}{\nu}. \quad (1.85)$$

$$\text{Якщо } \mathbf{Re}_m^+ > \mathbf{Re}_{cell}, W = \mathbf{Re}_{cell} / \mathbf{Re}_m^+, A = 1, B = 0. \quad (1.86a)$$

$$\text{Якщо } \mathbf{Re}_m^+ < \mathbf{Re}_{cell}, W = \mathbf{Re}_{cell} / \mathbf{Re}_m^-, A = 0, B = 1. \quad (1.86b)$$

$$\text{Якщо } \mathbf{Re}_m^- < \mathbf{Re}_{cell} < \mathbf{Re}_m^+, W = 1, A = 0, B = 0. \quad (1.86в)$$

Тут \mathbf{Re}_{cell} – критичне сіткове число Рейнольдса, що дорівнює 1.9.

Таким чином, схема є зваженим середнім центральних різниць і різниць угору за потоком при помірних та великих сіткових числах Рейнольдса і вироджується у схему з центральними різницями при малих сіткових числах Рейнольдса.

Друга похідна дискретизується так:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_{j+1,k}^{n+1} \approx \frac{2}{\Delta y_k + \Delta y_{k-1}} \left(\frac{u_{j+1,k+1}^{n+1} - u_{j+1,k}^{n+1}}{\Delta y_k} - \frac{u_{j+1,k}^{n+1} - u_{j+1,k-1}^{n+1}}{\Delta y_{k-1}} \right). \quad (1.87)$$

Похідна від тиску в рівнянні руху в поздовжньому напрямку апроксимується у вигляді

$$\left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{j+1,k}^{n+1} \approx \frac{P_{j+2,k}^n - P_{j+1,k}^n}{\Delta x_{j+1}}, \quad (1.88)$$

що забезпечує вплив на $u_{j+1,k}^{n+1}$ тиску з точки, що розташована нижче за потоком.

Рівняння руху за координатою у дискретизується аналогічно. За рахунок використання сітки з розташуванням вузлів у шаховому порядку, $v_{j+1,k}^{n+1}$ обчислюють в інших точках ніж $u_{j+1,k}^{n+1}$. Запис коефіцієнтів у різницевому рівнянні руху за координатою Oy має відбуватися з урахуванням останнього зауваження. Наприклад, при апроксимації члена $u \partial v / \partial x$ коефіцієнт u повинен розраховуватися як середнє на двох k -шарах. При апроксимації похідної від тиску використовують значення тиску з обох сторін від точки, де обчислюють її величину

$$\left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{j+1,k}^n \approx \frac{P_{j+1,k}^n - P_{j+1,k-1}^n}{\Delta y_{k-1}}. \quad (1.89)$$

При розв'язанні рівнянь руху застосовують "найкращу" оцінку поля тиску. Подробиці її одержання наведено далі. При заданому полі тиску рівняння руху параболічні та розв'язуються окремо – рівняння руху по осі Ox для $u_{j+1,k}^{n+1}$ та рівняння руху по осі Oy для $v_{j+1,k}^{n+1}$. Для невідомих у перерізі $j+1$ маємо систему алгебраїчних рівнянь із тридіагональною матрицею, яку можна розв'язати методом прогонки [6]. Як зазначалося вище, під час розгляду тривимірної процедури параболізації, розв'язок для компонент швидкості не задовольнятиме рівняння нерозривності доти, поки ми не знайдемо правильне поле тиску. Тому компоненти швидкості, що отримані з розв'язання рівнянь руху, є попередніми. Нехай поправки до швидкості виражаються через потенціал $\hat{\phi}$ так, щоб підправлені компоненти швидкості задовольняли рівняння нерозривності, тобто

$$\frac{\partial(u_p + u_c)}{\partial x} + \frac{\partial(v_p + v_c)}{\partial y} = 0, \quad (1.90)$$

де u_c і v_c – поправки до компонентів швидкості, u_p і v_p – попередні значення компонентів швидкості, що отримані з рівнянь руху в перерізі $j+1$. Визначимо потенціал $\hat{\phi}$:

$$u_c = \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x}, \quad v_c = \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y}, \quad (1.91)$$

тоді

$$\frac{\partial^2 \hat{\phi}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \hat{\phi}}{\partial y^2} = - \left(\frac{\partial u_p}{\partial x} + \frac{\partial v_p}{\partial y} \right) = S_{\Phi}. \quad (1.92)$$

Відповідне різницеве рівняння має вигляд

$$\frac{1}{\Delta x_j''} \left(\frac{\hat{\phi}_{j+2,k} - \hat{\phi}_{j+1,k}}{\Delta x_{j+1}} - \frac{\hat{\phi}_{j+1,k} - \hat{\phi}_{j,k}}{\Delta x_j} \right) + \frac{1}{\Delta y_k^v} \left(\frac{\hat{\phi}_{j+1,k+1} - \hat{\phi}_{j+1,k}}{\Delta y_k} - \frac{\hat{\phi}_{j+1,k} - \hat{\phi}_{j+1,k-1}}{\Delta y_{k-1}} \right) = \quad (1.93)$$

$$= -2 \frac{(u_p)_{j+1,k} - (u_p)_{j,k}}{\Delta x_j + \Delta x_{j+1}} - 2 \frac{(v_p)_{j+1,k+1} - (v_p)_{j+1,k}}{\Delta y_k^v + \Delta y_{k-1}^v} = (S_\Phi)_{j+1,k}.$$

Подібне до (1.93) алгебраїчне рівняння можна виписати для потенціалу в кожній точці сітки впоперек потоку: $k = 2, 3, \dots, NY$, де $k = 2$ – це перша точка $\hat{\phi}$ сітки відразу над нижньою межею області, а $k = NY$ – це точка $\hat{\phi}$ відразу під верхньою межею. Таким чином, якщо $\hat{\phi}_{j,k}$ і $\hat{\phi}_{j+2,k}$ відомі, то маємо систему рівнянь із тридіагональною матрицею для визначення невідомих функцій $\hat{\phi}_{j+1,k}$. При обчисленні $\hat{\phi}_{j,k}$ і $\hat{\phi}_{j+2,k}$ звичайно припускають таке:

- 1) $\hat{\phi}_{j,k} = \hat{\phi}_{j+1,k}$, що означає поправки до швидкості дорівнюють нулю в перерізі j , де збереження маси вже забезпечене;
- 2) $\hat{\phi}_{j+2,k} = 0$, що означає $(v_c)_{j+2,k}$ дорівнює нулю, як при досягненні збіжності. Зазначимо, що довільне інше припущення щодо $\hat{\phi}_{j+2,k}$ тут буде несумісне з вимогами збіжності. Крайові умови, необхідні для розв'язання системи рівнянь із тридіагональною матрицею щодо $\hat{\phi}_{j+1,k}$, вибирають таким чином, щоб вони були сумісні із заданими крайовими умовами для швидкості. Наприклад, якщо швидкість задають на верхній та нижній межах, то v_c на цих межах дорівнюватиме нулю. Тоді крайовими умовами для $\hat{\phi}_{j+1,k}$ будуть

$$\hat{\phi}_{j+1,1} = \hat{\phi}_{j+1,2} \quad \text{та} \quad \hat{\phi}_{j+1,NY} = \hat{\phi}_{j+1,NY+1}. \quad (1.94)$$

Після того, як $\hat{\phi}_{j+1,k}$ знайдено, визначаємо поправки до швидкості, використовуючи різниці апроксимації виразів (1.91). Маємо

$$(u_c)_{j+1,k} = -\frac{\Phi_{j+1,k}}{\Delta x_{j+1}}, \quad (v_c)_{j+1,k} = -\frac{\Phi_{j+1,k} - \Phi_{j+1,k-1}}{\Delta y_{k-1}}. \quad (1.95)$$

Тепер скориговані швидкості задовольняють рівняння нерозривності в кожній точці перерізу $j+1$, але не задовольняють точно рівняння руху доти, поки не буде досягнута збіжність.

Між двома глобальними ітераціями поле тиску оновлюється шляхом розв'язання рівняння Пуассона для тиску методом послідовної верхньої релаксації. При цьому рівняння Пуассона одержуємо з рівнянь руху, що перетворені до вигляду:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -\rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - \nu u \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = G1, \quad (1.96)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = -\rho \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} - \nu u \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) = G2. \quad (1.97)$$

При дискретизації рівнянь (1.96 і 1.97) величини $G1$, $G2$ обчислюють посередині відрізка між точками, що використовуються для апроксимації похідних тиску, які стоять у лівій частині. Отже, точки дискретизації $G1$ збігаються з точками дискретизації u , а $G2$ – із точками дискретизації v . Тепер тиск визначаємо з рівняння

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \frac{\partial G1}{\partial x} + \frac{\partial G2}{\partial y} = S_p. \quad (1.98)$$

Зауважимо, що в (1.98) $G1$ та $G2$ обчислюють із використанням скоригованих швидкостей, що задовольняють рівняння нерозривності. Це породжує поле тиску, яке в результаті змушує розв'язок рівнянь руху збігатися при локальному збереженні маси. Джерельні члени S_p розраховують і зберігають у пам'яті комп'ютера під час усієї глобальної ітерації. Звичайно роблять одне уточнення поля тиску методом послідовної верхньої релаксації під час проходження поля течії зверху вниз. Неважко оновити тиск релаксацією вздовж однієї лінії, перед тим, як переходити до визначення швидкості в наступному перерізі по j .

Ще декілька уточнень методом послідовної верхньої релаксації роблять наприкінці глобальної ітерації.

Зауваження:

- До добрих результатів веде використання параметра верхньої релаксації, рівного 1.7.
- Джерельний член звичайно уточнюють методом нижньої релаксації з параметром 0.2÷0.65, а на перших глобальних ітераціях навіть з іще меншим параметром.

Крайові умови для рівняння Пуассона для тиску тут є крайовими умовами Неймана, які одержують із рівнянь руху. Відповідно до теореми Гаусса маємо

$$\iint S_p dx dy = \int \frac{\partial p}{\partial n} dC, \quad (1.99)$$

де C – межа області течії, $\partial p / \partial n$ – відповідна крайова умова Неймана. Для збіжності процедури розв'язання рівняння Пуассона необхідно задовольнити різницевий еквівалент рівності (1.99). На сітці з розташуванням вузлів у шаховому порядку це роблять так: зв'язують рівнянням тиск у крайових p -точках із тиском усередині області через задані на межі похідні рівнянням, до якого неявно входить номер ітерації методу послідовної верхньої релаксації по точках. Такий прийом [63] при розв'язанні рівняння Пуассона для тиску цілком усуває залежність розв'язку від заданого на межі тиску. Якщо дискретизація S_p має властивість консервативності, ітераційний процес збігається. При дискретизації рівняння (1.98) у p -точці, яка суміжна з нижньою межею і лежить усередині області, маємо такі крайові умови:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta x_j^u} \left(\frac{P_{j+2,2}^m - P_{j+1,2}^m}{\Delta x_{j+1}} - \frac{P_{j+1,2}^{m+1} - P_{j,2}^{m+1}}{\Delta x_j} \right) + \\ & + \frac{1}{\Delta y_{k+1}^v} \left(\frac{P_{j+1,3}^{m+1} - P_{j+1,2}^{m+1}}{\Delta y_k} - \frac{P_{j+1,2}^{m+1} - P_{j+1,1}^{m+1}}{\Delta y_{k-1}} \right) = \\ & = \frac{G1_{j+1,2} - G1_{j,2}}{\Delta x_j^u} + \frac{G2_{j,3} - G2_{j,2}}{\Delta y_k^v}. \end{aligned} \quad (1.100)$$

Тут m – номер ітерації у процедурі послідовної верхньої релаксації розв'язання рівняння Пуассона; $m+1$ означає поточну ітерацію. Крайову умову для рівняння Пуассона на нижній межі беруть такою: $(\partial p / \partial y)_w = G2$, тобто похідна від тиску на межі оцінюється за рівнянням руху. Дискретизують його в такий спосіб:

$$\frac{P_{j+1,2}^{m+1} - P_{j+1,1}^{m+1}}{\Delta y_{k-1}} = G2_{j+1,2}. \quad (1.101)$$

Сюди величини тиску на поточній ітерації входять у неявному вигляді. Тепер можна виключити з рівняння Пуассона тиск $P_{j+1,1}^{m+1}$ у фіктивній точці під нижньою межею, підставляючи рівняння (1.101) у (1.100). Маємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x_j''} \left(\frac{P_{j+2,2}^m - P_{j+1,2}^{m+1}}{\Delta x_{j+1}} - \frac{P_{j+1,2}^{m+1} - P_{j,2}^{m+1}}{\Delta x_j} \right) + \frac{1}{\Delta y_{k-1}^v} \left(\frac{P_{j+1,3}^{m+1} - P_{j+1,2}^{m+1}}{\Delta y_k} \right) = \\ = \frac{G1_{j+1,2} - G1_{j,2}}{\Delta x_j''} + \frac{G2_{j,3}}{\Delta y_k^v}. \end{aligned} \quad (1.102)$$

Розгляд дискретизації S_p підтверджує задоволення вимоги, що впливає з теореми Гаусса, у випадку розглянутої процедури. Зауважимо, що при обчисленні $\iint S_p dx dy$ залишаються тільки члени зі значеннями $G1$ і $G2$ на межах області. Якщо крайові умови виражено через $G1$ і $G2$, то значення останніх виразів на межах точно дорівнюють $\int (\partial p / \partial n) dC$, як це видно з рівнянь (1.101) та (1.102).

Підсумуємо коротко основні етапи процедури розв'язання частково параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса.

1. Із розв'язку рівняння руху одержують перше наближення профілів швидкості в перерізі $j+1$, використовуючи для цього визначене деяким чином початкове поле тиску. Для першої глобальної ітерації це початкове поле тиску можна одержати за таких припущень:

а) $\partial p / \partial x = -\rho u e (du_e / dx)$ та $\partial p / \partial y = 0$; або

б) $\partial p / \partial y = 0$, а величина $\partial p / \partial x$ тут визначається методом січних за умови, що глобально зберігається потік маси.

Остання процедура дуже схожа на процедуру розрахунку внутрішніх течій для рівнянь прилежового шару [7].

На наступних глобальних ітераціях тиск униз за потоком можна підправити, знову використовуючи метод січних у кожному j -му перерізі таким чином, щоб глобально виконувався закон збереження маси впоперек потоку. У результаті дисбаланс маси впоперек потоку перетворюється на нуль і, у деяких випадках, навіть виникає збіжність по швидкості. Для одержання розв'язку в області зворотної течії апроксимація Флюге – Лотца [1, 7] застосовується тільки на першій глобальній ітерації.

2. Для того, щоб локально задовольнити рівняння нерозривності, коригують значення компонент швидкості, використовуючи для цього потенціал $\hat{\phi}$.
3. Оновлюють тиск у перерізі $j+1$, виконуючи один крок за методом послідовної верхньої релаксації вздовж координатної лінії впоперек потоку. На цій стадії розрахунку реалізація релаксації не є обов'язковою, бо все поле тиску буде уточнюватися наприкінці глобальної ітерації.
4. Кроки (1)–(3) повторюють у кожному поперечному перерізі доти, доки не буде досягнута кінцева межа розрахункової області за поздовжньою координатою.
5. Після проходження маршем усієї розрахункової області уточнюють поле тиску, розв'язуючи рівняння Пуассона методом послідовної верхньої релаксації. Цей крок завершує одну глобальну ітерацію.
6. Наступна глобальна ітерація починається з початкової межі розрахункової області з використанням оновленого поля тиску. Процес продовжується доти, поки поправки до швидкості не стануть малими, тобто, коли за розрахованим полем тиску з рівнянь руху одержимо компоненти швидкості, що задовольняють рівняння нерозривності.

Задачі

1. Побудувати програму для розв'язання стаціонарної задачі про надходження холодної рідини у довгий гарячий двовимірний канал. Далеко від вхідного перерізу розподіл температури стає суттєво двовимірним і описується крайовою задачею

$$\frac{\partial}{\partial x}(uT) + \frac{\partial}{\partial y}(vT) = \alpha_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \alpha_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}, \quad (3-1)$$

$$T(0, y) = 0, \quad x = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad x = x_{\max};$$

$$T(x, \pm 1) = 1, \quad y = \pm 1, \quad (3-2)$$

де $\alpha_x = 10 / (\mathbf{Pr Re}^2)$, $\alpha_y = 1.6 / \mathbf{Pr}$. Параболізувати рівняння (3-1) і розв'язати його, використовуючи скінченнорізницеве представлення диференціальних операторів, у випадку: 1) $\Delta x = 0.05$, $\Delta y = 0.20$; 2) $\Delta x = 0.20$, $\Delta y = 0.20$. Отриманий розв'язок порівняти з напіваналітичним розв'язком Брауна.

2. Модифікувати задачу 1, використовуючи для представлення диференціальних операторів у параболізованому рівнянні (3-1) масовий оператор.
3. Скласти алгоритм корекції швидкості для тривимірної параболізованої процедури у випадку течії стисливої рідини в каналі прямокутного перерізу. Скористатися методом потенціалу $\hat{\phi}$ та p' -методом. Використати сітку з вузлами у шаховому порядку.
4. Розв'язати методом ітерацій за часом систему параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса у вигляді

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (3-3)$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} + \alpha \frac{\partial^2 p}{\partial x \partial t} - \frac{1}{\mathbf{Re}} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0,$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} - \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = 0,$$

де член $\alpha \partial^2 p / \partial x \partial t$ додано для стійкості ітерацій за тиском. Маємо крайові умови прилипання на профілі NACA-0012, що знаходиться під нульовим кутом атаки, й незбурену течію далеко від профілю. Профілі родини NACA-00't' визначаються із рівняння

$$y = t (a_1 x^{1/2} + a_2 x + a_3 x^2 + a_4 x^3 + a_5 x^4), \quad (3-4)$$

де $a_1 = 1.4779155$, $a_2 = -0.624424$, $a_3 = -1.727016$, $a_4 = 1.384087$, $a_5 = -0.489769$, t – товщина аеродинамічного профілю. С-сітка будується з використанням однієї проміжної поверхні поблизу профілю [7].

5. Розв'язати задачу 4 з використанням частково параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса, підходу із сегрегуванням й схеми з розташуванням вузлів у шаховому порядку.
6. Використати параболізовані рівняння Нав'є – Стокса й ефективну неявну приблизно факторизовану схему без ітерацій для розрахунку ламінарного примежового шару на пластинці, на якій розміщено круговий циліндр радіуса a із центром у точці $x=x_0$, $z=0$. Розподіл швидкості для нев'язкої задачі має вигляд

$$\frac{u_e}{U_\infty} = 1 + \left\{ \left(\frac{z}{a} \right)^2 - \left[\frac{x - x_0}{a} \right]^2 \right\} / \left(\frac{r}{a} \right)^4, \quad (3-5)$$

$$\frac{w_e}{U_\infty} = 2 \left\{ (x - x_0) \frac{z}{a^2} \right\} / \left(\frac{r}{a} \right)^4, \quad r^2 = (x - x_0)^2 + z^2.$$

7. Розв'язати задачу 6., використовуючи частково параболізовані рівняння Нав'є – Стокса й підхід із сегрегуванням.
8. Використовуючи частково параболізовані рівняння Нав'є – Стокса, підхід із сегрегуванням й сітку із розташуванням вузлів у шаховому порядку, розв'язати задачу про обтікання зворотної приступки при $\text{Re} = 100$.

МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ ПОВНИХ РІВНЯНЬ НАВ'Є – СТОКСА

2.1. Рівняння Нав'є – Стокса для стисливої рідини

Для ламінарної течії стисливої рідини рівняння Нав'є – Стокса за відсутності масових сил і підводу теплоти ззовні можна записати у векторному вигляді в декартовій системі координат:

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial z} = 0, \quad (2.1)$$

де

$$\vec{U} = \{\rho, \rho u, \rho v, \rho w, E_t\}^T, \quad (2.2)$$

$$\vec{E} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p - \tau_{xx} \\ \rho uv - \tau_{xy} \\ \rho uw - \tau_{xz} \\ (E_t + p)u - u\tau_{xx} - \\ -v\tau_{xy} - w\tau_{xz} + q_x \end{bmatrix}, \quad \vec{F} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p - \tau_{yy} \\ \rho vw - \tau_{yz} \\ (E_t + p)v - u\tau_{xy} - \\ -v\tau_{yy} - w\tau_{yz} + q_y \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

$$\vec{G} = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho uw - \tau_{xz} \\ \rho vw - \tau_{yz} \\ \rho w^2 + p - \tau_{zz} \\ (E_t + p)w - u\tau_{xz} - v\tau_{yz} - w\tau_{zz} + q_z \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

тут компоненти тензора зсувних напружень і вектора теплового потоку мають вигляд

$$\tau_{xx} = \frac{2}{3}\mu \left(2\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial w}{\partial z} \right), \quad \tau_{yy} = \frac{2}{3}\mu \left(2\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial z} \right), \quad (2.5a)$$

$$\begin{aligned} \tau_{zz} &= \frac{2}{3}\mu \left(2\frac{\partial w}{\partial z} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad \tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \\ \tau_{xz} = \tau_{zx} &= \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right), \quad \tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right), \\ q_x &= -k \frac{\partial T}{\partial x}, \quad q_y = -k \frac{\partial T}{\partial y}, \quad q_z = -k \frac{\partial T}{\partial z}. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Ці рівняння можна переписати у криволінійній ортогональній системі координат $Ox_1x_2x_3$ або у криволінійній системі координат загального вигляду $O\xi\eta\zeta$, якщо виконати відповідні перетворення координат¹:

$$\xi = \xi(x, y, z), \quad \eta = \eta(x, y, z), \quad \zeta = \zeta(x, y, z). \quad (2.6)$$

Для турбулентних течій, скориставшись гіпотезою Бусинеска [7], рівняння Нав'є – Стокса можна замінити на рівняння Рейнольдса підстановкою $\mu_T + \mu$ замість коефіцієнта в'язкості μ і підстановкою $k_T + k$ замість коефіцієнта теплопровідності k . Тут μ_T – коефіцієнт турбулентної (вихрової) в'язкості, k_T – коефіцієнт турбулентної теплопровідності: $k_T = c_p \mu_T / Pr_T$.

Як уже зазначалося раніше, нестационарні рівняння Нав'є – Стокса для стисливої рідини утворюють мішану систему гіперболічно-параболічних рівнянь відносно часу. Якщо в цих рівняннях опустити нестационарні члени, то отримана мішана система має гіперболічно-еліптичний тип і її розв'язати буде складніше через несхожість методів числового розв'язання для рівнянь гіперболічного й еліптичного типів. Тому майже всі успішні випадки розв'язання рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини пов'язано з нестационарною формою цих рівнянь. Тоді стаціонарний розв'язок можна отримати, розглядаючи процес, встановлений за часом. Підхід до розв'язання стаціонарних рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини пов'язаний із розв'язанням нестационарних рівнянь і розглядатиметься далі в цьому розділі.

¹ Систему (2.1)–(2.5) у довільній системі координат наведено у другій частині посібника [7].

Для розв'язання нестационарних рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини використовують явні та неявні схеми. Майже всі ці схеми мають другий порядок мализни за простором і або перший, або другий порядок мализни за часом. Якщо потрібно одержати точну картину розвитку течії з часом, порядок схеми за часом має бути принаймні другим. Якщо ж нас цікавить тільки стаціонарний розв'язок, то часто вигідніше користуватися менш точними за часом схемами, бо для них установлення досягається меншою кількістю кроків за часом.

Через велику додаткову складність існує мало повідомлень про застосування схем третього порядку (або вище) для розв'язання рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини. Винятки наведено в монографії Белова та ін. [2].

2.1.1. Явні схеми Мак-Кормака

Безпосереднє застосування схеми Мак-Кормака [8] до системи рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини (2.1) приводить до алгоритму:

предиктор

$$U_{j,k,l}^{\overline{n+1}} = U_{j,k,l}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (E_{j+1,k,l}^n - E_{j,k,l}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (F_{j,k+1,l}^n - F_{j,k,l}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta z} (G_{j,k,l+1}^n - G_{j,k,l}^n); \quad (2.7)$$

коректор

$$U_{j,k,l}^{n+1} = \frac{1}{2} \left[U_{j,k,l}^n + U_{j,k,l}^{\overline{n+1}} - \frac{\Delta t}{\Delta x} (E_{j,k,l}^{\overline{n+1}} - E_{j-1,k,l}^{\overline{n+1}}) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (F_{j,k,l}^{\overline{n+1}} - F_{j,k-1,l}^{\overline{n+1}}) - \frac{\Delta t}{\Delta z} (G_{j,k,l}^{\overline{n+1}} - G_{j,k,l-1}^{\overline{n+1}}) \right], \quad (2.8)$$

де $x = j\Delta x$, $y = k\Delta y$ та $z = l\Delta z$. Ця явна схема має другий порядок мализни і за простором, і за часом. У розглянутому варіанті схеми на кроці предиктор для апроксимації всіх просторових похідних використовуються різниці вперед, а на кроці коректор – різниці назад. Різниці вперед і назад можна послідовно чергувати як на кроках предиктор–коректор, так і при

апроксимації похідних за трьома просторовими координатами. Останнє усуває будь-які неузгодженості, що обумовлені дискретизацією рівнянь із використанням односторонніх різниць. Приклад подібного чергування наведено у табл. 2.1.

Таблиця 2.1. Послідовність апроксимації для схеми Мак-Кормака

Крок	Предиктор			Коректор		
	x-похідна	y-похідна	z-похідна	x-похідна	y-похідна	z-похідна
1	В ¹⁾	В	В	Н ²⁾	Н	Н
2	Н	Н	В	В	В	Н
3	В	В	Н	Н	Н	В
4	Н	В	Н	В	Н	В
5	В	Н	В	Н	В	Н
6	Н	В	В	В	Н	Н
7	В	Н	Н	Н	В	В
8	Н	Н	Н	В	В	В
9	В	В	В	Н	Н	Н
...

1) В – різниці вперед;

2) Н – різниці назад.

Щоб зберегти другий порядок мализни, похідні у в'язких членах \vec{E} , \vec{F} , \vec{G} варто відповідно дискретизувати. Роблять це таким чином. Наявні в \vec{E} похідні за координатою x апроксимують різницями протилежного напрямку щодо тих, які використовуються при апроксимації похідної $\partial\vec{E}/\partial x$, тоді як похідні за напрямками y та z апроксимують центральними різницями. Аналогічно похідні за координатою y в \vec{F} та похідні за координатою z в \vec{G} апроксимують різницями протилежного напрямку відповідно до тих, що використовують при апроксимації похідних $\partial\vec{F}/\partial x$ та $\partial\vec{G}/\partial x$. Мішані похідні в \vec{F} та \vec{G} апроксимують центральними різницями.

Наприклад, компонента вектора \vec{F} , що відповідає руху вздовж осі Ox

$$F_2 = \rho uv - \mu \frac{\partial u}{\partial y} - \mu \frac{\partial v}{\partial x} \quad (2.9)$$

на кроці предиктор (2.7) дискретизується як

$$(F_2)_{j,k,l}^n = (\rho uv)_{j,k,l}^n - \mu_{j,k,l}^n \frac{u_{j,k,l}^n - u_{j,k-1,l}^n}{\Delta y} - \mu_{j,k,l}^n \frac{v_{j+1,k,l}^n - v_{j-1,k-1,l}^n}{2\Delta x}, \quad (2.10)$$

а на кроці коректор (2.8) – у вигляді

$$(F_2)_{j,k-1,l}^{\overline{n+1}} = (\rho uv)_{j,k-1,l}^{\overline{n+1}} - \mu_{j,k-1,l}^{\overline{n+1}} \frac{u_{j,k,l}^{\overline{n+1}} - u_{j,k-1,l}^{\overline{n+1}}}{\Delta y} - \mu_{j,k-1,l}^{\overline{n+1}} \frac{v_{j+1,k-1,l}^{\overline{n+1}} - u_{j-1,k-1,l}^{\overline{n+1}}}{2\Delta x}. \quad (2.11)$$

Через велику складність рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини неможливо одержати аналітичний вираз критерію стійкості для схеми Мак-Кормака. Можна проте скористатися емпіричною формулою Таннехілла [38]

$$\Delta t \leq \sigma (\Delta t)_{\text{КФЛ}} / (1 + 2/\text{Re}_\Delta), \quad (2.12)$$

де σ – коефіцієнт запасу ($\approx 0,9$); $(\Delta t)_{\text{CFL}}$ визначають за критерієм Куранта – Фрідрікса – Леві (CFL) для невязкої рідини [7]:

$$(\Delta t)_{\text{CFL}} \leq \left(\frac{|u|}{\Delta x} + \frac{|v|}{\Delta y} + \frac{|w|}{\Delta z} + a \cdot \sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}} \right)^{-1}; \quad (2.13)$$

Re_Δ – мінімальне сіткове число Рейнольдса:

$$\text{Re}_\Delta = \min(\text{Re}_{\Delta x}, \text{Re}_{\Delta y}, \text{Re}_{\Delta z}), \quad (2.14)$$

$$\text{де } \text{Re}_{\Delta x} = \frac{\rho |u| \Delta x}{\mu}, \text{Re}_{\Delta y} = \frac{\rho |v| \Delta y}{\mu}, \text{Re}_{\Delta z} = \frac{\rho |w| \Delta z}{\mu}; \quad (2.15)$$

a – місцева швидкість звуку: $a = \sqrt{\gamma p / \rho}$.

Перед черговим кроком за часом для всіх точок сітки з рівняння (2.12) можна одержати Δt . Потім найменше з Δt використовується для одержання розв'язку на наступному шарі за часом. Якщо нас цікавить лише сталий розв'язок, то для того, щоб прискорити збіжність, Лі [61] запропонував у всіх точках сітки використовувати максимальне Δt , із тих, що розраховують

за (2.12). Для прискорення збіжності також можна скористатися процедурою послідовної верхньої релаксації вздовж координатних ліній.

Після кожного кроку предиктор (або коректор) можна знайти примітивні змінні ρ, u, v, w, e, p, T , "декодуючи" вектор \vec{U}

$$\vec{U} = [U_1, U_2, U_3, U_4, U_5]^T \equiv [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, E_t]^T \quad (2.16)$$

у такий спосіб:

$$\begin{aligned} \rho &= U_1, \quad u = U_2/U_1, \quad v = U_3/U_1, \quad w = U_4/U_1, \\ e &= U_5/U_1 - (u^2 + v^2 + w^2)/2, \quad p = p(\rho, e), \quad T = T(\rho, e). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Далі Мак-Кормак модифікував свою схему [8], увівши до неї розщеплення за часом. Застосування модифікованого методу до в'язкого рівняння Бюргерса розщеплює початкову схему Мак-Кормака на послідовність одновимірних операцій [6]. У результаті умова стійкості для кожної одновимірної схеми менш обмежена, ніж загалом для тривимірної схеми. Таким чином, можна просуватися вздовж кожного напрямку з максимально можливим кроком за часом. Це особливо корисно, коли через велику різницю між кроками сітки за різними координатними напрямками $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ допустимі кроки за часом $(\Delta t_x, \Delta t_y, \Delta t_z)$ дуже відрізняються. Перед застосуванням модифікованого алгоритму до рівняння (2.1), попередньо визначимо одновимірні різниці оператори $L_x(\Delta t_x)$, $L_y(\Delta t_y)$ та $L_z(\Delta t_z)$. Отже, застосування оператора $L_x(\Delta t_x)$ до $U_{i,j,k}^*$ дає

$$U_{j,k,l}^{**} = L_x(\Delta t_x) U_{j,k,l}^*, \quad (2.18)$$

що еквівалентно двокроковій формулі

$$\begin{aligned} U_{j,k,l}^{\bar{\bar{}}} &= U_{j,k,l}^* - \frac{\Delta t_x}{\Delta x} (E_{j+1,k,l}^* - E_{j,k,l}^*), \\ U_{j,k,l}^{**} &= \frac{1}{2} \left[U_{j,k,l}^* + U_{j,k,l}^{\bar{\bar{}}} - \frac{\Delta t_x}{\Delta x} (E_{j,k,l}^{\bar{\bar{}}} - E_{j-1,k,l}^{\bar{\bar{}}}) \right]. \end{aligned} \quad (2.19)$$

У цих виразах використано тимчасові фіктивні верхні індекси $*$ та $**$. Оператори $L_y(\Delta t_y)$ та $L_z(\Delta t_z)$ визначають аналогічно:

$$U_{j,k,l}^{**} = L_y(\Delta t_y) U_{j,k,l}^* \quad (2.20)$$

еквівалентний

$$U_{j,k,l}^{\bar{**}} = U_{j,k,l}^* - \frac{\Delta t_y}{\Delta y} (F_{j,k+1,l}^* - F_{j,k,l}^*),$$

$$U_{j,k,l}^{**} = \frac{1}{2} \left[U_{j,k,l}^* + U_{j,k,l}^{\bar{**}} - \frac{\Delta t_y}{\Delta y} (F_{j,k,l}^{\bar{**}} - F_{j,k-1,l}^{\bar{**}}) \right]; \quad (2.21)$$

а $U_{j,k,l}^{**} = L_z(\Delta t_z)U_{j,k,l}^* \quad (2.22)$

еквівалентний

$$U_{j,k,l}^{\bar{**}} = U_{j,k,l}^* - \frac{\Delta t_z}{\Delta z} (G_{j,k,l+1}^* - G_{j,k,l}^*),$$

$$U_{j,k,l}^{**} = \frac{1}{2} \left[U_{j,k,l}^* + U_{j,k,l}^{\bar{**}} - \frac{\Delta t_z}{\Delta z} (G_{j,k,l}^{\bar{**}} - G_{j,k,l-1}^{\bar{**}}) \right]. \quad (2.23)$$

Критерій узгодженості схеми

Схема (2.18)–(2.23)

- узгоджена, якщо для кожного оператора L_i суми кроків за часом рівні;
- має другий порядок мализни для симетричної послідовності операторів.

Для рівняння (2.1) послідовність операторів, що задовольняє критерій узгодженості, може, наприклад, мати вигляд

$$U_{j,k,l}^{n+2} = L_x(\Delta t_x)L_y(\Delta t_y)L_z(\Delta t_z)L_z(\Delta t_z)L_y(\Delta t_y)L_x(\Delta t_x)U_{j,k,l}^n. \quad (2.24)$$

У випадку, коли $\Delta y \ll \min(\Delta y, \Delta z)$, користуються іншою послідовністю операторів, що задовольняє наведений вище критерій:

$$U_{j,k,l}^{n+2} = L_x(\Delta t_x) \left[L_y \left(\frac{\Delta t_y}{m} \right) \right]^m L_z(\Delta t_z) \otimes$$

$$\otimes L_z(\Delta t_z) \left[L_y \left(\frac{\Delta t_y}{m} \right) \right]^m L_x(\Delta t_x) U_{j,k,l}^n, \quad (2.25)$$

де m – ціле.

Алгоритм, отриманий при застосуванні послідовностей операторів (2.24) або (2.25), є стійким, якщо розмір кроку за часом в аргументі кожного з операторів не перевищує дозволене для цього оператора максимальне значення. Оскільки неможливо проаналізувати стійкість кожного з операторів стосовно повних рівнянь Нав'є – Стокса, використовують одновимірні емпіричні критерії стійкості:

$$\Delta t_x \leq \frac{\sigma \Delta x}{(|u|+a)(1+2/\mathbf{Re}_{\Delta x})}, \quad \Delta t_y \leq \frac{\sigma \Delta y}{(|v|+a)(1+2/\mathbf{Re}_{\Delta y})},$$

$$\Delta t_z \leq \frac{\sigma \Delta z}{(|w|+a)(1+2/\mathbf{Re}_{\Delta z})}, \quad (2.26)$$

де σ – коефіцієнт запасу; a – місцева швидкість звуку.

Числові розрахунки рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини іноді "розвалюються" через осциляції, які є наслідком неадекватного здрібнювання сітки в областях великих градієнтів. У багатьох випадках здрібнювання сітки в цих областях позбавлене практичного змісту, особливо, якщо вони значно віддалені від основної області. Для таких ситуацій Мак-Кормаком [8] розробив згладжувальну схему четвертого порядку мализни, яка є альтернативою згладжувальній схемі четвертого порядку, що задана виразом [7]:

$$-\varepsilon_e \left[(\Delta y)^4 \frac{\partial^4}{\partial y^4} (U^i) + (\Delta z)^4 \frac{\partial^4}{\partial z^4} (U^i) \right].$$

При згладжуванні за Мак-Кормаком до оператора $L_x(\Delta t_x)$ додаються дисипативні члени:

$$U_{j,k,l}^{**} = U_{j,k,l}^* - \frac{\Delta t_x}{\Delta x} \left(E_{j+1,k,l}^* + S_{j+1,k,l}^* - E_{j,k,l}^* - S_{j,k,l}^* \right), \quad (2.27a)$$

$$U_{j,k,l}^{**} = \frac{1}{2} \left[U_{j,k,l}^* + U_{j,k,l}^{**} - \frac{\Delta t_x}{\Delta x} \left(E_{j,k,l}^{**} + S_{j,k,l}^{**} - E_{j-1,k,l}^{**} - S_{j-1,k,l}^{**} \right) \right], \quad (2.27b)$$

$$S_{j,k,l}^* = \varepsilon_e \left[\left(|u_{j,k,l}^*| + a_{j,k,l}^* \right) \frac{|\bar{\delta}_x^2 p_{j,k,l}^*|}{p_{j+1,k,l}^* + 2p_{j,k,l}^* + p_{j-1,k,l}^*} \times \right. \\ \left. \times \left(U_{j,k,l}^* - U_{j-1,k,l}^* \right) \right], \quad (2.28a)$$

$$S_{j,k,l}^{\bar{**}} = \varepsilon_e \left[\left(|u_{j,k,l}^{\bar{**}}| + a_{j,k,l}^{\bar{**}} \right) \frac{|\bar{\delta}_x^2 p_{j,k,l}^{\bar{**}}|}{p_{j+1,k,l}^{\bar{**}} + 2p_{j,k,l}^{\bar{**}} + p_{j-1,k,l}^{\bar{**}}} \times \right. \\ \left. \times \left(U_{j+1,k,l}^{\bar{**}} - U_{j,k,l}^{\bar{**}} \right) \right]. \quad (2.28б)$$

Тут для стійкості необхідно, щоб $0 \leq \varepsilon_e \leq 0.5$. Таким чином, до рівняння Нав'є – Стокса додається член зі штучною в'язкістю у вигляді

$$\varepsilon_e (\Delta x)^4 \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{|u| + a}{4p} \left| \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right| \frac{\partial U}{\partial x} \right]. \quad (2.29)$$

Величина цього згладжувального члена дуже мала всюди, за винятком областей різких осциляцій тиску, де апроксимація без згладжування призводить до помилкових результатів.

Явна схема Мак-Кормака використовується для розрахунку як стаціонарних, так і нестационарних течій у діапазоні від малих до помірних чисел Рейнольдса. Проте її застосування не дає задовільних результатів у випадку течій із великими числами Рейнольдса, коли області з переважним впливом в'язкості стають дуже тонкими. Щоб розв'язати в'язку область належним чином, для таких течій сітка повинна дуже подрібнюватися. А це, у свою чергу, веде до малих кроків за часом і, отже, до великого часу обчислень.

Розглянемо як приклад двовимірну течію на плоскій пластині при великих числах Рейнольдса. Тут для прилежового шару поблизу поверхні пластини потрібна дуже дрібна сітка, а в нев'язкій частині поля течії можна скористатися і грубшою сіткою (рис. 2.1). На грубій сітці застосуємо наступну послідовність операторів:

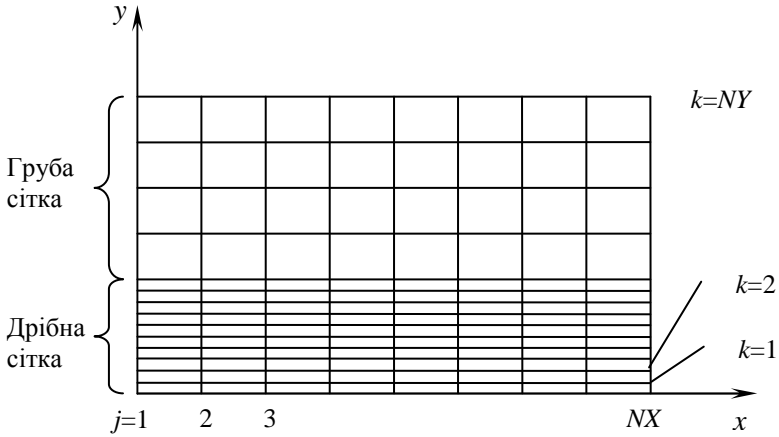


Рис. 2.1. Сітка для примежового шару та зовнішньої течії

$$U_{j,k}^{n+1} = L_x \left(\frac{\Delta t}{2} \right) L_y (\Delta t) L_x \left(\frac{\Delta t}{2} \right) U_{j,k}^n, \quad (2.30)$$

де $\Delta t \leq \min(2 \Delta t_x, \Delta t_y)_{п.ш.}$ (2.31)

На дрібній сітці рекомендуємо використати такий алгоритм:

$$U_{j,k}^{n+1} = \left[L_y \left(\frac{\Delta t}{2m} \right) L_x \left(\frac{\Delta t}{m} \right) L_y \left(\frac{\Delta t}{2m} \right) \right]^m U_{j,k}^n, \quad (2.32)$$

де m – найменше ціле, що задовольняє умову

$$\frac{\Delta t}{m} \leq \min(\Delta t_x, 2\Delta t_y)_{п.ш.} \quad (2.33)$$

При великих числах Рейнольдса область дрібної сітки стає дуже тонкою, що потребує, у свою чергу, щоб крок Δy був дуже малим. А це приводить до дуже малого кроку Δt_y в операторі L_y і до дуже великих m . Отже, істотна частина машинного часу витрачається на розрахунок в області здрібненої сітки. Для подолання цього Мак-Кормак [8] розробив гібридну версію своєї схеми – схему Мак-Кормака швидкого обчислення. Ця гібридна схема є частково явною, а частково неявною. Для течії на плоскій пластині, про яку йшлося вище, схему швидкого

обчислення можна реалізувати, якщо замінити оператор $L_y(\Delta t / 2m)$ в (2.32) добутком операторів

$$L_{yH} \left(\frac{\Delta t}{2m} \right) L_{yP} \left(\frac{\Delta t}{2m} \right).$$

Тут оператор L_{yH} діє лише на нев'язку (гіперболічну) частину рівнянь Нав'є – Стокса, тобто на

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \bar{F}_H}{\partial y} = 0, \quad (2.34)$$

де \bar{F}_H має вигляд

$$\bar{F}_H = \left[\rho u, \rho uv, \rho v^2 + p, (E_t + p)v \right]^T. \quad (2.35)$$

А оператор L_{yP} діє на в'язку (параболічну) частину рівнянь Нав'є – Стокса

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \bar{F}_P}{\partial y} = 0, \quad (2.36)$$

де $\bar{F}_P = \bar{F} - \bar{F}_H$. Рівняння (2.34) з оператором L_{yH} розв'язують або методом характеристик, або за допомогою початкової версії схеми Мак-Кормака (2.7)–(2.8). Рівняння (2.36) з оператором L_{yP} розв'язують із використанням неявної схеми, наприклад схеми Кранка – Нікольсона або схеми Лаасонена [1]. Таким чином, рівняння (2.34) і (2.36) можна розв'язувати незалежно із кроком за часом, що не обмежений в'язким критерієм стійкості.

Зауваження:

- Крім схеми Мак-Кормака для розв'язання рівнянь Нав'є – Стокса у випадку стисливої рідини можна використовувати й інші явні схеми, у тому числі схеми "класики", "чехарда" – Дюфорта – Франкела, Брайловської, Алена – Чена, Лакса – Вендроффа та ін. Ці схеми вже розглядалися за їх застосування для розв'язання або рівняння теплопровідності, або в'язкого рівняння Бюргерса [6]. При використанні цих схем до рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини, які мають складніший вигляд порівняно з рівнянням теплопровідності або в'язким рівнянням Бюргерса,

виникають деякі додаткові труднощі. Наприклад, є певна складність при апроксимації членів із мішаними похідними для схеми "класики". Проте цього можна уникнути, якщо брати члени з мішаними похідними з попереднього шару за часом.

- Усі названі вище схеми, за винятком схеми Лакса – Вендроффа, мають перший порядок апроксимації за часом, тому їх не рекомендують використовувати для точних розрахунків нестационарних течій. Крім того, усі згадані схеми мають обмеження на максимальний розмір кроку за часом, що впливає з умов їх стійкості. Проте умови стійкості для схем "класики" і Алена – Чена не залежать від в'язкості, що виділяє їх як краці серед інших схем. Для схеми "класики" у випадку двовимірної задачі (при $\Delta x = \Delta y$) допустимий розмір кроку за часом, обумовлений умовою Куранта – Фрідрікса – Леві, запишеться у вигляді

$$(\Delta t)_{\text{CFL}} \leq \Delta x / [|u| + |v| + 2\sqrt{a}]. \quad (2.37)$$

2.1.2. Неявна схема Біма – Уормінга

Різницева схема Біма – Уормінга [3] призначена для розв'язання рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини і належить до неявних схем змінних напрямків. Обмежимося двовимірним випадком, але застосуємо схему Біма – Уормінга до записаних у загальній формі рівнянь:

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{E}(\bar{U})}{\partial x} + \frac{\partial \bar{F}(\bar{U})}{\partial y} = \frac{\partial \bar{V}_1(\bar{U}, \bar{U}_x)}{\partial x} + \frac{\partial \bar{V}_2(\bar{U}, \bar{U}_y)}{\partial x} + \frac{\partial \bar{W}_1(\bar{U}, \bar{U}_x)}{\partial y} + \frac{\partial \bar{W}_2(\bar{U}, \bar{U}_y)}{\partial y}, \quad (2.38)$$

$$\text{де } \bar{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E_t \end{bmatrix}, \quad \bar{E}(\bar{U}) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E_t + p)u \end{bmatrix}, \quad \bar{F}(\bar{U}) = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E_t + p)v \end{bmatrix}, \quad (2.39a)$$

$$\vec{V}_1 + \vec{V}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{2}{3}\mu(u_x - v_y) \\ \mu(u_y + v_x) \\ \mu\nu(u_y + v_x) + \frac{2}{3}\mu u(2u_x - v_y) + kT_x \end{bmatrix}, \quad (2.39б)$$

$$\vec{W}_1 + \vec{W}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ \mu(u_y + v_x) \\ \frac{2}{3}\mu(2v_y - u_x) \\ \mu u(u_y + v_x) + \frac{2}{3}\mu\nu(2v_y - u_x) + kT_y \end{bmatrix}. \quad (2.39в)$$

Перепишемо (2.38) у вигляді

$$\partial\vec{U}/\partial t = \text{RHS}, \quad (2.40)$$

де в RHS входять усі просторові похідні

$$\begin{aligned} \text{RHS} = & -\frac{\partial}{\partial x} \left[\vec{E} - \vec{V}_1(\vec{U}, \vec{U}_x) - \vec{V}_2(\vec{U}, \vec{U}_x) \right] - \\ & -\frac{\partial}{\partial y} \left[\vec{F} - \vec{W}_1(\vec{U}, \vec{U}_x) - \vec{W}_2(\vec{U}, \vec{U}_x) \right]. \end{aligned} \quad (2.41)$$

У (2.41) нев'язкі потоки \vec{E} та \vec{F} збігаються з відповідними потоками для системи рівнянь Ейлера [7].

При використанні узагальненої тришарової схеми до рівняння (2.40) маємо

$$\begin{aligned} \Delta^n \vec{U} = & \frac{\theta_1 \Delta t}{1 + \theta_2} \text{RHS}^{n+1} + \frac{(1 - \theta_1) \Delta t}{1 + \theta_2} \text{RHS}^n + \frac{\theta_2}{1 + \theta_2} \Delta^{n-1} \vec{U} + \\ & + O \left[\left(\theta_1 - \frac{1}{2} - \theta_2 \right) (\Delta t)^2 + (\Delta t)^3 \right], \end{aligned} \quad (2.42)$$

де $\Delta^n \vec{U} = \vec{U}^{n+1} - \vec{U}^n$. Ця загальна різницева схема при відповідному виборі параметрів θ_1 та θ_2 замінює ряд звичайних різницевих схем. У випадку рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини звичайно використовують або неявну схему

Ейлера ($\theta_1 = 1, \theta_2 = 0$) із першим порядком апроксимації за часом, або триточкову неявну схему з різницями назад ($\theta_1 = 1, \theta_2 = 1/2$) і з другим порядком апроксимації за часом.

Підставляючи (2.39) і (2.41) у рівняння (2.42), маємо

$$\begin{aligned} \Delta^n \bar{U} &= \frac{\theta_1 \Delta t}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(-\bar{E}^{n+1} + \bar{V}_1^{n+1} + \bar{V}_2^{n+1} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial y} \left(-\bar{F}^{n+1} + \bar{W}_1^{n+1} + \bar{W}_2^{n+1} \right) \right] + \\ &\quad + \frac{(1 - \theta_1) \Delta t}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(-\bar{E}^n + \bar{V}_1^n + \bar{V}_2^n \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial y} \left(-\bar{F}^n + \bar{W}_1^n + \bar{W}_2^n \right) \right] + \frac{\theta_2}{1 + \theta_2} \Delta^{n-1} \bar{U}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Після простих перетворень отримуємо так названу дельта-форму рівняння (2.40), яка вже зустрічалася в попередніх частинах лекційного курсу [6, 7]:

$$\begin{aligned} \Delta^n \bar{U} &= \frac{\theta_1 \Delta t}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(-\Delta^n \bar{E} + \Delta^n \bar{V}_1 + \Delta^n \bar{V}_2 \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial y} \left(-\Delta^n \bar{F} + \Delta^n \bar{W}_1 + \Delta^n \bar{W}_2 \right) \right] + \\ &\quad + \frac{\Delta t}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(-\bar{E}^n + \bar{V}_1^n + \bar{V}_2^n \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial y} \left(-\bar{F}^n + \bar{W}_1^n + \bar{W}_2^n \right) \right] + \frac{\theta_2}{1 + \theta_2} \Delta^{n-1} \bar{U}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Дельта-члени в (2.44) лінеаризують розвиненням у ряд Тейлора. Наприклад, $\Delta^n \bar{E}$ лінеаризують таким чином. Спочатку за формулою Тейлора маємо

$$\bar{E}^{n+1} = \bar{E}^n + \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial \bar{U}} \right)^n \left(\bar{U}^{n+1} - \bar{U}^n \right) + O \left[(\Delta t)^2 \right]. \quad (2.45)$$

Останній вираз можна переписати як

$$\Delta^n \vec{E} = \underline{A}^n \Delta^n \vec{U} + O\left[(\Delta t)^2\right], \quad (2.46)$$

де \underline{A}^n – матриця Якобі $\{\partial \vec{E}/\partial \vec{U}\}$:

$$\underline{A} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ \frac{3-\gamma}{2}u^2 + \frac{1-\gamma}{2}v^2 & (\gamma-3)u & (\gamma-1)v & (1-\gamma) \\ uv & -v & -u & 0 \\ \left[\frac{\gamma E_t u}{\rho} + (1-\gamma)u \times \right. & \left. \left[-\frac{\gamma E_t}{\rho} + \frac{\gamma-1}{2} \times \right. \right. & (\gamma-1)uv & -\gamma u \\ \left. \times (u^2 + v^2) \right] & \left. \times (3u^2 + v^2) \right] & & \end{bmatrix}. \quad (2.47)$$

Тут γ – відношення питомих теплоємностей. Аналогічним чином можна лінеаризувати й $\Delta^n \vec{F}$:

$$\Delta^n \vec{F} = \underline{B}^n \Delta^n \vec{U} + O\left[(\Delta t)^2\right], \quad (2.48)$$

де \underline{B}^n – матриця Якобі $\{\partial \vec{F}/\partial \vec{U}\}$.

В'язкий дельта-член $\Delta^n \vec{V}(\vec{U}, \vec{U}_x)$ лінеаризують так:

$$\begin{aligned} \Delta^n \vec{V}_1 &= \left(\frac{\partial \vec{V}_1}{\partial \vec{U}} \right)^n \Delta^n \vec{U} + \left(\frac{\partial \vec{V}_1}{\partial \vec{U}_x} \right)^n \Delta^n \vec{U}_x + O\left[(\Delta t)^2\right] = \\ &= \underline{P}^n \Delta^n \vec{U} + \underline{R}^n \Delta^n \vec{U}_x + O\left[(\Delta t)^2\right] = \\ &= (\underline{P} - \underline{R}_x)^n \Delta^n \vec{U} + \frac{\partial}{\partial x} (\underline{R}^n \Delta^n \vec{U}) + O\left[(\Delta t)^2\right], \end{aligned} \quad (2.49)$$

де \underline{P}^n – матриця Якобі $\{\partial \vec{V}_1/\partial \vec{U}\}$, \underline{R}^n – матриця Якобі $\{\partial \vec{V}_1/\partial \vec{U}_x\}$ та \underline{R}_x^n – матриця Якобі $\{\partial \underline{R}/\partial x\}$.

$$\underline{P} - \underline{R}_x = -\frac{1}{\rho} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{4}{3}u\mu_x & \frac{4}{3}\mu_x & 0 & 0 \\ -v\mu_x & 0 & \mu_x & 0 \\ -\frac{4}{3}u^2\mu_x - v^2\mu_x & \frac{4}{3}u\mu_x & v\mu_x & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.50)$$

Матриця Якобі $\underline{P} - \underline{R}_x$ записана у припущенні, що μ та k локально не залежать від \bar{U} . Аналогічно $\Delta^n \bar{W}_2(\bar{U}, \bar{U}_y)$ лінеаризується у вигляді

$$\Delta^n \bar{W}_2 = (\underline{Q} - \underline{S}_y)^n \Delta^n \bar{U} + \frac{\partial}{\partial y} (\underline{S}^n \Delta^n \bar{U}) + O[(\Delta t)^2]. \quad (2.51)$$

Члени з мішаними похідними обчислюються на явному шарі без утрати мализни, якщо враховувати, що при сталому кроці Δt $\Delta^n \bar{V}_2 = \Delta^{n-1} \bar{V}_2 + O[(\Delta t)^2]$, $\Delta^n \bar{W}_1 = \Delta^{n-1} \bar{W}_1 + O[(\Delta t)^2]$. (2.52)

Обчислення членів із мішаними похідними приводить до блокової тридіагональної форми рівнянь. Тому замість лінеаризації, що задана рівняннями (2.46) та (2.48) можна застосовувати варіант лінеаризації за Стегером [73, 74]¹.

Підставляючи (2.51)–(2.52) у рівняння (2.44), маємо

$$\begin{aligned} & \left\{ \underline{I} + \frac{\theta_1 \Delta t}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\underline{A} - \underline{P} + \underline{R}_x)^n - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \{ \underline{R}_x^n \} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\partial}{\partial y} (\underline{B} - \underline{Q} + \underline{S}_y)^n - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{ \underline{S}^n \} \right] \right\} \Delta^n \bar{U} = \\ & = \frac{\Delta t}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial x} (-\bar{E} + \bar{V}_1 + \bar{V}_2)^n + \frac{\partial}{\partial y} (-\bar{F} + \bar{W}_1 + \bar{W}_2)^n \right] + \end{aligned} \quad (2.53)$$

¹ Використання методу Стегера особливо корисне у випадку, коли при розв'язанні рівнянь Нав'є – Стокса виконується перетворення координат.

$$+ \frac{\theta_1 \Delta t}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\Delta^{n-1} \vec{V}_2) + \frac{\partial}{\partial y} (\Delta^{n-1} \vec{W}_1) \right] + \frac{\theta_2}{1 + \theta_2} \Delta^{n-1} \vec{U},$$

де \underline{I} – одинична матриця. Ліва частина рівняння (2.53) факторизується так:

$$\left\{ \underline{I} + \frac{\theta_1 \Delta t}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\underline{A} - \underline{P} + \underline{R}_x)^n - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \{ \underline{R}^n \} \right] \right\} \times \\ \times \left\{ \underline{I} + \frac{\theta_1 \Delta t}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial y} (\underline{B} - \underline{Q} + \underline{S}_y)^n - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{ \underline{S}^n \} \right] \right\} \Delta^n \vec{U}. \quad (2.54)$$

Частинні похідні за цим алгоритмом обчислюються із другим порядком мализни та з використанням центральних різниць.

Схема Біма – Уормінга реалізується за три кроки:

Крок 1

$$\left\{ \underline{I} + \frac{\theta_1 \Delta t}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\underline{A} - \underline{P} + \underline{R}_x)^n - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \{ \underline{R}^n \} \right] \right\} \Delta^n \vec{U}_1 = \\ = \text{Права частина рівняння (2.53)}. \quad (2.55)$$

Крок 2

$$\left\{ \underline{I} + \frac{\theta_1 \Delta t}{1 + \theta_2} \left[\frac{\partial}{\partial y} (\underline{B} - \underline{Q} + \underline{S}_y)^n - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{ \underline{S}^n \} \right] \right\} \Delta^n \vec{U} = \Delta^n \vec{U}_1. \quad (2.56)$$

Крок 3

$$\vec{U}^{n+1} = \vec{U}^n + \Delta^n \vec{U}. \quad (2.57)$$

На кроці 1 $\Delta^n \vec{U}_1$ – це другий рядок виразу (2.54). Системи рівнянь (2.55) та (2.56) мають блокову тридіагональну структуру, подібну структурі рівняння (1.52) із першого розділу, із тією лише різницею, що у випадку двовимірних рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини блоки матриці мають розмір 4×4 .

Зауваження:

- Бім та Уормінг [3] досліджували стійкість своєї схеми: для двовимірного хвильового рівняння $u_t + c_1 u_x + c_2 u_y = 0$, для рівняння дифузії $u_t = a u_{xx} + b u_{xy} + c u_{yy}$.

При цьому виявилося, що для хвильового рівняння схема безумовно стійка, коли $\theta_2 > 0$, а для рівняння дифузії схема безумовно стійка, коли $\theta_2 \geq 0,385$.

- Ні схема "чехарда" ($\theta_1 = 0$, $\theta_2 = -1/2$), ні неявна схема із центрованими різницями за часом ($\theta_1 = -1/2$, $\theta_2 = 0$) не є безумовно стійкими для рівняння дифузії.
- Тривочкова схема з різницями назад ($\theta_1 = 1$, $\theta_2 = 1/2$) також безумовно стійка, і саме її рекомендують використовувати при нестационарних розрахунках, коли необхідний другий порядок мализни за часом.
- Із метою успішної реалізації обчислення із приблизно заданими початковими даними для того, щоб зменшити високочастотні осциляції, які виникають, необхідно у схему Біма – Уормінга ввести демпфування. Це можна здійснити додаванням у праву частину рівняння (2.53) на явному шарі дисипативного члена четвертого порядку мализни у вигляді

$$-\varepsilon_e \left[(\Delta y)^4 \frac{\partial^4}{\partial y^4} (\bar{U}^i) + (\Delta z)^4 \frac{\partial^4}{\partial z^4} (\bar{U}^i) \right]. \quad (2.58)$$

- Якщо інтерес викликає лише сталий розв'язок, то в ліву частину рівняння (2.53) на неявному шарі можна ще додати згладжувальний член другого порядку. Порядок останнього члена тому тут може бути другим, бо він не впливає на сталий розв'язок, якщо $\Delta^n \bar{U} = 0$.

Після додавання згладжувальних членів різницева схема має такий остаточний вигляд:

Крок 1

$$\left\{ \underline{I} + \frac{\theta_1 \Delta t}{1 + \theta_2} \left[\bar{\delta}_x (\underline{A} - \underline{P} + \underline{R}_x)^n - \bar{\delta}_x^2 \{ \underline{R}^n \} - \varepsilon_i \bar{\delta}_x^2 \right] \Delta^n \bar{U}_1 = \right. \\ \left. = \text{Права частина рівняння (2.53)} - \varepsilon_e \left(\bar{\delta}_x^4 + \bar{\delta}_y^4 \right) \bar{U}^n. \quad (2.59)$$

Крок 2

$$\left\{ \underline{I} + \frac{\theta_1 \Delta t}{1 + \theta_2} \left[\bar{\delta}_y (\underline{B} - \underline{Q} + \underline{S}_y)^n - \bar{\delta}_y^2 \{ \underline{S}^n \} - \varepsilon_i \bar{\delta}_y^2 \right] \Delta^n \bar{U} = \Delta^n \bar{U}_1. \quad (2.60)$$

Крок 3

$$\bar{U}^{n+1} = \bar{U}^n + \Delta^n \bar{U}. \quad (2.61)$$

Тут $\bar{\delta}$, $\bar{\delta}^2$ і $\bar{\delta}^4$ – звичайні оператори з центральними різницями, а ε_e і ε_i – коефіцієнти при згладжувальних членах на явному та неявному шарах відповідно.

Зауваження:

- З аналізу стійкості за Фур'є випливає, що для стійкості схеми коефіцієнт при згладжувальному члені на явному шарі повинен належати діапазону $0 \leq \varepsilon_e \leq (1 + 2\theta_2) / [8(1 + \theta_2)]$.
- Швидкість збіжності схеми Біма – Уормінга (із дискретизацією за Ейлером на неявному шарі) для рівнянь Ейлера оптимальна, якщо $\varepsilon_i / \varepsilon_e = 2$.
- Бім та Уормінг [3] показали також, що їхню схему можна значно спростити, якщо μ та k вважати константами, тобто у випадку ламінарної течії.
- У випадку сталого розв'язку за умови, що залишається згладжування на неявному шарі ($\varepsilon_i > 0$), Таннехілл та інші вчені [1] пропонують в'язкі члени в лівій частині схеми (тобто \underline{P} , \underline{R} , \underline{R}_x , \underline{Q} , \underline{S} , \underline{S}_y) покласти рівними нулю. При цьому автори користуються тією обставиною, що при встановленні розв'язку, ліва частина рівняння (2.53) прямує до нуля. Це зауваження істотно спрощує схему Біма – Уормінга, особливо при користуванні системою координат, що відмінна від декартової. Вважається, що таку спрощену схему можна застосовувати і для обчислень у діапазоні чисел Рейнольдса від помірних до дуже великих, бо швидкість збіжності при цьому не змінюється.

2.1.3. Неявна схема Мак-Кормака

Мак-Кормака [8] запропонував також неявний аналог своєї схеми, який складається із двох кроків. На першому кроці

використовується початковий варіант схеми Мак-Кормака (2.7)–(2.8), а на другому – неявна схема, що усуває будь-які обмеження, пов'язані зі стійкістю. У результаті дискретизації при цьому утворюються або верхні, або нижні блокові дво-діагональні системи рівнянь, які розв'язувати значно простіше, ніж звичайні блокові тридіагональні системи.

Розглянемо використання неявної схеми Мак-Кормака для розв'язання двовимірних рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини:

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial y} = 0. \quad (2.62)$$

Маємо такий алгоритм:

предиктор

$$\left(\Delta U_{j,k}^n \right)_{\text{expl}} = -\Delta t \left(\frac{\Delta_x E_{j,k}^n}{\Delta x} + \frac{\Delta_y F_{j,k}^n}{\Delta y} \right)^1, \quad (2.63a)$$

$$\left(\underline{I} - \frac{\Delta t \Delta_x \underline{A}'}{\Delta x} \right) \left(\underline{I} - \frac{\Delta t \Delta_y \underline{B}'}{\Delta y} \right) \Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}} = \left(\Delta U_{j,k}^n \right)_{\text{expl}}, \quad (2.63b)$$

$$U_{j,k}^{\overline{n+1}} = U_{j,k}^n + \Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}}; \quad (2.63b)$$

коректор

$$\left(\Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}} \right)_{\text{expl}} = -\Delta t \left(\frac{\nabla_x E_{j,k}^{\overline{n+1}}}{\Delta x} + \frac{\nabla_y F_{j,k}^{\overline{n+1}}}{\Delta y} \right), \quad (2.64a)$$

$$\left(\underline{I} - \frac{\Delta t \Delta_x \underline{A}'}{\Delta x} \right) \left(\underline{I} - \frac{\Delta t \Delta_y \underline{B}'}{\Delta y} \right) \Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}} = \left(\Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}} \right)_{\text{expl}}, \quad (2.64b)$$

$$U_{j,k}^{\overline{n+1}} = \frac{1}{2} \left(U_{j,k}^n + U_{j,k}^{\overline{n+1}} + \Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}} \right). \quad (2.64b)$$

У цих рівняннях різницеві оператори Δ_x та Δ_y , ∇_x та ∇_y – це звичайні різниці вперед і назад за простором, а Δ – різницевий

¹ Індекс *expl* показує, що ця величина обчислюється за явною схемою Мак-Кормака.

оператор уперед за часом Δt . Тоді вираз типу $(\underline{I} - \Delta t \Delta_y \underline{B}' / \Delta y) \Delta U_{j,k}^{n+1}$ тотожний $\Delta U_{j,k}^{n+1} - \Delta t \Delta_y (\underline{B}' \Delta U_{j,k}^{n+1}) / \Delta y$.

В'язкі члени в \bar{E} та \bar{F} дискретизують аналогічно явній схемі Мак-Кормака. Матриці \underline{A}' та \underline{B}' мають додатні власні значення і пов'язані з матрицями $\underline{A} = \{\partial \bar{E} / \partial \bar{U}\}$ та $\underline{B} = \{\partial \bar{F} / \partial \bar{U}\}$, що буде показано далі.

Якщо не враховувати в'язкі члени, для ідеального газу матриці Якобі \underline{A} і \underline{B} можна діагоналізувати:

$$\underline{A} = \underline{S}_x^{-1} \underline{\Lambda}_A \underline{S}_x, \quad \underline{B} = \underline{S}_y^{-1} \underline{\Lambda}_B \underline{S}_y, \quad (2.65)$$

де

$$\underline{S}_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1/a^2 \\ 0 & \rho a & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\rho a & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -u/\rho & 1/\rho & 0 & 0 \\ -v/\rho & 0 & 1/\rho & 0 \\ \alpha\beta & -u\beta & -v\beta & \beta \end{bmatrix}, \quad (2.66a)$$

$$\underline{S}_y = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1/a^2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho a & 1 \\ 0 & 0 & -\rho a & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -u/\rho & 1/\rho & 0 & 0 \\ -v/\rho & 0 & 1/\rho & 0 \\ \alpha\beta & -u\beta & -v\beta & \beta \end{bmatrix}, \quad (2.66b)$$

$$\underline{\Lambda}_A = \begin{bmatrix} u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u+a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u-a \end{bmatrix}, \quad \underline{\Lambda}_B = \begin{bmatrix} v & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v+a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v-a \end{bmatrix}. \quad (2.66b)$$

Тут $\alpha = (u^2 + v^2) / 2$, $\beta = \gamma - 1$, $a = \sqrt{\gamma p / \rho}$ – швидкість звуку. Матриці \underline{A}' і \underline{B}' відрізняються від матриць \underline{A} і \underline{B} тим, що їх власні значення всі додатні і в них наближено враховано в'язкі ефекти. Визначаються ці матриці таким чином:

$$\underline{A}' = \underline{S}_x^{-1} \underline{D}_A \underline{S}_x, \quad \underline{B}' = \underline{S}_y^{-1} \underline{D}_B \underline{S}_y, \quad (2.67)$$

$$\underline{D}_A = \begin{bmatrix} d_{A_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_{A_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_{A_3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{A_4} \end{bmatrix}, \quad \underline{D}_B = \begin{bmatrix} d_{B_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_{B_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_{B_3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{B_4} \end{bmatrix}. \quad (2.68)$$

$$d_{A_1} = \max \left[\left(|u| + \frac{2v}{\rho \Delta x} - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \right), 0.0 \right], \quad (2.69a)$$

$$d_{A_2} = \max \left[\left(|u+a| + \frac{2v}{\rho \Delta x} - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \right), 0.0 \right], \quad (2.69б)$$

$$d_{A_3} = \max \left[\left(|u| + \frac{2v}{\rho \Delta x} - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \right), 0.0 \right], \quad (2.69в)$$

$$d_{A_4} = \max \left[\left(|u-a| + \frac{2v}{\rho \Delta x} - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \right), 0.0 \right], \quad (2.69г)$$

$$d_{B_1} = \max \left[\left(|v| + \frac{2v}{\rho \Delta y} - \frac{1}{2} \frac{\Delta y}{\Delta t} \right), 0.0 \right], \quad (2.69д)$$

$$d_{B_2} = \max \left[\left(|v| + \frac{2v}{\rho \Delta y} - \frac{1}{2} \frac{\Delta y}{\Delta t} \right), 0.0 \right], \quad (2.69е)$$

$$d_{B_3} = \max \left[\left(|v+a| + \frac{2v}{\rho \Delta y} - \frac{1}{2} \frac{\Delta y}{\Delta t} \right), 0.0 \right], \quad (2.69е)$$

$$d_{B_4} = \max \left[\left(|v-a| + \frac{2v}{\rho \Delta y} - \frac{1}{2} \frac{\Delta y}{\Delta t} \right), 0.0 \right], \quad (2.69ж)$$

$$v = \max(4/3\mu, k).$$

Якщо в деякій області течії крок Δt задовольняє умови стійкості для явної схеми

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \left[\frac{|u|+a}{\Delta x} + \frac{2v}{\rho(\Delta x)^2} \right]^{-1}, \quad \Delta t \leq \frac{1}{2} \left[\frac{|v|+a}{\Delta y} + \frac{2v}{\rho(\Delta y)^2} \right]^{-1}, \quad (2.70)$$

то всі d_A і d_B , згідно з (2.69), дорівнюють нулю і неявна схема Мак-Кормака зводиться до свого явного аналога. У

протилежному випадку для забезпечення стійкості не обійтися без неявної частини схеми Мак-Кормака, де результуючі різниці рівняння зводяться до верхньої або нижньої блокової дводіагональної системи, що легко розв'язується. Наприклад, рівняння (2.63б) можна переписати у вигляді

$$\left(\underline{I} + \frac{\Delta t}{\Delta x} [\underline{A}]_{j,k}^n \right) \Delta U_{j,k}^* = \left(\Delta U_{j,k}^n \right)_{\text{expl}} + \frac{\Delta t}{\Delta x} [\underline{A}]_{j+1,k}^n \Delta U_{j+1,k}^*, \quad (2.71)$$

де

$$\Delta U_{j,k}^* = \left(\underline{I} - \frac{\Delta t \Delta y \underline{B}'}{\Delta y} \right) \overline{\Delta U_{j,k}^{n+1}}.$$

Рівняння (2.71) зводиться до верхньої блокової дводіагональної системи, яку можна розв'язати, якщо рухатися для кожного k в бік зменшення j . Визначивши $\Delta U_{j,k}^*$ для всіх (j,k) , знаходимо $\overline{\Delta U_{j,k}^{n+1}}$ зі співвідношення

$$\left(\underline{I} + \frac{\Delta t}{\Delta y} [\underline{B}]_{j,k}^n \right) \overline{\Delta U_{j,k}^{n+1}} = \Delta U_{j,k}^* + \frac{\Delta t}{\Delta y} [\underline{B}]_{j,k+1}^n \overline{\Delta U_{j,k+1}^{n+1}}. \quad (2.72)$$

Останнє різницеве рівняння також являє собою верхню блокову дводіагональну систему, яку можна розв'язати, якщо рухатися для кожного j у бік зменшення k . Щоб показати, як розв'язується рівняння (2.72) у деякій точці (j,k) , перепишемо його у вигляді

$$\left(\underline{I} + \frac{\Delta t}{\Delta y} \underline{S}_y^{-1} \underline{D}_B \underline{S}_y \right) \overline{\Delta U_{j,k}^{n+1}} = W, \quad (2.73)$$

де W – права частина рівняння (2.72), а замість $[\underline{B}]_{i,j}^n$ записано $\underline{S}_y^{-1} \underline{D}_B \underline{S}_y$. Рівняння (2.73) еквівалентне рівнянню

$$\left(\underline{S}_y + \frac{\Delta t}{\Delta y} \underline{D}_B \underline{S}_y \right) \overline{\Delta U_{j,k}^{n+1}} = \underline{S}_y W = X \quad (2.74)$$

або

$$\left(\underline{I} + \frac{\Delta t}{\Delta y} \underline{D}_B \right) \underline{S}_y \overline{\Delta U_{j,k}^{n+1}} = X. \quad (2.75)$$

Звідси маємо рівняння

$$\underline{S}_y \Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}} = \left(\underline{I} + \frac{\Delta t}{\Delta y} \underline{D}_B \right)^{-1} X = Y, \quad (2.76)$$

яке легко перетворити до вигляду

$$\Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}} = [\underline{S}_y]^{-1} Y. \quad (2.77)$$

Процедура розв'язання рівняння (2.72) складається з таких кроків:

1. $W =$ Права частина рівняння (2.72).
2. $X = \underline{S}_y W$.
3. $Y = \left(\underline{I} + (\Delta t / \Delta y) \underline{D}_B \right)^{-1} X$.
4. $\Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}} = [\underline{S}_y]^{-1} Y$.
5. При проходженні розрахункової області член $(\Delta t / \Delta y) [\underline{B}]_{j,k}^n \Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}}$ із W визначається тепер для наступної точки $(j, k-1)$ із використанням рівності $(\Delta t / \Delta y) [\underline{B}]_{j,k}^n \Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}} = W - \Delta U_{j,k}^{\overline{n+1}}$.

Зауваження:

- *Обернення матриці на кроці 3 тривіальне, оскільки вона діагональна.*
- *Необхідну на кроці 4 матрицю $[\underline{S}_y]^{-1}$ легко отримати з виразу (2.666).*
- *Для запобігання виникненню нестійкостей, які викликаються тривалими процесами встановлення, необхідно збільшити величину ν в початковій стадії деяких розрахунків.*

За умови, що $\nu \Delta t / \rho (\Delta x)^2$ та $\nu \Delta t / \rho (\Delta y)^2$ залишаються обмеженими при прямуванні Δx , Δy та Δt до нуля, неявна схема Мак-Кормака для рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини має другий порядок мализни як за простором, так і за часом. Основна цінність цієї схеми полягає в тому, що замість звичайної блокової тридіагональної системи рівнянь тут

розв'язують блокову дводіагональну систему. А основний недолік схеми пов'язаний із труднощами при постановці крайових умов, що тут відмінні від крайових умов типу Діріхле.

2.2. Рівняння Нав'є – Стокса для нестисливої рідини

Рівняння Нав'є – Стокса для нестисливої рідини можна одержати з їх аналога для стисливої рідини, якщо покласти $M_\infty = 0$, $a = \infty$. Отже, у випадку нестисливої рідини ми просто маємо окремий випадок рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини, і виникає суттєве запитання: чому ці рівняння в тому і іншому випадках розглядаються окремо? Іншими словами, чому не можна скористатися методами, які придатні для розв'язання рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини, щоб розраховувати течії нестисливої рідини? Головна причина тут полягає не тільки в більшій складності рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини порівняно з їх аналогом для нестисливої рідини, але і з обмеженнями на крок за часом. Для пояснення останнього фактора нагадаємо, що в усіх явних схемах розв'язання рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини крок за часом обмежений умовою стійкості Куранта – Фрідрікса – Леві:

$$\Delta t \leq \frac{1}{(|u|/\Delta x) + (|v|/\Delta y) + a\sqrt{[1/(\Delta x)^2] + [1/(\Delta y)^2]}}, \quad (2.78)$$

з якої випливає, що крок Δt прямує до нуля при наближенні швидкості звука a до нескінченності, що характерно для нестисливої рідини. Тому при розрахунках течії дійсно нестисливої рідини таким методом виникне потреба в нескінченно великій кількості комп'ютерного часу. Неявні методи, наприклад схема Біма – Уормінга, припускають суттєво більші значення Δt , але при цьому помилка апроксимації стає занадто великою, тому максимальне значення кроку за часом беруть звичайно в 5-10 разів менше того значення, що задається виразом (2.78). Таким чином, навіть при використанні неявної схеми практично неможливо розрахувати течію дійсно нестисливої рідини, якщо застосовувати для цього числові

методи, що придатні для розв'язання рівнянь Нав'є – Стокса для стисливої рідини.

Перейдемо тепер безпосередньо до розгляду методів розв'язання рівнянь Нав'є – Стокса для нестисливої рідини. Рівняння Нав'є – Стокса для нестисливої рідини зі сталими властивостями за відсутності масових сил і підводу теплоти ззовні мають такий вигляд:

рівняння нерозривності

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0, \quad (2.79)$$

рівняння руху

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{V}, \quad (2.80)$$

рівняння енергії

$$\rho c_v \frac{DT}{Dt} = k \nabla^2 T + \Phi. \quad (2.81)$$

У стаціонарному випадку ці рівняння (одне векторне та два скалярні) утворюють мішану еліптично-параболічну систему щодо примітивних змінних (\vec{V}, p, T) . Зазначимо, що температура тут входить лише в рівняння енергії і, таким чином, ми можемо розглядати це рівняння окремо від інших. У багатьох задачах, які описують рівняннями Нав'є – Стокса для нестисливої рідини, зміна температури або незначна, або не є важливою, тому часто немає потреби взагалі розв'язувати рівняння енергії. Якщо ж нам потрібно визначити розподіл температури, то це легко зробити пізніше, бо при вже відомому полі швидкості \vec{V} нестационарне рівняння енергії є лінійним параболічним рівнянням із частинними похідними. Зважаючи на останню обставину, приділимо основну увагу методам розв'язання рівнянь нерозривності та руху.

Зауваження. Тиск у цьому випадку визначається з окремої крайової задачі для рівняння Пуассона.

2.2.1. Незалежні змінні – завихреність і функція течії

Підхід із використанням завихреності та функції течії як незалежних змінних є одним із найпоширеніших методів розв'язання двовимірних рівнянь Нав'є – Стокса для нестисливої рідини. Попередньо роблять заміну змінних, переходячи від компонент швидкості до завихреності ζ і функції течії ψ . Вектор завихреності тут визначається у вигляді:

$$\vec{\zeta} = \nabla \times \vec{V}. \quad (2.82)$$

Його модуль $\zeta = |\vec{\zeta}| = |\nabla \times \vec{V}|$ у плоских декартових координатах записується як

$$\zeta = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}. \quad (2.83)$$

У цій самій системі координат функція течії ψ визначається так:

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = u, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = -v. \quad (2.84)$$

Використовуючи нові незалежні змінні, рівняння руху можна скомбінувати (виключаючи з них тиск), що в результаті дає

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + u \frac{\partial \zeta}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} \right) \quad (2.85)$$

або

$$\frac{D\zeta}{Dt} = \nu \nabla^2 \zeta. \quad (2.86)$$

Це параболічне рівняння з частинними похідними називається рівнянням перенесення завихреності. Одновимірна форма цього рівняння

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + u \frac{\partial \zeta}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \quad (2.87)$$

являє собою одновимірне адвективно-дифузійне рівняння, яке часто використовують як модельне¹.

¹ Для моделювання перенесення завихреності можна також скористатися нелінійним рівнянням Бюргерса. Фактично всі

Підставляючи (2.84) у (2.83), одержують додаткове еліптичне рівняння для визначення ψ :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\zeta \quad (2.88)$$

або

$$\nabla^2 \psi = -\zeta, \quad (2.89)$$

яке носить назву рівняння Пуассона для функції течії.

Унаслідок запропонованої заміни змінних мішана еліптично-параболічна система рівнянь Нав'є – Стокса для нестисливої рідини розкладається на одне параболічне рівняння (рівняння перенесення завихреності) й одне еліптичне рівняння (рівняння Пуассона). Звичайно ці рівняння розв'язують методом установлення за часом за схемою:

1. У момент часу $t = 0$ задають початкові значення ζ та ψ .
2. Розв'язують рівняння перенесення завихреності для ζ у кожній внутрішній точці розрахункової сітки в момент часу $t + \Delta t$.
3. Розв'язуючи ітераційним методом рівняння Пуассона, знаходять нові значення ψ в усіх точках сітки по нових значеннях ζ у внутрішніх точках.
4. Обчислюють компоненти швидкості зі співвідношень $u = \psi_y$ та $v = -\psi_x$.
5. Визначають значення ζ на межах за значеннями ζ та ψ у внутрішніх точках.
6. Якщо розв'язок не збігається, то повертаються до кроку 2.

Після завершення описаної процедури визначають компоненти швидкості в кожному вузлі. Для визначення тиску в кожному вузлі сітки необхідно розв'язати ще одне рівняння, яке називають рівнянням Пуассона для тиску:

$$\nabla^2 p = 2\rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (2.90a)$$

розглянуті в першій частині курсу [6] числові методи розв'язання нелінійного рівняння Бюргерса тепер можна застосувати для розв'язання рівняння перенесення завихреності.

або

$$\nabla^2 p = S, \quad (2.90б)$$

де

$$S = 2\rho \left[\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) - \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \right)^2 \right].$$

Таким чином, ми одержали рівняння Пуассона для тиску, аналогічне (2.88). Якщо S дискретизувати підхідним способом, то всі методи розв'язання, що вже наводилися вище, будуть застосовні, як до рівняння (2.88), так і до рівняння (2.90б). Різницєва апроксимація другого порядку для S задається так:

$$S_{j,k} = 2\rho_{j,k} \left[\left(\frac{\Psi_{j+1,k} - 2\Psi_{j,k} + \Psi_{j-1,k}}{(\Delta x)^2} \right) \left(\frac{\Psi_{j,k+1} - 2\Psi_{j,k} + \Psi_{j,k-1}}{(\Delta y)^2} \right) - \left(\frac{\Psi_{j+1,k+1} - \Psi_{j+1,k-1} - \Psi_{j-1,k+1} + \Psi_{j-1,k-1}}{4\Delta x \Delta y} \right)^2 \right]. \quad (2.91)$$

У стаціонарній задачі рівняння Пуассона для тиску розв'язують лише один раз після того, як уже обчислено сталі значення ζ та ψ . Якщо потрібно визначити тільки тиск на стінці, немає потреби розв'язувати рівняння Пуассона для всієї області течії. Замість цього можна розв'язати простіше рівняння для тиску на стінці, яке одержують, записуючи рівняння руху для рідини, що міститься поблизу стінки, у паралельному стінці напрямку.

Нехай стінка розташована у площині $y = 0$ декартової системи координат (рис. 2.2), тоді рівняння руху в паралельному стінці напрямку (рівняння руху по координаті x), має вигляд

$$\left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_w = \mu \left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right|_w \quad \text{або} \quad \left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_w = \mu \left. \frac{\partial \zeta}{\partial y} \right|_w, \quad (2.92)$$

яке дискретизують таким чином:

$$\frac{P_{j+1,1} - P_{j-1,1}}{2\Delta x} = -\mu \frac{-3\zeta_{j,1} + 4\zeta_{j,2} - \zeta_{j,3}}{2\Delta y}. \quad (2.93)$$

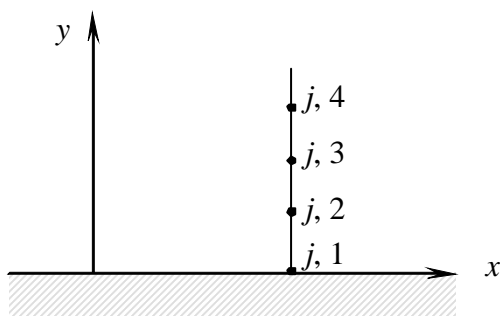


Рис. 2.2. Апроксимація крайових умов на стінці

Щоб скористатися рівнянням (2.93), необхідно попередньо знати тиск хоча б в одній точці на поверхні стінки. Тоді тиск у сусідній точці за потоком визначається з односторонньої різниці для $\partial p / \partial x$ із рівняння (2.92). Після чого з рівняння (2.93) знайдемо тиск в усіх інших точках стінки. У випадку системи координат, що пов'язана з поверхнею стінки, перепишемо рівняння (2.92) у вигляді

$$\left. \frac{\partial p}{\partial s} \right|_w = \mu \left. \frac{\partial \zeta}{\partial n} \right|_w, \quad (2.94)$$

де координата s направлена вздовж поверхні тіла, а n – по нормалі до стінки.

Описаний раніше для розв'язання рівняння перенесення завихреності та рівняння Пуассона метод установлення потребує задання крайових умов для ψ та ζ на межах області інтегрування. Правильне задання крайових умов тут дуже важливе, бо безпосередньо впливає на стійкість і точність розв'язку.

Розглянемо постановку крайових умов на стінці, що розташована у площині $y = 0$. На поверхні стінки ψ – константа, яку звичайно вважають рівною нулю. Щоб знайти ζ на стінці, розвинемо ψ в ряд Тейлора в околі точки $(j,1)$, що розташована на стінці:

$$\psi_{j,2} = \psi_{j,1} + \left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{j,1} \Delta y + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right|_{j,1} (\Delta y)^2 + \dots \quad (2.95)$$

Оскільки на непроникній межі виконується умова прилипання:

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{j,1} = u_{j,1} = 0, \quad \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right|_{j,1} = \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{j,1} \quad (2.96)$$

і за визначенням (2.83)

$$\zeta_{j,1} = \underbrace{\left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{j,1}}_0 - \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{j,1} = - \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right|_{j,1} \quad (2.97)$$

рівняння (2.95) можна переписати, як

$$\psi_{j,2} = \psi_{j,1} - \frac{1}{2} \zeta_{j,1} (\Delta y)^2 + O[(\Delta y)^3] \quad (2.98a)$$

або

$$\zeta_{j,1} = \left[2(\psi_{j,1} - \psi_{j,2}) \right] / [(\Delta y)^2 + O(\Delta y)]. \quad (2.98b)$$

Цей вираз для $\zeta_{j,1}$ першого порядку мализни часто дає кращі результати, ніж вирази більш високого порядку, що схильні до нестійкості при великих числах Рейнольдса. Наприклад, наступний вираз другого порядку мализни, який вперше використав Йенсен [57], призводить до нестійких результатів у діапазоні від помірних до великих чисел Рейнольдса:

$$\zeta_{j,1} = \frac{7\psi_{j,1} - 8\psi_{j,2} + \psi_{j,3}}{2(\Delta y)^2} + O(\Delta y^2). \quad (2.99)$$

Брілі [44] пояснює нестійкість (2.99) тим, що вираз для ψ у вигляді полінома, який прийнято при його виведенні, не узгоджується з обчисленнями $u = \partial \psi / \partial y$ в точці $(j,2)$ із використанням центральної різниці. Якщо обчислити u в точці $(j,2)$ згідно з виразом

$$u_{j,2} = \left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{j,2} = \frac{-5\psi_{j,1} + 4\psi_{j,2} + \psi_{j,3}}{4\Delta y} + O[(\Delta y)^2], \quad (2.100)$$

який, у свою чергу, погоджується з рівнянням (2.99), розв'язок початкової задачі стійкий навіть при великих числах Рейнольдса.

Розглянемо приклади постановки крайових умов у змінних $\zeta-\psi$. Основну увагу приділимо побудові крайових умов для

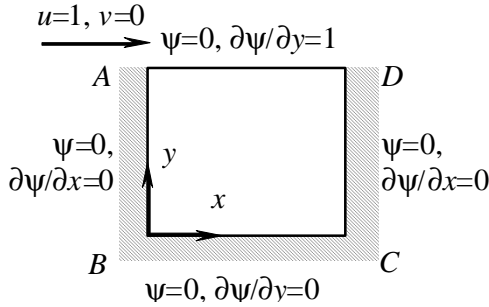


Рис. 2.3. Картина течії в порожнині з кришкою

завихреності на твердій стінці. Проте важливою задачею залишається і коректна постановка крайових умов на початковій та кінцевій поверхнях.

Як показано на рис. 2.3, крайові умови прилипання на стінці еквівалентні умовам

$$\psi = 0, \quad \partial\psi/\partial n = g. \quad (2.101)$$

Першу крайову умову використаємо при розв'язанні рівняння Пуассона для функції течії, другу – при побудові крайової умови для завихреності. Продемонструємо це для кришки (AD на рис. 2.3). Розвинення в ряд Тейлора функції течії відносно точки (j,k) на AD дає

$$\Psi_{j,k-1} = \Psi_{j,k} + \Delta y \left[\frac{\partial\psi}{\partial y} \right]_{j,k} + \frac{\Delta y^2}{2} \left[\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} \right]_{j,k} + \dots \quad (2.102)$$

Із дискретного представлення рівняння (2.97) та першого рівняння (2.101) маємо

$$\zeta_{j,k} = - \left[\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} \right]_{j,k}, \quad \Psi_{j,k} = 0, \quad \left[\frac{\partial\psi}{\partial y} \right]_{j,k} = g_j. \quad (2.103)$$

Отже, розвинення (2.102) можна подати у вигляді

$$\zeta_{j,k} = - \frac{2}{\Delta y^2} (\Psi_{j,k-1} - \Delta y g_j) + O(\Delta y). \quad (2.104)$$

Аналогічні вирази можна легко отримати і для трьох інших поверхонь. Оскільки у внутрішніх точках використовується

дискретизація другого порядку мализни, бажано крайові умови визначити також із другим порядком мализни. Це можна зробити таким чином. Рівняння для $\zeta_{j,k}$ із другим порядком мализни запишемо у вигляді

$$\zeta_{j,k} = \frac{\Psi_{j,k-1} - 2\Psi_{j,k} + \Psi_{j,k+1}}{\Delta y^2} + O(\Delta y^2). \quad (2.105)$$

Крім того, похідну $[\partial\psi / \partial y]_{j,k}$ із третім порядком мализни можна подати у вигляді

$$g_j = \left[\frac{\partial\psi}{\partial y} \right]_{j,k} = \frac{\Psi_{j,k-2} - 6\Psi_{j,k-1} + 3\Psi_{j,k} + 2\Psi_{j,k+1}}{6 \Delta y} + O(\Delta y^3). \quad (2.106)$$

Вузлове значення $\psi_{j,k+1}$ лежить за межами розрахункової області і має бути виключене з (2.105) та (2.106). У результаті маємо

$$\zeta_{j,k} = \frac{0.5}{\Delta y} (8\Psi_{j,k-1} - \Psi_{j,k-2}) + \frac{3g_j}{\Delta y} + O(\Delta y)^2. \quad (2.107)$$

Проведені тестові розрахунки показали, що рівняння (2.107) дозволяє одержати точніший розв'язок, ніж рівняння (2.104). Проте використання рівняння (2.107) призводить до збільшення кількості ітерацій у послідовному алгоритмі. Крім того, при великих значеннях числа **Re** може спостерігатися розбіжність розв'язку навіть при використанні нижньої релаксації значення завихреності на межі. Водночас використання (2.107) у пов'язаному алгоритмі не веде до додаткових утруднень.

У методі встановлення маємо іншу крайову умову

$$\zeta_{j,k}^{n+1} = \zeta_{j,k}^n - \beta \{ [\partial\psi / \partial n] - g_j \}_{j,k}, \quad (2.108)$$

що дозволяє безпосередньо використовувати крайову умову (2.101, друге рівняння). Для збіжності тут тільки необхідно відповідно вибрати релаксаційний параметр β . Проте є тісний зв'язок такої постановки із крайовою умовою для завихреності. Значення завихреності на межі на $(n+1)$ -му кроці

$$\zeta_{j,k}^{n+1} = \gamma \zeta_{j,k}^* + (1 - \gamma) \zeta_{j,k}^n, \quad (2.109)$$

де $\zeta_{j,k}^*$ обчислюється з (2.104), а γ – релаксаційний коефіцієнт.

Виключаючи $\zeta_{j,k}^*$ із (2.109) та (2.104), маємо

$$\zeta_{j,k}^{n+1} = \zeta_{j,k}^n + \frac{2\gamma}{\Delta y^2} (\psi_{j,k-1}^n + \Delta y g_j^n - 0.5\Delta y^2 \zeta_{j,k}^n). \quad (2.110)$$

Якщо похідну $[\partial\psi/\partial n]_{j,k}$ у (2.108) замінити на $(\psi_{j,k} - \psi_{j,k-1})/\Delta y$, то отримуємо

$$\zeta_{j,k}^{n+1} = \zeta_{j,k}^n + \frac{\beta}{\Delta y} (\psi_{j,k-1}^n + \Delta y g_i^n). \quad (2.111)$$

При $\beta = 2\gamma/\Delta y$ рівняння (2.110) та (2.111) еквівалентні з точністю до $O(\Delta y)$.

Постановку крайових умов на відкритих межах зручно розглянути на прикладі задачі про обтікання зворотної приступки (рис. 2.4). Відкриті межі є початкові й кінцеві. Необхідна кількість фізичних крайових умов наведена в табл. 2.2.

Для задачі обтікання приступки AF – початкова межа, BP – кінцева. Межа AB може бути як початковою, так і кінцевою залежно від локального знаку швидкості v_{AB} . Для межі AB істотно те, що вона віддалена від приступки і локальний

Таблиця 2.2. Необхідна кількість крайових умов на віддаленій межі для нестисливих течій (чотири змінні)

Система рівнянь	Початкова межа	Кінцева межа
Ейлера	3	1
Нав'є – Стокса	3	3

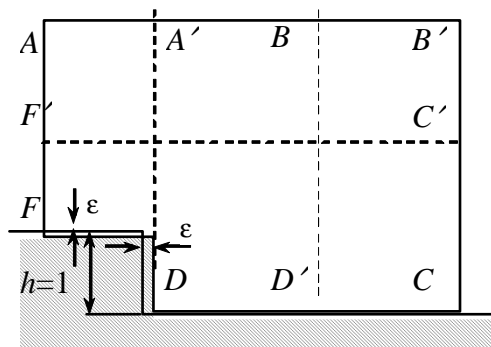


Рис. 2.4. Картина течії при обтіканні зворотної приступки

напрямок течії на ній паралельний AB . Така межа називається віддаленою. Далі на ній визначатимуться крайові умови, що не залежать від того, чи є ця межа початковою або кінцевою.

На початковій межі для в'язкої нестисливої течії правильним є визначення всіх залежних змінних, крім однієї. Для течії біля приступки можна задати $u(y)$, $p(y)$, а $v(y)$ визначити з розв'язку у внутрішній області. У змінних завихреність–функція течії на вхідній межі задається ψ ; задання ζ тут не рекомендується. Роуч [14] для подібної задачі використав умову $\partial^2 v / \partial x^2 = 0$. На AF (рис. 2.4) при використанні для дискретизації триточкових центрально-різницевих формул, значення ζ одержують із (2.83) у вигляді

$$\zeta_{1,k} = \frac{u_{1,k+1} - u_{1,k-1}}{2 \Delta y} - \left[\frac{\partial v}{\partial x} \right]_{1,k}. \quad (2.112)$$

Проте з умови $\left[\partial^2 v / \partial x^2 \right]_{1,k} = 0$ випливає, що

$$\left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right]_{1,k} = \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right]_{2,k} = -\frac{\psi_{1,k} - 2\psi_{2,k} + \psi_{3,k}}{\Delta x^2}. \quad (2.113)$$

Таким чином, $\zeta_{1,k}$ у виразі (2.112) визначається через значення u на межі і значення ψ всередині області. Подібний підхід використовував і Флетчер [17]. Головна відмінність підходу Флетчера полягає в тому, що $[\partial v / \partial x = -\partial^2 \psi / \partial x^2]_{j,k}$ у нього визначалося через розв'язання всередині області із використанням односторонніх різниць без притягнення умови $\partial^2 v / \partial x^2 = 0$.

На кінцевій межі ($B'C$ на рис. 2.4) Роуч [14] рекомендує використовувати такі умови:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} = 0. \quad (2.113)$$

Друга крайова умова з (2.113) згідно з (2.88) означає, що тут $\partial^2 \psi / \partial y^2 = -\zeta$. Проте важливо, щоб ця крайова умова виконувалася разом із умовами на DC та AB . Роуч [14] також пропонує використовувати в рівнянні (2.85) на $B'C$ для апроксимації $\partial(u\xi) / \partial x$ різниці проти потоку і вважати, що

$[\partial^2 \zeta / \partial x^2]_{NX,k} = [\partial^2 \zeta / \partial x^2]_{NX-1,k}$. Тоді не потрібно крайових умов для ζ_{BC} . Флетчер [17] отримав дуже схожий результат шляхом відкидання члена $\partial^2 \zeta / \partial x^2$ у рівнянні (2.85) на $B'C$. Можливість такого підходу впливає з порівняння порядків величин. Проте при такому спрощенні рівняння (2.85) стає параболічним за напрямком x і для ζ тут не потрібні крайові умови.

Умова $u = 1$ на віддаленій межі приводить до крайової умови Неймана для ψ . Для добре обтічних тіл, якщо вважати течію всюди нев'язкою, можна розрахувати наближене значення ψ на віддаленій межі, наприклад панельним методом [7]. Це часто дозволяє визначити точнішу крайову умову $u = U_\infty(x)$ і наблизити межу AB до тіла. Проте така процедура рекомендується лише для визначення крайових умов Неймана. Крайові умови Діріхле при використанні такої процедури можуть привести до появи нефізичних примежових шарів поблизу AB .

Для відривних течій, що пов'язані з обтіканням приступки, межу AB краще розташовувати подалі, щоб на ній $u = 1$ і $\zeta = 0$. В іншій постановці, що одержала назву "аеродинамічної труби без тертя" [17], покладається $u = 1$ та $v = 0$ на AB , що фактично приводить до крайової умови Діріхле $\psi_{AB} = \psi_A$. Крайову умову Діріхле для завихреності тоді отримуємо через значення ψ всередині області за умови, яка аналогічна (2.104). З останніх двох крайових умов впливає, що тут $du/dy = dv/dx = 0$.

Зауваження:

- *Якщо межа AB віддалена від виступу достатньо далеко, глобальний розв'язок порівняно нечутливий до конкретного засобу постановки крайових умов на AB . Проте невдала постановка крайових умов може привести до утворення нефізичного примежового шару або локальних осциляцій поблизу AB .*
- *Дуже важливим є правильне задання значень ζ і ψ на межах різноманітного типу (лінії симетрії, вільні поверхні, початкова та кінцева площини, лінії із заданою умовою непротікання тощо). Крім того, варто бути особливо*

уважним і правильно моделювати фізику течії. У монографії Роуча [14] є чудовий огляд постановок крайових умов найрізноманітнішого типу.

Поширення підходу, із використанням завихреності та функції течії як незалежних змінних, на тривимірні задачі ускладнене тим, що для дійсно тривимірної течії не можна ввести функцію течії. Проте в цьому випадку існує векторний потенціал (не плутати з потенціалом швидкості)

$$\vec{\psi} = \psi_x \times \vec{j} + \psi_y \times \vec{k} + \psi_z \times \vec{l}, \quad (2.114)$$

що задовольняє рівняння нерозривності

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0, \quad (2.115)$$

при цьому

$$\vec{V} = \nabla \times \vec{\psi} \quad (2.116)$$

$$\text{та } u = \frac{\partial \psi_z}{\partial y} - \frac{\partial \psi_y}{\partial z}, \quad v = -\frac{\partial \psi_z}{\partial x} + \frac{\partial \psi_x}{\partial z}, \quad w = \frac{\partial \psi_y}{\partial x} - \frac{\partial \psi_x}{\partial y}.$$

Після підстановки (2.116) у рівняння $\nabla \times \vec{V} = \zeta$ отримуємо

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{\psi}) = -\vec{\zeta}. \quad (2.117)$$

Оскільки векторний потенціал обираємо довільно, але так, щоб він задовольняв умову $\nabla \psi = 0$, то рівняння (2.117) можна спростити. Маємо

$$\nabla^2 \vec{\psi} = -\vec{\zeta}. \quad (2.118)$$

Це векторне рівняння Пуассона приводить до трьох скалярних рівнянь Пуассона, які необхідно розв'язувати на кожному кроці за часом. Аналогічно рівняння перенесення завихреності у випадку тривимірної задачі також є векторним і розкладається на три скалярні параболічні рівняння для визначення компонент завихреності ζ_x , ζ_y , та ζ_z :

$$\frac{\partial \zeta_x}{\partial t} + u \frac{\partial \zeta_x}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta_x}{\partial y} + w \frac{\partial \zeta_x}{\partial z} - \zeta_x \frac{\partial u}{\partial x} - \zeta_y \frac{\partial u}{\partial y} - \zeta_z \frac{\partial u}{\partial z} = \nu \nabla^2 \zeta_x,$$

$$\frac{\partial \zeta_y}{\partial t} + u \frac{\partial \zeta_y}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta_y}{\partial y} + w \frac{\partial \zeta_y}{\partial z} - \zeta_x \frac{\partial v}{\partial x} - \zeta_y \frac{\partial v}{\partial y} - \zeta_z \frac{\partial v}{\partial z} = \nu \nabla^2 \zeta_y,$$

$$\frac{\partial \zeta_z}{\partial t} + u \frac{\partial \zeta_z}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta_z}{\partial y} + w \frac{\partial \zeta_z}{\partial z} - \zeta_x \frac{\partial w}{\partial x} - \zeta_y \frac{\partial w}{\partial y} - \zeta_z \frac{\partial w}{\partial z} = \nu \nabla^2 \zeta_z. \quad (2.119)$$

Таким чином, на кожному шарі за часом ми змушені розв'язувати три параболічні та три еліптичні рівняння з частинними похідними. Тому при розв'язанні тривимірних задач підхід із використанням завихреності та функції течії як незалежних змінних не дає переваг порівняно з використанням примітивних змінних.

Перед тим, як безпосередньо перейти до обговорення підходу з використанням примітивних змінних, опишемо коротко гібридний підхід. За цього підходу залежними змінними є компоненти вектора завихреності ζ_x , ζ_y , ζ_z та компоненти вектора швидкості u , v , w . Компоненти вектора завихреності одержують із рівняння (2.119), а компоненти вектора швидкості визначають, розв'язуючи таке векторне рівняння:

$$\nabla^2 \vec{V} = -\nabla \times \vec{\zeta}. \quad (2.120)$$

Останнє векторне рівняння одержують векторним множенням рівняння завихреності на оператор ∇ і подальшим спрощенням отриманого подвійного векторного добутку $\nabla \times (\nabla \times V) = \nabla \times \zeta$.

***Зауваження.** Перевага використання гібридного підходу полягає в тому, що при його застосуванні немає потреби у використанні сітки з розташуванням вузлів у шаховому порядку, що є обов'язковим при безпосередньому використанні примітивних змінних. До того ж постановка крайових умов простіша для гібридного підходу, ніж для підходу з використанням векторного потенціалу (2.118)–(2.119).*

2.2.2. Примітивні незалежні змінні

Підхід до розв'язання рівнянь Нав'є – Стокса для нестисливої рідини з використанням завихреності та функції течії як незалежних змінних втрачає свою привабливість у випадку тривимірних течій, бо тоді не існує однієї функції течії. Тому у тривимірних задачах рівняння Нав'є – Стокса для нестисливої

рідини розв'язують найчастіше також шляхом використання примітивних змінних u, v, w, p . У декартовій системі координат безрозмірні рівняння Нав'є – Стокса для нестисливої рідини у примітивних змінних мають такий вигляд:

рівняння нерозривності

$$\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} + \frac{\partial w^*}{\partial z^*} = 0; \quad (2.121)$$

рівняння руху за координатою x

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} + w^* \frac{\partial u^*}{\partial z^*} = \\ = -\frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \frac{1}{\mathbf{Re}_L} \left(\frac{\partial^2 u^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial z^{*2}} \right); \end{aligned} \quad (2.122)$$

рівняння руху за координатою y

$$\begin{aligned} \frac{\partial v^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial v^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial v^*}{\partial y^*} + w^* \frac{\partial v^*}{\partial z^*} = \\ = -\frac{\partial p^*}{\partial y^*} + \frac{1}{\mathbf{Re}_L} \left(\frac{\partial^2 v^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 v^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 v^*}{\partial z^{*2}} \right); \end{aligned} \quad (2.123)$$

рівняння руху за координатою z

$$\begin{aligned} \frac{\partial w^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial w^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial w^*}{\partial y^*} + w^* \frac{\partial w^*}{\partial z^*} = \\ = -\frac{\partial p^*}{\partial z^*} + \frac{1}{\mathbf{Re}_L} \left(\frac{\partial^2 w^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 w^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 w^*}{\partial z^{*2}} \right). \end{aligned} \quad (2.124)$$

Наведені вище рівняння зведено до безрозмірного вигляду з використанням таких співвідношень:

$$u^* = \frac{u}{V_\infty}, \quad x^* = \frac{x}{L}, \quad p^* = \frac{p}{\rho_\infty V_\infty^2}, \quad v^* = \frac{v}{V_\infty}, \quad y^* = \frac{y}{L}, \quad t^* = \frac{t V_\infty}{L}. \quad (2.125)$$

(Зірочками * тут позначено безрозмірні величини. Надалі зірочки опускаються.)

Для розв'язання тривимірних стаціонарних рівнянь Нав'є – Стокса у випадку нестисливої рідини одним із перших

запропоновано метод штучної стисливості Чоріна [47]. Згідно з цим методом до рівняння нерозривності включено член зі штучною стисливістю, яка перетворюється на нуль, коли розв'язок устанавлюється за часом. При цьому рівняння Нав'є – Стокса утворюють мішану систему гіперболічно-параболічних рівнянь, яка розв'язується звичайним методом устанавлення. Проілюструємо метод Чоріна на прикладі рівнянь (2.121)–(2.124). Рівняння нерозривності замінимо таким рівнянням:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (2.126)$$

де $\tilde{\rho}$ – "штучна" щільність, \tilde{t} – фіктивний час, що є аналогом реального часу в течіях стисливої рідини. "Штучна" щільність пов'язана з тиском "штучним" рівнянням стану

$$p = \tilde{\rho} / \beta, \quad (2.127)$$

де β – коефіцієнт "штучної" стисливості, який буде визначено далі. Зазначимо, що сталий розв'язок не залежить від $\tilde{\rho}$ та \tilde{t} , бо $\partial \tilde{\rho} / \partial \tilde{t} \rightarrow 0$. Після заміни t на \tilde{t} в рівняннях (2.122)–(2.124) і підстановки (2.127) у рівняння (2.126) ми можемо дискретизувати отримані рівняння і розв'язувати їх за часом \tilde{t} до встанавлення розв'язку. Останній і є розв'язком для нестисливої рідини. Очевидно, що цей метод застосовний лише для стаціонарних течій, бо не є точним за часом.

Для полегшення дискретизації рівняння (2.121)–(2.124) і (2.126)–(2.127) можна записати в такій векторній формі :

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial z} = \frac{1}{\mathbf{Re}_L} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \underline{D} \vec{q}, \quad (2.128)$$

де

$$\vec{q} = \begin{bmatrix} p \\ u \\ v \\ w \end{bmatrix}, \quad \vec{E} = \begin{bmatrix} u/\beta \\ p+u^2 \\ uv \\ uw \end{bmatrix}, \quad \vec{F} = \begin{bmatrix} v/\beta \\ uv \\ p+v^2 \\ vw \end{bmatrix}, \quad \vec{G} = \begin{bmatrix} w/\beta \\ uw \\ vw \\ p+w^2 \end{bmatrix}, \quad (2.129a)$$

$$\underline{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.1296)$$

В оригінальній роботі [47] Чорін для розв'язання (2.128) використовував схему Дюфорта – Франкела – "чехарда", для якої одержано умову стійкості

$$\Delta \tilde{t} \leq \frac{2\beta^{1/2} \Delta_{\min}}{N^{1/2} (1 + \sqrt{5})}, \quad (2.130)$$

де N – кількість просторових вимірів і Δ_{\min} – мінімум $(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta z^2)$. Очевидно, що можна одержати додатковий зв'язок між $\Delta \tilde{t}$ і β , якщо помітити, що "штучне" рівняння стану (2.127) припускає існування "штучної" швидкості звуку \tilde{a} :

$$\tilde{a} = 1/\beta^{1/2}. \quad (2.131)$$

Оскільки максимальне "штучне" число Маха \tilde{M}_{\max} , що побудоване з використанням "штучної" швидкості звуку, для дозвукового руху рідини повинне бути менше одиниці, маємо додаткове співвідношення

$$\tilde{M}_{\max} = \frac{V_{\max}}{\tilde{a}} = \beta^{1/2} V_{\max} < 1, \quad (2.132)$$

де V_{\max} – максимальне значення V :

$$V = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}. \quad (2.133)$$

Зауваження:

- На початку розрахунку для двох параметрів $\Delta \tilde{t}$ та β попередньо потрібно задати початкові значення, що задовольняють умови (2.130) і (2.132). Можна збільшити швидкість збіжності методу шляхом вибору оптимальних значень $\Delta \tilde{t}$ та β , але робити це потрібно методом спроб і помилок для кожної конкретної задачі. Проте задання $\tilde{M}_{\max} = 0,5$ у більшості випадків дає задовільні результати.

- Для розв'язання рівняння (2.128) Флетчер [17] рекомендує скористатися неявною різницевою схемою. Так, при розрахунках завихрених слідів у нестисливій рідині Стегер і Катлер [73] при розв'язанні рівняння (2.128) користувалися неявною приблизно факторизованою схемою Біма – Уормінга. У процесі розрахунків виявилось що, коли β занадто мале, наближена факторизація призводить у розв'язанні до неприпустимо великих помилок.

Звернемося тепер до інших популярних алгоритмів розв'язання системи рівнянь Нав'є – Стокса для нестисливої рідини у примітивних змінних. Загальним для всіх цих алгоритмів є те, що замість рівняння нерозривності тут розв'язується рівняння Пуассона для тиску. Мета цієї заміни – винесення в одне рівняння впливу тиску, що дозволяє відповідним чином моделювати еліптичну природу течії. Рівняння Пуассона для тиску можна записати в безрозмірному вигляді

$$\nabla^2 p = S_p - \delta D, \quad (2.134)$$

де

$$\begin{aligned} S_p = & \frac{d}{dx} \left[-\left(uu_x + vu_y + wu_z \right) + \frac{1}{\mathbf{Re}_L} \left(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} \right) \right] + \\ & + \frac{d}{dy} \left[-\left(uv_x + vv_y + wv_z \right) + \frac{1}{\mathbf{Re}_L} \left(v_{xx} + v_{yy} + v_{zz} \right) \right] + \\ & + \frac{d}{dz} \left[-\left(uw_x + vw_y + ww_z \right) + \frac{1}{\mathbf{Re}_L} \left(w_{xx} + w_{yy} + w_{zz} \right) \right]. \end{aligned}$$

Тут $\delta D = \partial(u_x + v_y + w_z) / \partial t$ – швидкість відносного об'ємного розширення елементарного рідкого об'єму в даній точці, причому $u_x = \partial u / \partial x$. Щоб урахувати розходження між проміжними розв'язками і остаточним розв'язком рівняння Пуассона щодо збіжності, похідну від швидкості відносного об'ємного розширення спочатку покладають не рівною нулю. При розв'язанні рівнянь Нав'є – Стокса для нестисливої рідини

рівняння (2.134) уперше використано в методах *маркерів та клітинок* (MAC та SMAC) [9, 43]. Для цих методів характерне використання сіток із клітинками у шаховому порядку (рознесені сітки).

Згідно з іншим підходом, який можна віднести до проєкційних методів [17], для розв'язання рівнянь руху (2.122)–(2.124) застосовувалася неявна схема змінних напрямків, а рівняння Пуассона для тиску розв'язувалося методом послідовної верхньої релаксації. На початку розрахунку градієнти тиску в рівняннях руху задавалися наближено. Після обчислення компонент швидкості з рівнянь руху, тиск визначають із рівняння Пуассона. Потім розраховують нові градієнти тиску і підставляють їх значення в рівняння руху, з яких потім знаходять нові значення компонент швидкості. Ця процедура повторюється доти, поки розв'язок не зійдеться. Таким чином були розраховані течії в порожнині та каналі. В обох задачах для рівняння Пуассона на межі задавався градієнт тиску в нормальному напрямку $\partial p / \partial n$, який обчислювався з відповідного рівняння руху. Таким чином, для визначення тиску тут необхідно розв'язувати задачу Неймана, причому її розв'язання повинно задовольняти таку інтегральну умову, що випливає з теореми Гаусса – Остроградського:

$$\iint_{\sigma} \nabla^2 p \, d\sigma = \int_C \frac{\partial p}{\partial n} \, ds. \quad (2.135)$$

Тут C – замкнена межа області σ , де шукається розв'язок, а s – довжина дуги вздовж C . Поки розв'язок не встановиться, умова (2.135) точно не задовольняється. Для врахування цієї невідповідності джерельний член S_p у рівнянні (2.134) у кожній точці сітки можна підправляти на величину $\delta D = \Delta S_p / \sigma$, де

$$\Delta S_p = \iint_{\sigma} S_p \, d\sigma - \int_C \frac{\partial p}{\partial n} \, ds. \quad (2.136)$$

Використання виразу, подібного (2.136), для задоволення крайових умов типу Неймана щодо тиску при розв'язанні

рівняння Пуассона вже розглядалося раніше при використанні рівнянь прилежового шару для розрахунку внутрішніх течій [7].

Покажемо, як обчислюється нормальний градієнт тиску на межі. Нехай стінка міститься у площині $y = 0$. Під поверхнею стінки розташуємо шар фіктивних вузлів (сітка звичайна, а не з розташуванням вузлів у шаховому порядку). На стінці рівняння руху за координатою y (2.123) зводиться до рівняння

$$\left. \frac{\partial p}{\partial y} \right|_{j,1} = \frac{1}{\mathbf{Re}_L} \left. \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right|_{j,1}. \quad (2.137)$$

Останнє рівняння можна дискретизувати з використанням апроксимації другого порядку:

$$\frac{-3p_{j,1} + 4p_{j,2} - p_{j,3}}{2\Delta y} = \frac{1}{\mathbf{Re}_L} \frac{\overbrace{v_{j,2} - 2v_{j,1} + v_{j,0}}^0}{\Delta y^2}, \quad (2.138)$$

де $v_{j,0}$ – значення компоненти швидкості v у фіктивному вузлі.

Скористаємося рівнянням нерозривності, яке на стінці має такий простий вигляд:

$$\left. \frac{\partial v}{\partial y} \right|_{j,1} = 0. \quad (2.139)$$

Апроксимуючи (2.139) із третім порядком мализни, маємо

$$\left. \frac{\partial v}{\partial y} \right|_{j,1} = \frac{\overbrace{-2v_{j,0} - 3v_{j,1} + 6v_{j,2} - v_{j,3}}^0}{6\Delta y} + O[(\Delta y)^3] = 0. \quad (2.140)$$

Тепер із (2.138) і (2.140) можна виключити значення швидкості у фіктивному вузлі $v_{j,0}$. Таким самим чином при розв'язанні рівняння Пуассона для тиску визначають градієнти тиску і на інших межах.

2.2.3. SIMPLE-подібні алгоритми

При розв'язанні системи рівнянь Нав'є – Стокса для нестисливої рідини зараз найпоширенішим є SIMPLE-алгоритм

(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations – напівнеявний метод для рівнянь, що пов'язані через тиск) та подібні до нього алгоритми [2, 10, 11, 29]. Основа SIMPLE – це циклічна послідовність операцій "припущення–корекція". Згідно з SIMPLE-алгоритмом задають деяке початкове поле тиску, а далі з рівнянь руху обчислюють компоненти швидкості. Потім тиск і компоненти швидкості коригуються таким чином, щоб задовольнити рівняння нерозривності. Цей процес продовжують доти, поки розв'язок не збіжиться.

При використанні алгоритму SIMPLE істинне значення тиску представляється у вигляді

$$p^{n+1} = p^* + \delta p, \quad (2.141)$$

де p^* – проміжне значення тиску, а δp – коригувальна поправка. Аналогічно істинні значення компонент швидкості для двовимірного випадку представляються таким чином:

$$u^{n+1} = u^* + u_c, \quad v^{n+1} = v^* + v_c, \quad (2.142)$$

де u^* та v^* – проміжні значення компонент швидкості; u_c , v_c – поправки до них. Поправки до тиску пов'язують з u_c та v_c наближеними рівняннями руху [10, 11]:

$$\rho \frac{\partial u_c}{\partial t} = -\frac{\partial(\delta p)}{\partial x}, \quad \rho \frac{\partial v_c}{\partial t} = -\frac{\partial(\delta p)}{\partial y}. \quad (2.143)$$

Оскільки поправки до компонент швидкості на попередній ітерації вважаються рівними нулю, то рівняння руху (2.143) можна зінтегрувати:

$$u_c = -A \frac{\partial(\delta p)}{\partial x}, \quad v_c = -A \frac{\partial(\delta p)}{\partial y}, \quad (2.144)$$

де $A = \Delta t / \rho$. Підставимо (2.142) у (2.144), а результат – у рівняння нерозривності. Маємо

$$\underbrace{\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)}_0 - \left(\frac{\partial u^*}{\partial x} + \frac{\partial v^*}{\partial y} \right) + A \left(\frac{\partial^2(\delta p)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\delta p)}{\partial y^2} \right) = 0 \quad (2.145)$$

або
$$\nabla^2(\delta p) = \frac{1}{A} (\nabla \cdot \vec{V}^*), \quad (2.146)$$

де \vec{V}^* – проміжний вектор швидкості. Рівняння Пуассона (2.146) розв'язують щодо поправки до тиску. Зауважимо, що, коли проміжний вектор швидкості \vec{V}^* задовольняє рівняння нерозривності в кожній точці, то поправки до тиску в кожній точці δp тотожно дорівнюють нулю.

Згідно з алгоритмом SIMPLE-рівняння дискретизується за методом скінченних об'ємів на рознесених сітках (із розташуванням вузлів у шаховому порядку). На рознесеній сітці для різних рівнянь використовуються різні контрольні об'єми (рис. 2.5). Крім того, зсунуті сіткові індекси пов'язують із певними залежними змінними (рис. 2.5). У результаті фізичне положення значення $p_{j+1/2,k}$ збігається з положенням u_{jk} , а $p_{j,k+1/2}$ збігається з положенням v_{jk} .

Наведена далі дискретизація виконана на однорідній сітці. Більш загальний випадок неоднорідної сітки можна знайти у Патанкара [10, 11].

Для контрольного об'єму, що зображений на рис. 2.5, а, застосування методу скінченних об'ємів до рівняння нерозривності (2.79) дозволяє одержати дискретне рівняння

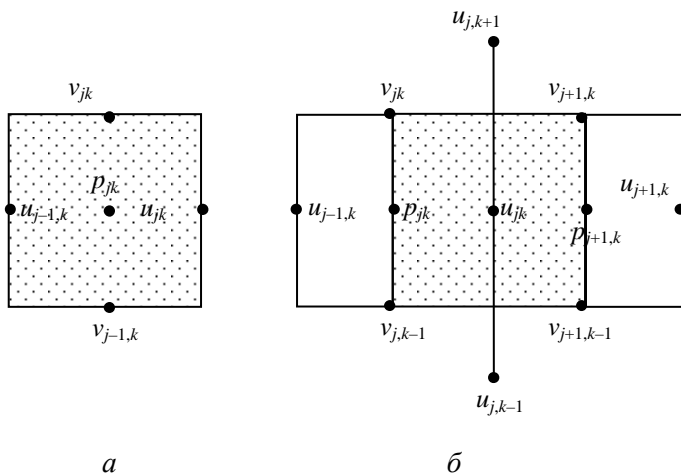


Рис. 2.5а. Контрольні об'єми для методу SIMPLE: *a* – рівняння нерозривності; *б* – рівняння імпульсу по осі x

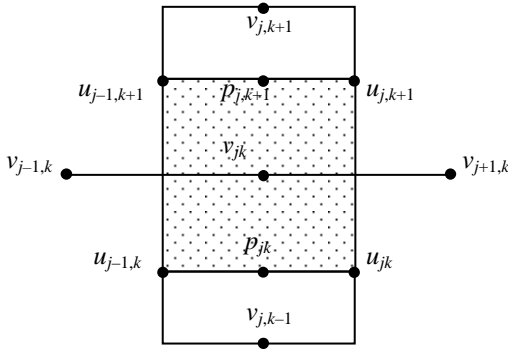


Рис. 2.5б. Контрольний об'єм для рівняння руху по осі y для методу SIMPLE

$$\left(u_{jk}^{n+1} - u_{j-1,k}^{n+1}\right) \Delta y + \left(v_{jk}^{n+1} - v_{j,k-1}^{n+1}\right) \Delta x = 0. \quad (2.147)$$

Застосовуючи метод контрольного об'єму до рівняння для x -компоненти імпульсу (2.80) із контрольним об'ємом, який зображено на рис. 2.5а, б, одержимо дискретне рівняння

$$\left(\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t}\right) \left(u_{jk}^{n+1} - u_{jk}^n\right) + \left(F_{j+1/2,k}^{(1)} - F_{j-1/2,k}^{(1)}\right) \Delta y + \left(G_{j,k+1/2}^{(1)} - G_{j,k-1/2}^{(1)}\right) \Delta x + \left(p_{j+1,k}^{n+1} - p_{jk}^{n+1}\right) \Delta y = 0, \quad (2.148)$$

де

$$F^{(1)} = u^2 - \frac{1}{\text{Re}} \cdot \frac{\partial u}{\partial x}, \quad G^{(1)} = uv - \frac{1}{\text{Re}} \cdot \frac{\partial u}{\partial y}.$$

Виконавши дискретизацію виразів для $F^{(1)}$ та $G^{(1)}$

$$F_{j+1/2,k}^{(1)} = 0,25 \left(u_{jk}^n + u_{j+1,k}^n\right) \cdot \left(u_{jk}^{n+1} + u_{j+1,k}^{n+1}\right) - \frac{1}{\text{Re}} \cdot \frac{u_{j+1,k}^{n+1} - u_{jk}^{n+1}}{\Delta x},$$

$$G_{j,k+1/2}^{(1)} = 0,25 \left(v_{jk}^n + v_{j+1,k}^n\right) \cdot \left(u_{jk}^{n+1} + u_{j,k+1}^{n+1}\right) - \frac{1}{\text{Re}} \cdot \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - u_{jk}^{n+1}}{\Delta y},$$

рівняння (2.148) можна переписати у вигляді

$$\left(\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + a_{jk}^{(u)} \right) u_{jk}^{n+1} + \sum a_{nb}^{(u)} u_{nb}^{n+1} + b^{(u)} + \Delta y (p_{j+1,k}^{n+1} - p_{jk}^{n+1}) = 0, \quad (2.149)$$

де $\sum a_{nb}^{(u)} u_{nb}^{n+1}$ містить усі конвективні та дифузійні внески із сусідніх вузлів. Коефіцієнти $a_{jk}^{(u)}$ та $a_{nb}^{(u)}$ залежать від розмірів сітки і значень u та v на n -му шарі. Член $b^{(u)} = -\Delta x \Delta y u_{jk}^n / \Delta t$. Відмітимо, що деякі члени в $F^{(1)}$ і $G^{(1)}$ обчислюються на n -му шарі, унаслідок чого система (2.149) виявляється лінійною відносно u^{n+1} і може розв'язуватись методом прогонки [6].

Використовуючи контрольний об'єм, який зображено на рис. 15.5, в, дискретну форму рівняння для y -компоненти імпульсу (2.80) можна записати у вигляді

$$\left(\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \right) (v_{jk}^{n+1} - v_{jk}^n) + (F_{j+1/2,k}^{(2)} - F_{j-1/2,k}^{(2)}) \Delta y + \\ + (G_{j,k+1/2}^{(2)} - G_{j,k-1/2}^{(2)}) \Delta x + (p_{j,k+1}^{n+1} - p_{jk}^{n+1}) \Delta x = 0, \quad (2.150)$$

де

$$F^{(2)} = uv - \frac{1}{\text{Re}} \cdot \frac{\partial v}{\partial x}, \quad G^{(2)} = v^2 - \frac{1}{\text{Re}} \cdot \frac{\partial v}{\partial y}.$$

Підстановка дискретних виразів для $F^{(2)}$ та $G^{(2)}$ у рівняння (2.150) дозволяє записати його у вигляді

$$\left(\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + a_{jk}^{(v)} \right) v_{jk}^{n+1} + \sum a_{nb}^{(v)} v_{nb}^{n+1} + b^{(v)} + \Delta x (p_{j,k+1}^{n+1} - p_{jk}^{n+1}) = 0, \quad (2.151)$$

де різні коефіцієнти мають ту саму інтерпретацію, що і в рівнянні (2.149).

Ітераційна процедура SIMPLE переводить розв'язок з n -го часового шару на $(n+1)$ -й. Значення швидкості визначають у два етапи. Спочатку розв'язують рівняння імпульсу (2.149) та (2.151), у результаті чого визначають попереднє значення \vec{u}^* вектора \vec{u}^{n+1} , що ще не задовольняє рівняння нерозривності.

Використовуючи наближений розв'язок для швидкості \bar{u}^* , визначають поправку до тиску δp . Застосовуючи цю поправку, знаходять нове значення тиску $p^{n+1} = p^n + \delta p$ та поправки швидкості \bar{u}_c . Далі, враховуючи \bar{u}_c , визначають $\bar{u}^{n+1} = \bar{u}^* + \bar{u}_c$, де \bar{u}^{n+1} вже задовольняє рівняння нерозривності в дискретній формі (2.147).

Для визначення \bar{u}^* рівняння (2.149) і (2.151) апроксимують у такий спосіб:

$$\left(\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + a_{jk}^{(u)} \right) u_{jk}^* + \sum a_{nb}^{(u)} u_{nb}^* = -b^{(u)} - \Delta y (p_{j+1,k}^n - p_{jk}^n), \quad (2.152)$$

$$\left(\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + a_{jk}^{(v)} \right) v_{jk}^* + \sum a_{nb}^{(v)} v_{nb}^* = -b^{(v)} - \Delta x (p_{j,k+1}^n - p_{jk}^n). \quad (2.153)$$

Патанкар [11, 12] рекомендує для розв'язання рівнянь (2.152) та (2.153) неявний метод змінних напрямів Пісмента – Речфорда [6]. Тобто пропонується спочатку переписати їх у вигляді скалярних тридіагональних систем уздовж кожної x -лінії сітки (k – стале) і використати для їх розв'язання алгоритм прогонки Томаса [6]. А потім отриманий розв'язок підставити у ці самі рівняння, але переписані у вигляді скалярних тридіагональних систем уздовж y -ліній (j – стале), і знову їх розв'язати за алгоритмом Томаса.

Для визначення u_c рівняння (2.152) віднімають від (2.149). У результаті маємо

$$\left(\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + a_{jk}^{(u)} \right) u_{jk}^c = -\sum a_{nb}^{(u)} u_{nb}^c - \Delta y (\delta p_{j+1,k}^n - \delta p_{jk}^n). \quad (2.154)$$

Віднімання (2.153) від (2.151) дозволяє одержати аналогічне рівняння для визначення v_c . Однак, для того, щоб зробити зв'язок між \bar{u}_c та δp більш явним, в алгоритмі SIMPLE використовується для знаходження \bar{u}_c замість (2.154) простіша апроксимація:

$$u_{jk}^c = d_{jk} (\delta p_{jk}^n - \delta p_{j+1,k}^n), \quad (2.155)$$

де

$$d_{jk} = E\Delta y / \left\{ (1 + E)a_{jk}^u \right\}, \quad E = \Delta t a_{jk}^u / (\Delta x \Delta y). \quad (2.156)$$

Можна одержати аналогічні вирази і для того, щоб пов'язати v_{jk}^c з $(\delta p_{jk}^n - \delta p_{j,k+1}^n)$. Підстановка $\bar{u}_{jk}^{n+1} = \bar{u}_{jk}^* + \bar{u}_{jk}^c$ в (2.147) та використання виразу (2.155) і подібного йому для v_{jk}^c , дозволяє побудувати такий явний алгоритм для визначення δp_{jk} :

$$a_{jk}^{(p)} \delta p_{jk} = \sum a_{nb}^{(p)} \delta p_{nb} + b^{(p)}, \quad (2.157)$$

$$\text{де} \quad b^{(p)} = -\left(u_{jk}^* - u_{j-1,k}^*\right)\Delta y - \left(v_{jk}^* - v_{j,k-1}^*\right)\Delta x.$$

Зауваження. Дискретне рівняння (2.157) відповідає рівнянню Пуассона (2.146), а дискретне рівняння (2.155) еквівалентне рівнянню (2.144).

Повністю алгоритм SIMPLE складається з таких кроків:

1. Задаємо початковий розподіл тиску p^* .
2. Визначаємо попередній вектор \bar{u}^* із (2.152) та (2.153).
3. Знаходимо поправку для тиску δp із (2.157).
4. Визначаємо поправку u_c із (2.155) та еквівалентну форму для v_c .
5. Обчислюємо новий розподіл тиску p^{n+1} зі співвідношення $p^{n+1} = p^* + \alpha_p \delta p$, де α_p – релаксаційний параметр.
6. Заміняємо попередні проміжні значення тиску і компонент швидкості u^*, v^*, p^* новими скоригованими значеннями p, u, v та повертаємося до кроку 2.
7. Повторюємо процес ітерацій доти, поки розв'язок не збіжиться.

В алгоритмі SIMPLE присутні два релаксаційні параметри: α_p і $E (\equiv \Delta t)$. Розв'язання стаціонарного рівняння для імпульсу відповідає значенню $E = \infty$. У цьому випадку для стійкої збіжності рекомендується значення $\alpha_p = 0,075$. Емпірично

знайдено, що найвищу швидкість збіжності нестационарного рівняння для імпульсу маємо при $E = 1$ та $\alpha_p = 0,8$ [10, 11].

У монографії Флетчера [17] проведено систематичне дослідження алгоритмів типу SIMPLE і зроблено висновок про те, що найбільш ефективному алгоритму відповідають значення

$$E \approx 4 \text{ та } \alpha_p = 1 / (1 + E). \quad (2.158)$$

Флетчер [17] називає алгоритм, що використовує вирази (2.158), погодженим SIMPLE-алгоритмом або скорочено SIMPLEC.

Однак існують й інші інтерпретації алгоритму SIMPLEC. Основна відмінність від SIMPLE-алгоритму тут полягає в заміні виразів (2.155) на (2.154) при визначенні компонент вектора \bar{u}^c .

Безсумнівно, що таке наближення дещо підвищує вартість кожної окремої ітерації. Точніше наближення рівняння (2.154)

маємо, якщо відняти $\sum a_{nb}^{(u)} u_{jk}^c$ від обох частин рівняння й

відкинути член $\sum a_{nb}^{(u)} (u_{nb}^c - u_{jk}^c)$ у правій частині. Замість

виразу (2.155) тоді маємо

$$u_{jk}^c = d'_{jk} \left(\delta p_{jk}^n - \delta p_{j+1,k}^n \right), \quad (2.159)$$

де

$$d'_{jk} = E \Delta t / \left\{ (1 + E) a_{jk}^{(u)} - E \sum a_{nb}^{(u)} \right\}. \quad (2.160)$$

Якщо поправки \bar{u}^c повільно змінюються по простору, то

відкидання члена $\sum a_{nb}^{(u)} (u_{nb}^c - u_{jk}^c)$ призводить до незначної

помилки. Водночас вираз (2.159), будучи явним, зберігає економічність алгоритму. При виведенні рівняння Пуассона для

поправки для тиску δp у цьому випадку використовується рівняння (2.159), а не (2.155). Однак, якщо в алгоритмі SIMPLE

на четвертому кроці для визначення \bar{u}_{jk}^c використати рівняння

(2.159), то при визначенні p^{n+1} немає потреби вводити

релаксацийний параметр α_p , тобто $\alpha_p = 1$. Останнє суттєво прискорює збіжність алгоритму SIMPLEC.

Застосування алгоритму SIMPLE в оригінальному формулюванні до широкого кола задач дозволило зробити висновок про те, що введення поправки до тиску δp ефективно підбудовує поле швидкостей, але не дозволяє одержати швидку збіжність для тиску.

Для виправлення цього недоліку Патанкар [10, 11] запропонував модифікований алгоритм SIMPLER, який реалізується в такий спосіб:

1. Поле швидкостей \bar{u} визначаємо з розв'язку рівнянь (2.152)–(2.153), у яких члени з тиском виключено з правої частини.
2. Рівняння (2.157) стає рівнянням Пуассона для визначення p^{n+1} , а не δp після заміни \bar{u}^* на \bar{u} у членах b .
3. Значення p^{n+1} (знайдене на кроці 2) підставляємо замість p^n у (2.152) та (2.153). Отримані рівняння розв'язуємо за методом SIMPLE, у результаті чого маємо значення \bar{u}^* .
4. Рівняння (2.157) розв'язуємо для визначення δp , для цього обчислюємо нові значення компонент швидкості $\bar{u}^{n+1} = \bar{u}^* + \bar{u}_c$. Уточнення значення p^{n+1} , що отримане на кроці 2, не проводиться.

Очевидно, що згідно з алгоритмом SIMPLER на кожній ітерації доводиться двічі розв'язувати рівняння Пуассона і рівняння імпульсу. Проте, хоча кількість операцій на кожній ітерації тут буде більша, ніж на кожній ітерації при використанні класичного методу SIMPLE, для збіжності досить декількох ітерацій. Таким чином, алгоритм SIMPLER виявляється приблизно на 50 % ефективнішим.

Зауваження:

- *Кроки 1 і 2 в алгоритмі SIMPLER відповідають методу проєкцій, який докладно буде розглянуто в розділі 3.*
- *При порівнянні ефективності різних підходів до опису складних відривних течій необхідно також згадати **метод вихорів і особливостей** Білоцерковського [28, 35]. Згідно з цим методом поверхня, що обтікається, розбивається на*

окремі панелі, з якими пов'язують точкові вихори. Врешті-решт усе зводиться до розв'язання системи лінійних рівнянь відносно густин вихорів. Ці методи (під назвою панельних методів) уже згадувалися при розв'язанні системи рівнянь Ейлера [7], але вони з не меншим успіхом можуть використовуватись і для кількісного опису складних дво- та тривимірних відривних течій. Із цією метою за методом вихорів розраховують вихрові течії після точки відриву потоку. А необхідні для методу вихорів початкове значення циркуляції і положення точки відриву дає розв'язання рівнянь примежового шару [7]. Таким чином, для багатьох складних задач, що описуються повними рівняннями Нав'є – Стокса, немає потреби використовувати складніші сіткові методи.

Задачі

1. Побудувати програму для розв'язання системи рівнянь Нав'є – Стокса, що описує стаціонарний рух в'язкої рідини в каналі прямокутного перерізу (рис. 3-1):

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \mu \nabla^2 w, \quad (3-1)$$

із крайовими умовами

$$w = 0, \quad x = \pm a, \quad y = \pm b, \quad (3-2)$$

якщо в'язкість μ і градієнт тиску dp/dz відомі.

Уведено нові безрозмірні змінні:

$$x = \frac{\bar{x}}{a}, \quad y = \frac{\bar{y}}{b}, \quad w = -\frac{\bar{w}\mu}{b^2 dp/dz}.$$

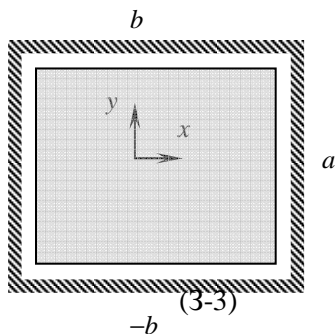


Рис. 3-1. Область течії

2. Модифікуйте програму з п. 1 для розв'язання рівняння

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial y} - \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \beta \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (3-4)$$

у прямокутнику $[0,1] \times [0,1]$ при крайових умовах

$$\varphi(x, 0) = e^{x/\alpha}, \quad \varphi(1, y) = e^{1/\alpha} e^{y/\beta}, \quad (3-5)$$

$$\varphi(0, y) = e^{y/\beta}, \quad \varphi(x, 1) = e^{1/\beta} e^{x/\alpha}.$$

Розв'язок рівняння (3-4) при крайових умовах (3-5) на сітках 6×6 , 11×11 , 21×21 порівняйте з точним розв'язком

$$\varphi(x, y) = e^{x/\alpha} e^{y/\beta}. \quad (3-6)$$

3. Використовуючи неявну схему Біма – Уормінга до рівнянь Нав'є – Стокса, розв'язати задачу про рух в'язкого газу у двогранному куті для $\mathbf{Re} = 100$.
4. Модифікуйте запропонований у п. 3 алгоритм таким чином, щоб за ним можна було б отримати розв'язок у випадку двовимірного обтікання пластинки при великих числах Рейнольдса ($\mathbf{Re} = 10^5$).
5. Модифікуйте запропонований у п. 3 алгоритм таким чином, щоб за ним можна було б отримати розв'язок задачі про обтікання прямокутного паралелепіпеда, що стоїть у центрі площини для $\mathbf{Re} = 500$.
6. Плоский ламінарний рух в'язкої рідини (вода) у квадратній порожнині розміром 1×1 м, який викликається горизонтальним рухом площини, що закриває цю порожнину (рис. 3-2) зі швидкістю $U = 0,1$ м/с, у декартових координатах описується системою повних безрозмірних рівнянь Нав'є – Стокса

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial(u\zeta)}{\partial x} + \frac{\partial(v\zeta)}{\partial y} = \frac{1}{\mathbf{Re}} \nabla^2 \zeta, \quad (3-7)$$

$$\nabla^2 \psi = -\zeta \quad (3-8)$$

відносно завихреності $\zeta = \partial v / \partial x - \partial u / \partial y$ і функції течії ψ : $\partial \psi / \partial y = u$, $\partial \psi / \partial x = -v$. Крайові умови наведено на рисунку. Знайти розв'язок системи (3-7)–(3-8), скориставшись для розв'язання рівняння (3-7) розв'язком задачі про нестационарне втікання холодної рідини у двовимірний довгий гарячий канал. Отриманий результат порівняти з результатом, що наведений Флетчером [17, рис. 17.13].

Зауваження. Рівняння (3-8) розв'язується на кожному кроці за часом.

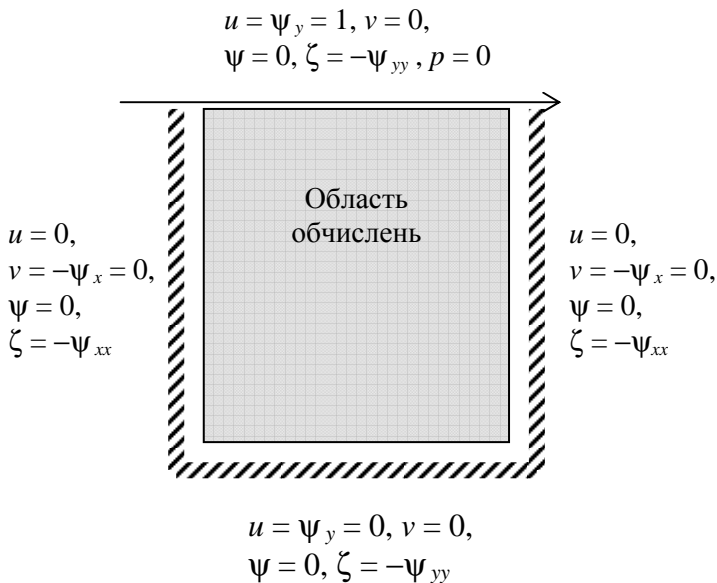


Рис. 3-2. Область течії для задачі 6.

7. Модифікувати задачу з п. 6 таким чином, щоб при виході на стаціонарний режим течії з рівняння

$$\nabla^2 p = 2\rho \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \right)^2 \right] \quad (3-9)$$

можна було б обчислити тиск у порожнині. Крайові умови для тиску: $p = 0$ на кришці та $p_s = -\mu \zeta_n$ на інших стінках порожнини. Тут s, n – паралельний і перпендикулярний до стінки напрямки відповідно.

**ОСОБЛИВОСТІ ЧИСЛОВОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ
ПОВНИХ РІВНЯНЬ НАВ'Є – СТОКСА
У ВИПАДКУ ВІЛЬНОЇ ПОВЕРХНІ**

Течія нестисливої рідини з вільною поверхнею є складовою частиною багатьох процесів, що спостерігаються у природі та техніці. Задача кількісного опису таких течій особливо ускладнюється у випадку, коли на вільній поверхні є відчутні зовнішні напруження або сама вільна поверхня має складну топологію. До подібних задач належать, наприклад, задачі математичного моделювання утворення крапель рідини під час дощу, у форсунках двигунів або струменевих принтерів; задачі математичного моделювання руху рідини у відкритій або не повністю заповненій ємності, у тому числі задачі про рух води в річках, морях, океанах та інших водоймах, рух носія і охолоджувача в гідравлічних пристроях ядерного реактора, нафтоналивних танках тощо. При моделюванні подібних течій ми маємо подолати суттєві труднощі, які виникають, як за рахунок того, що необхідна крайова умова повинна застосовуватися до перехідного процесу, так і через те, що вільна поверхня має нерегулярну природу, тобто є ідеальним розривом. Наявні при цьому зовнішні напруження, що виникають за рахунок сил поверхневого натягу і гравітації, також додатково зменшують необхідну точність обчислень.

3.1. Метод об'ємів рідини (VOF)

Розглянемо докладно алгоритм VOF (volume-of-fluid), що є числовим методом Ейлера, який призначений для розв'язання задач гідродинаміки нестисливої в'язкої рідини з вільною поверхнею¹.

¹ Метод реалізовано в пакеті RIPPLE [59], що належить до вільного програмного забезпечення.

3.1.1. Фізична модель

Основна система рівнянь складається з рівняння нерозривності

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (3.1)$$

і векторного рівняння імпульсу

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V}\vec{V}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \underline{\tau} + \vec{g} + \frac{1}{\rho} \vec{F}_b. \quad (3.2)$$

Тут \vec{V} – швидкість рідини з компонентами $\{u, v\}$, ρ – густина, p – тиск, $\underline{\tau}$ – тензор в'язких напружень, \vec{F}_b – архімедова сила і \vec{g} – прискорення вільного падіння. Нелінійний адвективний член записано в консервативній формі. Тензор в'язких напружень для ньютонівської рідини має вигляд

$$\underline{\tau} = 2\mu \underline{S}, \quad \underline{S} = \frac{1}{2} \left[(\nabla \vec{V}) + (\nabla \vec{V})^T \right], \quad (3.3)$$

де \underline{S} – тензор швидкостей деформацій; μ – коефіцієнт динамічної в'язкості.

3.1.1.1. Рівняння руху вільної поверхні

Для того щоб уникнути топологічних обмежень, пов'язаних із моделюванням руху вільної поверхні з використанням часток Лагранжа в методі PIC [55] або із застосуванням невагомих часток, які поєднує сила поверхневого натягу у методі MAC [17], для моделювання руху вільної поверхні користуватимемося методом об'ємів рідини VOF. Цей метод вперше запропоновано Хіртом і Ніколсом [56]. Він є потужним методом Ейлера, призначеним для моделювання руху вільної поверхні сумісно з методом сіток у випадку, коли вільна поверхня довільно орієнтована щодо клітинок розрахункової сітки. При використанні методу VOF точне зображення вільної поверхні не зберігається, а характерний рух вільної поверхні відслідковується за рахунок розв'язання рівняння перенесення для VOF-функції F :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) F = 0. \quad (3.4)$$

Тут $F(\vec{x}, 0)$ – початкова геометрія вільної поверхні. Згідно запропонованому алгоритму $F = 1$ у рідині, $F = 0$ – на повітрі та $0 < F < 1$ на вільній поверхні. Оскільки інформацію про вільну поверхню містить лише функція F , її й використовують для реконструкції положення вільної поверхні в наступний момент часу.

Відновлена вільна поверхня зазвичай не є неперервною, а являє собою набір похилих відрізків, які розміщуються послідовно у клітинках розрахункової сітки, для яких $0 < F < 1$. Нахил кожного відрізка залежить від значення функції F у сусідніх клітинках сітки.

Зауваження:

- Рівняння (3.4) є лінійним рівнянням перенесення. А, оскільки згідно з теоремою Годунова будь-яка скінченнорізницева схема порядку вище першого є немонотонною, це рівняння має дисперсійний характер. Особливо великі коливання розв'язку відбуваються в тих вузлах сітки, де функція F має великі градієнти.
- Стандартна дискретизація адвективного члена (центральні різниці або апроксимація за схемою донорських клітинок (donor cell)) призводить до неприпустимих коливань функції F . Отже, при реконструкції вільної поверхні веде до її нефізичних збурень.
- VOF-алгоритм використовує особливу дискретизацію адвективного члена рівняння (3.4), яка дозволяє уникнути великих градієнтів для функції F . Особливості дискретизації розглядатимуться далі.

3.1.1.2. Крайові умови на вільній поверхні

Поверхневі напруження на вільній поверхні подамо відповідно до моделі CSF. Модель CSF – це новий підхід до дискретного зображення поверхневих напружень, який ідеально

працює на сітках Ейлера довільної топології. Подробиці числової реалізації моделі CSF наведено в роботі [59].

Згідно з VOF-алгоритмом в'язкими ефектами на вільній поверхні нехтують, коефіцієнт поверхневого напруження σ вважається сталим, а дотичні компоненти поверхневої сили перетворюються на нуль. Таким чином, крайова умова для напруження на вільній поверхні зводиться до формули Лапласа:

$$p_s \equiv p - p_v = \sigma \kappa, \quad (3.5)$$

де p_s – тиск на поверхні, що утворений стрибком тиску між рідиною і повітрям; p_v – тиск повітря; κ – середня кривина вільної поверхні:

$$\kappa = -(\nabla \cdot \hat{n}) = \frac{1}{|\vec{n}|} \left[\left(\frac{\vec{n}}{|\vec{n}|} \cdot \nabla \right) |\vec{n}| - (\nabla \cdot \vec{n}) \right]. \quad (3.6)$$

Тут \hat{n} – одинична нормаль до поверхні:

$$\hat{n} = \vec{n}/|\vec{n}|, \quad (3.7)$$

що визначається через вектор нормалі до вільної поверхні, який, у свою чергу, визначається через градієнт до вільної поверхні

$$\vec{n} = \nabla F. \quad (3.8)$$

Оскільки кривина поверхні κ пропорційна другій похідній VOF-функції F , поверхнева сила надзвичайно чутлива до будь-яких помилок в обчисленні F . Проте використання CSF-моделі гарантує регулярніші еволюції поверхні рідини.

Згідно з CSF-моделлю поверхневі напруження перетворюються на об'ємні сили, що задовольняють рівняння

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Delta V} \vec{F}_{sv}(\vec{x}) d^3x = \int_{\Delta S} \vec{F}_{sa}(\vec{x}_s) dS, \quad (3.9)$$

де \vec{x}_s – точка на поверхні, $\vec{F}_{sa}(\vec{x}_s)$ – сила поверхневого напруження на одиницю крайової області:

$$\vec{F}_{sa}(\vec{x}_s) = \sigma \kappa(\vec{x}_s) \cdot \hat{n}(\vec{x}_s). \quad (3.10)$$

Тут h – довжина, що має порядок кроку сітки δx . Інтеграл по області поверхні ΔS лежить у межах малого об'єму інтегрування ΔV . При скінченнорізницевій апроксимації вільної поверхні подібний підхід дозволяє замінити розривну поведінку всіх властивостей рідини, у тому числі її "колір", на вільній поверхні

на їх досить неперервну поведінку в межах деякої скінченної товщини $\sim O(h)$. Об'ємна сила, яка відмінна від нуля лише в межах вільної поверхні, задається відповідно до моделі CSF у вигляді

$$\vec{F}_{sv}(\vec{x}) = \sigma \kappa(\vec{x}_s) \cdot \nabla \tilde{c}(\vec{x}) / [c], \quad (3.11)$$

де \tilde{c} – колір рідини, що відповідає тут VOF-функції F ; $[c]$ – стрибок кольору, який дорівнює 1, якщо $\tilde{c} \equiv F$.

***Зауваження.** Більш загальна функція кольору \tilde{c} тут вводить замість VOF-функції F для спрощення обчислень у випадку, коли вільна поверхня є поверхнею розділу двох рідин, що мають однакову густину.*

Таке визначення об'ємної сили $\vec{F}_{sv}(\vec{x})$ дозволяє враховувати вплив поверхневих напружень на вільній поверхні через об'ємну силу в рівнянні (3.2), тобто вважати, що

$$\vec{F}_b = \vec{F}_{sv}(\vec{x}). \quad (3.12)$$

Отже, сила $\vec{F}_{sv}(\vec{x})$ є звичайною об'ємною силою, що діє на будь-яке наявне в рідині тіло.

Таким чином, замість сили тиску на вільній поверхні (поверхневої сили), що потерпає від розриву при перетинанні вільної поверхні, у рівняння (3.2) вводиться об'ємна сила, яка діє на рідкі елементи, що розташовані вже в межах скінченних об'ємів, які замінюють розриви. А отже, при перетинанні вільної поверхні зберігається неперервність усіх характеристик рідини.

3.1.1.3. Крайові умови на стінці

Прилипання рідини до стінки в точці контакту вільної поверхні та стінки обумовлене поверхневими силами, що діють на рідину біля стінки, яка у найпростішому випадку вважається жорсткою і нерухомою. Ці сили можна обчислити подібно до того, як розраховувалися поверхневі сили на вільній поверхні, за винятком того, що одинична нормаль до вільної поверхні \hat{n} із крайових умов тут обчислюється раніше, ніж сила $\vec{F}_{sv}(\vec{x})$ із рівняння (3.11).

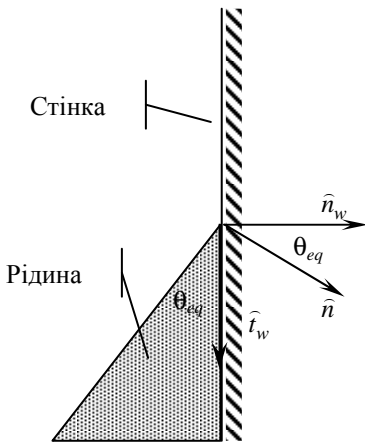


Рис. 3.1. До визначення кута між вільною поверхнею рідини й жорсткою стінкою

Зауважимо, що сили, які відповідають за прилипання рідини до жорсткої стінки, діють лише безпосередньо біля точки контакту стінки й вільної поверхні, тобто, ця сила обчислюється як $\vec{F}_{sv}(\vec{x}_w)$.

Крайова умова на жорсткій стінці в точці її контакту з вільною поверхнею залежить від одиничної нормалі до вільної поверхні \hat{n} , яка згідно з рис. 3.1 визначається таким чином:

$$\hat{n} = \hat{n}_w \cos \theta_{eq} + \hat{t}_w \sin \theta_{eq}. \quad (3.13)$$

Тут θ_{eq} – сталий контактний кут між вільною поверхнею і жорсткою стінкою; \hat{n}_w – направлений до стінки одиничний вектор нормалі у точці \vec{x}_w ; \hat{t}_w – одиничний вектор дотичної до стінки. У рівнянні (3.13) використано геометричну ідентичність визначення кута θ_{eq} (рис. 3.1): з одного боку, як сталого контактного кута між рідиною і стінкою (\hat{t}_w), а з другого боку – $\theta_{eq} = \angle(\hat{n}_w, \hat{n})$. Величину одиничного вектора нормалі \hat{n} , що направлений у бік рідини, можна обчислити з рівняння (3.7).

Зауваження:

- Величина кута θ_{eq} не є властивістю рідини, але безпосередньо залежить від поведінки рідини біля жорсткої стінки.
- Кут θ_{eq} можна визначити експериментально для рідини, що перебуває у стані спокою.
- Рівняння (3.13) застосовується для розрахунку нормалі до жорсткої стінки лише у випадку, коли відома величина $\theta_{eq} \neq 0$.

3.1.1.3. Течія навколо перешкоди

Перешкода течії рідини моделюється як особливий випадок двофазного потоку рідини, в якому перша фаза – це сама рідина, що має об'ємне відношення Θ , а друга "фаза" – перешкода з об'ємним відношенням $(1 - \Theta)$. Перешкода визначається як "рідина", що має нескінченну густину й нульову швидкість. Оскільки всі обчислення виконуються в системі координат, яка пов'язана з перешкодою, то перешкоди нерухомі, а об'ємне відношення Θ – незалежне від часу скалярне поле, $\Theta = \Theta(\vec{x})$, тобто є функцією кроку сітки:

$$\Theta(\vec{x}) = \begin{cases} 1, & \text{у рідині;} \\ 0, & \text{у перешкоді.} \end{cases} \quad (3.14)$$

Функція об'ємного відношення Θ , яка носить назву "прапора присутності рідини" і визначена в (3.14), є ідеальною тільки у випадку, коли зовнішня межа перешкоди повністю збігається з вузлами розрахункової сітки. У загальному випадку межа перешкоди може проходити довільно через клітинки сітки, перетинаючи їх зовнішню межу між вузлами. В останньому випадку значення Θ неперервно змінюється в інтервалі між 0 та 1, тобто насправді є "прапором зайнятості клітинки сітки". А величина $1 - \Theta$ являє собою об'єм клітинки, який займає перешкода.

3.1.2. Числова модель

Алгоритм VOF-методу використовує апроксимацію вихідних рівнянь за методом об'ємів на рознесеній сітці. Введення рознесеної розрахункової сітки, клітинки якої мають шаховий порядок, припускає, що x - та y -компоненти швидкості визначаються в центрах відповідних бічних поверхонь клітинки сітки, а тиск і VOF-функція F розраховуються в центрі клітинки. Згідно з рис. 3.2 дискретні значення тиску p_{jk} і VOF-функції F_{jk} визначаються в точці $\{x_{j-1/2} + \delta x_j / 2, y_{k-1/2} + \delta y_k / 2\}$.

Рівняння (3.1) та (3.2) розв'язують у скінченнорізницевій формі за двокроковим методом проєкції. На першому кроці виконують дискретизацію рівняння (3.2) за часом:

$$\frac{\bar{\bar{V}} - \bar{V}^n}{\delta t} = -\nabla \cdot (\bar{V}\bar{V})^n + \frac{1}{\rho^n} \nabla \cdot \tau^n + \bar{g}^n + \frac{1}{\rho^n} \bar{F}_b^n. \quad (3.15)$$

На другому кроці розв'язують систему двох різницевих рівнянь

$$\frac{\bar{V}^{n+1} - \bar{\bar{V}}}{\delta t} = -\frac{1}{\rho^n} \nabla p^{n+1}, \quad (3.16)$$

$$\nabla \cdot \bar{V}^{n+1} = 0. \quad (3.17)$$

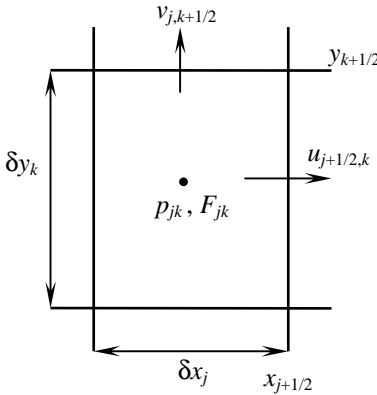


Рис. 3.2. Схема обчислення змінних

На першому кроці векторне поле швидкості обчислюється при відомих із попереднього кроку значеннях поля швидкості \bar{V}^n , тензора в'язких напружень τ^n , гравітаційних \bar{g}^n і об'ємних сил \bar{F}_b^n . На другому кроці це векторне поле швидкості проєктується на векторне поле, що є його нульовою дивергенцією.

Два рівняння на другому кроці можна скомбінувати в одне рівняння Пуассона для тиску (PPE):

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho^n} \nabla p^{n+1} \right] = \frac{\nabla \cdot \bar{\bar{V}}}{\delta t}. \quad (3.18)$$

Зауваження. Звернемо увагу на таке. Хоча розглядається випадок нестисливої рідини, для якої густина стала, густина в рівнянні (3.18) міститься всередині оператора дивергенції. Останнє веде до появи додаткового члена в (3.18), що

пропорційний $\nabla\rho$, і сприяє розв'язанню рівняння для тиску та поза межами вільної поверхні, де $\nabla\rho \neq 0$.

3.1.2.1. Апроксимація члена з адвекцією

Для апроксимації адвективного члена в рівнянні імпульсів скористаємося методом скінченних об'ємів. Нехай V_{cv} – контрольний об'єм, тоді, скориставшись теоремою Гаусса – Остроградського і подаючи інтеграл по області V_{cv} у дискретній формі у вигляді суми по всіх поверхнях (s), що оточують контрольний об'єм, адвективний член у рівнянні (3.15) представимо у вигляді

$$\int_{V_{cv}} \nabla \cdot (\vec{V}\vec{V}) dV = \sum_s \langle \vec{V} \rangle_s (\vec{V}_s \cdot \hat{n}_s) \delta \vec{A}_s \cdot \hat{n}_s. \quad (3.19)$$

Тут на кожній поверхні \vec{V}_s – швидкість, \hat{n}_s – одинична зовнішня нормаль до поверхні (s), а площа поверхні (s) обчислюється у вигляді $\delta A_s = \delta \vec{A}_s \cdot \hat{n}_s$. Потік швидкості через поверхню (s) записано як $\vec{V}_s \cdot \hat{n}_s$. Отже, об'ємний потік має вигляд $(\vec{V}_s \cdot \hat{n}_s) \delta A_s \delta t_{adv}$, де δt_{adv} – крок адвективного часу. Член у кутових дужках $\langle \vec{V} \rangle_s$, являє собою потік швидкості для адвекції імпульсу при сталій густині. Член із підсумовуванням в рівнянні (3.19) при інтегруванні по контрольному об'єму в напрямку осі Ox набуває вигляду

$$\left[r_{j+1}^\delta \langle u \rangle_R u_{fl\ j+1,k} - r_j^\delta \langle u \rangle_L u_{fl\ j+1,k} \right] \delta y_k + \left[\langle u \rangle_T v_{fl\ j+1,k+1/2} - \langle u \rangle_B v_{fl\ j+1/2,k-1/2} \right] \delta x_{j+1/2}.$$

Тут радіус r^δ представляє собою константу, що дорівнює 1 в циліндричній і 0 в декартовій системі координат. Члени в кутових дужках, тобто члени типу $\langle u \rangle_R$, при апроксимації донорської клітинки представляються або центральними різницями, або різницями вгору за потоком за схемою ван-Ліра другого порядку точності [20]. Можливе також використання

комбінованої схеми, подібної тій, що використовувалася при розрахунках примежового шару [7].

Зауваження. Алгоритм ван Ліра [20] дає на практиці кращі результати, бо дозволяє зберегти монотонність і для схем другого порядку.

Скінченнорізницевий оператор адвекції для k -ї компоненти в рівнянні (3.2) можна записати у вигляді

$$\bar{L}_k(\vec{V}) = \frac{\delta t_{adv}}{V_{cvk}} \sum_s \langle \vec{V} \rangle_s (\vec{V}_s \cdot \vec{n}_{sk}) \delta \bar{A}_s \cdot \vec{n}_{sk}, \quad (3.20)$$

де V_{cvk} – це або x -компонента $V_{cvx} = r_{j+1/2}^\delta \delta x_{j+1/2} \delta y_k$, або y -компонента $V_{cvy} = r_j^\delta \delta x_j \delta y_{k+1/2}$. Використовуючи цей оператор, крок за часом для адвективного члена в рівнянні (3.15) можна переписати так:

$$\vec{V}^{n+1} = \vec{V}^n - \bar{L}_x \bar{L}_y \bar{L}_y \bar{L}_x (\vec{V}^n). \quad (3.21)$$

Крок за часом, що використовується при обчисленні рівняння (3.19), розбивається, таким чином, на чотири окремі одновимірні кроки, на кожному з яких δt_{adv} складає 1/2 від загального кроку за часом¹. При цьому загальна точність апроксимації рівняння (3.19) за часом $\sim O(\delta t^2)$.

3.1.2.2. Розв'язання рівняння для тиску

Скінченнорізницева апроксимація рівняння (3.18) зводить його до системи лінійних алгебраїчних рівнянь у матричному вигляді

$$M \vec{p} = \vec{b}, \quad (3.22)$$

де \vec{b} – відомий вектор; $\vec{p} = \{p_m^{n+1}\}$, $m = \overline{1, N_m}$ – вектор невідомих значень тиску в клітинках сітки; N_m – загальна кількість

¹ Розглянута явна схема з розщепленням за часом подібна до схеми Мак-Кармака (див. пункт 2.1.1).

внутрішніх точок сітки. Матриця M – стрічкова симетрична позитивно визначена і легко розв'язувана методом спряжених градієнтів ICCG [6]. Останнє дозволяє отримати для кожного моменту часу t^{n+1} тиск у кожній клітинці сітки, незважаючи на те, що ця клітинка представляє: рідину, поверхню, повітря або перешкоду. Останнє задовольняється врахуванням у запису основних рівнянь величини α / ρ , яка має різні значення для клітинок, що містяться в межах перешкоди, повітря або вільної поверхні.

3.1.2.3. Розв'язання рівняння адвекції для VOF-функції

Рівняння (3.4) представляє собою лінійне рівняння перенесення (адвекції) для VOF-функції F , що пов'язана з відновленням форми вільної поверхні за алгоритмом Хірта – Ніколса [56]. Вільна поверхня відновлюється для кожної клітинки сітки або в горизонтальному, або у вертикальному напрямку у вигляді відрізка, що має нахил залежно від значення VOF-функції F у сусідніх клітинках сітки. Для розв'язання рівняння (3.4) пропонується двокрокова процедура типу предиктор-коректор. На першому кроці отримуємо проміжне значення VOF-функції

$$\tilde{F} = F^n - \delta t \nabla \cdot (\vec{V} F^n), \quad (3.23)$$

яке коригується на другому кроці

$$F^{n+1} = \tilde{F} - \delta t (\nabla \cdot \vec{V}) F^n. \quad (3.24)$$

Рівняння (3.23) дискретизується теж за методом скінченних об'ємів:

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{jk} = & F_{jk}^n - \frac{\delta t}{r_j^\delta \delta x_j} \left[r_{j+1/2}^\delta u_{j+1/2,k}^{n+1} \langle F \rangle_R - r_{j-1/2}^\delta u_{k-1/2,j}^{n+1} \langle F \rangle_F \right] - \\ & - \frac{\delta t}{\delta y_j} \left[v_{j,k+1/2} \langle F \rangle_T - v_{j,k-1/2} \langle F \rangle_B \right]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Тут індекси B, T, L і R, означають величини, що взяті відповідно вниз, угорі, на лівій і на правій стороні клітинки (j,k) . Адвекція

VOF-функції обчислюється в момент часу t^{n+1} в кінці кожного $(n + 1)$ -циклу, завершуючи другий крок методу проєкції. Величини VOF-функції в кутових дужках у (3.25) визначаються на межах сусідніх клітинок. Ці величини потрібно розраховувати наново при відновленні форми вільної поверхні.

Розглянемо як приклад вираз для $\langle F \rangle_R$ при $u_{j+1/2,k}^{n+1} > 0$. Тоді VOF-функція, що обчислюється на правій стороні клітинки (j,k) , є сумою величини $F_{jad,k}$, що розташована вгору за потоком, і приросту VOF-функції δF :

$$\langle F \rangle_R = F_{jad,k} + \delta F, \quad (3.26)$$

де приріст VOF-функції

$$\delta F = \begin{cases} 0, & \omega = 0 \vee \omega > |u_{j+1/2,k}^{n+1} \delta t|; \\ (F_{jdm,k} - F_{ja,k}) \left(1 - \frac{\omega}{|u_{j+1/2,k}^{n+1} \delta t|} \right), & 0 < \omega < |u_{j+1/2,k}^{n+1} \delta t| \end{cases} \quad (3.27)$$

залежить від відносної величини "ширини порожнини" ω , яка відмінна від нуля лише у випадку, коли відновлена поверхня паралельна напрямку адвекції

$$\omega = \left(\frac{F_{jdm,k} - F_{jd,k}}{F_{jdm,k} - F_{ja,k}} \right) \delta x_j. \quad (3.28)$$

Згідно із запропонованою процедурою індекс (jd) означає клітинку донора, (ja) – клітинку акцептора (одержувача) та (jdm) – клітинку донора мінус одиниця. Ці індекси відповідають індексам (j) , $(j + 1)$ та $(j - 1)$. Подібні вирази можна записати для $\langle F \rangle_L$, $\langle F \rangle_T$ та $\langle F \rangle_B$.

3.1.2.3. Особливості числової реалізації CSF-моделі

Безпосереднє порівняння CSF моделі з іншими популярними моделями [1, 17, 20] указує на те, що VOF-реконструкція вільної поверхні при використанні CSF-моделі набагато точніша [59]. Пов'язано це з тією обставиною, що об'ємна сила, побудована згідно з CSF-моделлю, змушує вільну поверхню набути такої

конфігурації, щоб для неї поверхневі сили мали мінімальну енергію. Водночас за рахунок похибок округлення та інших числових похибок при обчисленні тиску на вільній поверхні інші алгоритми реконструкції вільної поверхні часто призводять до нефізичних коливань вільної поверхні або навіть до її розривів. Тобто, використовуючи CSF-модель разом із VOF-реконструкцією вільної поверхні, маємо алгоритм майже без топологічних обмежень, що особливо важливо при розрахунках перекидання хвилі. Крім того CSF-модель має досить просту числову реалізацію, бо напруженість на вільній поверхні включається до рівняння імпульсу як додаткова об'ємна сила \vec{F}_{sv} , час обчислення якої складає лише декілька відсотків від комп'ютерного часу, необхідного для розрахунку поверхневих сил.

Уведено згідно з CSF-моделлю об'ємну силу \vec{F}_{sv} досить просто обчислити за умови, що відомі другі похідні по простору від VOF-функції F . У кожній точці в межах вільної поверхні величина \vec{F}_{sv} при сталому коефіцієнті σ пропорційна кривині (κ) VOF-поверхні, яка визначається через вектор нормалі в цій точці.

Компоненти вектора нормалі \vec{n} у точці $(j+1/2, k+1/2)$, згідно з рівнянням (3.8), визначають таким чином:

$$n_x = \frac{(F_{j+1,k+1} - F_{j,k+1})\delta y_k + (F_{j+1,k} - F_{j,k})\delta y_{k+1}}{(\delta y_k + \delta y_{k+1})\delta x_{j+1/2}} \quad (3.29a)$$

та

$$n_y = \frac{(F_{j+1,k+1} - F_{j+1,k})\delta x_j + (F_{j,k+1} - F_{j,k})\delta x_{j+1}}{(\delta x_j + \delta x_{j+1})\delta y_{k+1/2}}. \quad (3.29b)$$

Кривина обчислюється через просторові похідні від одиничної нормалі \hat{n} , яка двічі входить у праву частину рівняння (3.6). А похідні від \hat{n} легко визначаються через нормалі \vec{n} на бічних сторонах клітинки. Маємо

$$\left(\frac{\partial n_x}{\partial x}\right)_{jk} = \frac{1}{2\delta x_j} \left[n_{x\ j+1/2,k+1/2} + n_{x\ j+1/2,k-1/2} - n_{x\ j-1/2,k+1/2} - n_{x\ j-1/2,k-1/2} \right], \quad (3.30a)$$

$$\left(\frac{\partial n_x}{\partial y}\right)_{jk} = \frac{1}{2\delta y_k} \left[n_{x\ j+1/2,k+1/2} + n_{x\ j-1/2,k+1/2} - n_{x\ j+1/2,k-1/2} - n_{x\ j-1/2,k-1/2} \right]. \quad (3.30б)$$

Нормаль у центрі клітинки є середньою величиною нормалей на бічних сторонах клітинки

$$\bar{n}_{jk} = \frac{1}{4} (\bar{n}_{j+1/2,k+1/2} + \bar{n}_{j+1/2,k-1/2} + \bar{n}_{j-1/2,k+1/2} + \bar{n}_{j-1/2,k-1/2}). \quad (3.31)$$

Визначимо тепер у центрі клітинки (j,k) вектор \vec{F}_{sv} , що необхідний для обчислення прискорення рідини за рахунок напружень на вільній поверхні. Компоненти на бічних поверхнях отримуємо шляхом інтерполяції цих компонент у двох сусідніх клітинках. Маємо для x -компоненти на правій стороні клітинки (j,k) :

$$F_{svx\ j+1/2,k} = \frac{\delta x_j \cdot F_{svx\ j+1,k} + \delta x_{j+1} \cdot F_{svx\ j,k}}{\delta x_j + \delta x_{j+1}} \quad (3.32a)$$

і для y -компоненти на верхній стороні клітинки (j,k) :

$$F_{svy\ i,j+1/2} = \frac{\delta y_i \cdot F_{svy\ i,j+1} + \delta y_{j+1} \cdot F_{svy\ i,j}}{\delta y_j + \delta y_{j+1}}. \quad (3.32б)$$

Компоненти в центрі клітинки (j,k) обчислюємо за схемою

$$\begin{aligned} F_{svx\ j+1/2,k+1/2} &= \frac{1}{2} (F_{svx\ j+1/2,k+1} + F_{svx\ j+1/2,k}), \\ F_{svy\ j+1/2,k+1/2} &= \frac{1}{2} (F_{svy\ j+1,k+1/2} + F_{svy\ j,k+1/2}), \end{aligned} \quad (3.33)$$

а потім використовуємо для розрахунку прискорення рідини з рівняння

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = \vec{F}_{sv}, \quad (3.34)$$

розв'язання якого завершує перший крок методу проєкції.

Зауваження:

- Якщо коефіцієнт поверхневого напруження σ не є константою, наприклад, за присутності поверхнево-активних речовин або за наявності температурних градієнтів, то навіть у цьому випадку модель CSF дає досить пристойні результати.
- Модель CSF легко поширюється як на випадок трьох вимірів, так і на випадок мультифазних рідин.

3.1.2.4. Крайова умова прилипання до твердої стінки

Крайову умову прилипання до твердої стінки в рівнянні (3.2) можна застосувати лише до розрахунку одиничних нормалей до вільної поверхні, які містяться у вершинах клітинки розрахункової сітки. Таким чином, межі вільної поверхні і твердої стінки "змушені" завжди збігатися з межами клітинки розрахункової сітки. Це, уводить похибку для тих клітинок, що містять внутрішню тверду межу перешкоди, яка не збігається з лінією сітки. У прикладі на рис. 3.3 видно, що стінка перетинає клітинку.

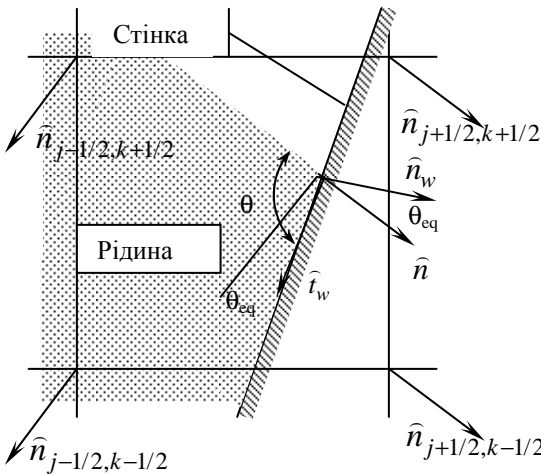


Рис. 3.3. Приклад обчислення сили прилипання на межі вільної поверхні та твердої стінки.

У цьому випадку $\sqrt{2}/2 < \vec{n}_w \cdot \vec{i} < 1$ й, оскільки, згідно з рисунком, стінка міститься із "правої сторони", то рівняння (3.13) застосовне лише до двох нормалей у $(j + 1/2)$ -вершинах. Подібним чином, для стінки з "лівої сторони" – до

двох $(j - 1/2)$ -вершин; для стінки "зверху" – до двох $(k + 1/2)$ -вершин, а для стінки "знизу" – до двох $(k - 1/2)$ -вершин. Унаслідок застосування рівняння (3.13) у ситуації, що зображена на рис. 3.3, нормаль до вільної поверхні \vec{n} скоріше матиме значення, що розраховане з умови статичного контакту зі стінкою (утворює кут θ_{eq}), а не значення, що було б розраховане згідно з VOF-функцією (утворює кут θ). Різниця між цими значеннями веде до появи сильної локальної об'ємної сили $\vec{F}_{sv}(\vec{x}_w)$, що приводить поверхню рідини до більш урівноваженої конфігурації ($\theta \rightarrow \theta_{eq}$), після чого сила $\vec{F}_{sv}(\vec{x}_w)$ стає набагато меншою. Таке поведіння сили прилипання на межі вільної поверхні та твердої стінки дозволяє правильно оцінити її знак, але може призвести до помилок в оцінці її величини, особливо у випадку, якщо стінка займає більшу частину пристінної клітинки розрахункової сітки.

3.2. Метод гідродинаміки згладжених частинок (SPH)¹

3.2.1. Постановка задачі

Нехай рух в'язкої ньютонівської рідини в деякій області Ω описується

рівняннями Нав'є – Стокса

$$\rho \frac{dv^a}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x^a} + \frac{\partial}{\partial x^b} (\mu \epsilon_{ab}) + \rho F^a, \quad (3.35)$$

рівнянням нерозривності

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (3.36)$$

та рівнянням стану

$$p = p(\rho). \quad (3.37)$$

Тут верхні та нижні індекси $\{a, b = 1, 2 \text{ (2D)} \text{ або } a, b = 1, 2, 3 \text{ (3D)}\}$ пов'язані з координатними напрямками x, y, z відповідно;

¹ Метод реалізовано в пакеті SPHYSICS [49], що належить до вільного програмного забезпечення.

$\vec{v} = \{v^a\}$ – компоненти вектора швидкості; p , μ , ρ – тиск, коефіцієнт динамічної в'язкості та густина рідини відповідно; F^a – компоненти вектора зовнішніх масових сил; $\varepsilon_{ab} = \frac{\partial v^a}{\partial x^b} + \frac{\partial v^b}{\partial x^a} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \delta_{ab}$ – компоненти тензора швидкостей деформації; δ_{ab} – дельта Кронекера.

3.2.2. Дискретизація основних рівнянь

Розглянемо коротко особливості методу SPH [25, 30, 31, 49, 51, 64–66, 75, 77, 80]. Скористаємося підходом Лагранжа і моделюватимемо рідину ансамблем взаємодіючих "рідких"

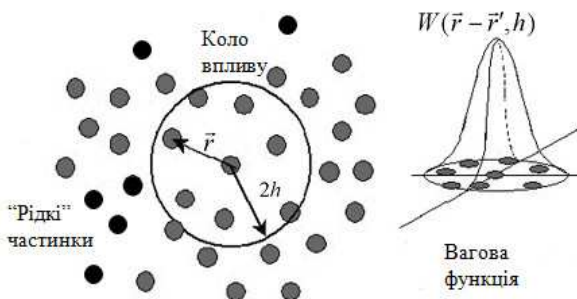


Рис. 3.4. Коло впливу частинки і вигляд інтерполяційного ядра (вагова функція) [64].

частинок. Введемо довжину згладжування $h = \{1, 2 \div 1, 4\} \Delta r$, де Δr – початкова відстань між частинками. Обмежимося спочатку двовимірним рухом рідини. Якщо навколо кожної індивідуальної частинки описати коло радіусом $2h$, тоді тільки всередині цього кола заходяться частинки, які можуть взаємодіяти з центральною частинкою (рис. 3.4).

Нехай A – деяка скалярна функція. За методом SPH дискретизація основних рівнянь за просторовими змінними заснована на такій інтегральній інтерполяції

$$\langle A(\vec{r}) \rangle = \int_{\sigma} A(\vec{r}') W(\vec{r} - \vec{r}', h') \cdot d\vec{r}' . \quad (3.38)$$

Тут $W(\vec{r} - \vec{r}', h')$ – інтерполяційне ядро; h' – масштаб згладжування для довільної частинки з області σ .

Зображаючи інтеграл у (3.38) у вигляді інтегральної суми, маємо

$$A(\vec{r}_i) = \sum_{j=1}^n A_j \frac{M_j}{\rho_j} W_{ij} . \quad (3.39)$$

Тут \vec{r}_i , M_i , ρ_i – радіус-вектор, маса та густина i -частинки відповідно; n – кількість "рідких" частинок; $A_j = A(\vec{r}_j)$; $W_{ij} = W(\vec{r}_j - \vec{r}_i, h_i)$ – неперервна або кусково-неперервна вагова функція особливого вигляду (див. рис. 3.4), що також називається інтерполяційним ядром [64].

Використовуючи властивості ядра, запишемо частинні похідні за просторовими змінними:

$$\nabla A_i = \sum_j \frac{M_j}{\rho_j} A_j \nabla_j W_{ij} . \quad (3.40)$$

Отже, інтерполяційна процедура за методом SPH полягає в тому, що за рахунок взаємодії тільки сусідніх частинок, усі члени в рівняннях (3.35)–(3.36) зображають у вигляді (3.39) або (3.40). Тобто основні рівняння набувають такого вигляду:

рівняння нерозривності

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_j M_j (\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot \nabla_i W_{ij} ; \quad (3.41)$$

рівняння Нав'є – Стокса

$$\frac{d v_i^a}{dt} = - \sum_j M_j \left(\frac{p_i + p_j}{\rho_i \rho_j} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^a} + \Pi_{ij}^{ab} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^b} \right) + F_i^a ; \quad (3.42)$$

рівняння стану

$$p(\rho) = P_0 \left[(\rho/\rho_0)^{\gamma} - 1 \right] ; \quad (3.43)$$

рівняння Лагранжа для визначення нового положення частинки

$$\frac{d r_i^a}{d t} = v_i^a + \omega \sum_j M_j \left(\frac{v_{ji}^a}{\bar{\rho}_{ij}} \right) W_{ij}. \quad (3.44)$$

В'язкий член для рівняння (3.42) у загальному випадку має вигляд:

$$\Pi_{ij}^{ab} = \left[\mu_i \varepsilon_i^{ab} + \mu_j \varepsilon_j^{ab} \right] / (\rho_i \rho_j), \quad (3.45a)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_i^{ab} = & \sum_j \frac{M_j}{\rho_j} v_{ji}^b \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^a} + \sum_j \frac{M_j}{\rho_j} v_{ji}^a \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^b} - \\ & - \left(\frac{2}{3} \sum_j \frac{M_j}{\rho_j} v_{ji}^a \cdot \nabla_i W_{ij} \right) \delta_{ab}, \end{aligned} \quad (3.45b)$$

де $v_{ji}^a = v_j^a - v_i^a$, $\bar{\rho}_{ij} = (\rho_i + \rho_j)/2$; ω – параметр релаксації ($0 \leq \omega \leq 1$); γ – політропний індекс у рівнянні стану: $\gamma = \gamma_a = 1,4$ для повітря та $\gamma = \gamma_w = 7$ для води.

Нехай ρ_0 – деяка початкова густина рідини¹. Якщо вважати рідину "трішки стисливою", то початковий тиск P_0 буде пов'язаний зі швидкістю звуку в рідині (c_s):

$$c_s = \sqrt{\gamma P_0 / \rho_0}. \quad (3.46)$$

Рівняння стану (3.43) для "рідкої" частинки набуває вигляду

$$p_i = B \left[\left(\frac{\rho_i}{\rho_0} \right)^7 - 1 \right]^{1/7}, \quad (3.47)$$

де $B = c_s^2 \rho_0 / 7$, $\rho_0 = 1000 \text{ кг/м}^3$. Для моделі SPH, яка розглядається, вважатимемо, що $c_s \approx 10 u_{\max}$, де u_{\max} – це максимальна швидкість "рідкої" частинки [64]. Якщо при цьому в модель входить гідростатичний тиск, то початковий розподіл густини знаходять із рівняння стану (3.43) у вигляді:

$$\rho_i = \rho_0 \left(1 + [\rho_0 g (d - x_2^i)] / B \right)^{1/7}. \quad (3.48)$$

¹ Індекс 0 тут і далі вказує, що параметр перебуває у стані спокою або на нескінченності.

Тут d – початковий рівень рідини, x_2^i – вертикальна координата частинки. Інші параметри в рівнянні (3.48) ті самі, що й у рівнянні (3.47).

Оскільки зрозуміло, що довжина згладжування h має ключову роль для моделі SPH, зробимо деякі попередні зауваження щодо її перевизначення у процесі розрахунків:

- якщо h стає дуже малою, n також мала, а отже, результат стає неточним;
- якщо h стає дуже велика, локальна інформація згладжується.

Зауваження. Довжину згладжування h можна вважати сталою при повільній зміні густини (тобто для крапельних рідин) і не можна вважати сталою при суттєвих змінах густини (тобто для газів). Для останнього випадку маємо:

1. На початку обчислення ($t = 0, m = 0$):

$$\sum_{j=1}^{N_i^0} M_j = \frac{4}{3} \pi (h_i^0)^3 \rho_i^0. \quad (3.49)$$

2. Перевизначення у процесі обчислення ($t > 0, m > 0$):

$$\begin{aligned} \frac{d h_i^m}{d t} &= - \frac{h_i^m}{n_{\text{dim}} \rho_i^m} \frac{d \rho_i^m}{d t} = \\ &= - \frac{h_i^m}{n_{\text{dim}} \rho_i^m} \sum_{j=1}^{N_i^m} M_j (v_i^m - v_j^m) \cdot \nabla_i^m W_{ij}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Тут n_{dim} – розмірність задачі; N_i^m – кількість пар частинок, що взаємодіють, у процесі розрахунків; N_i^0 – початкова кількість частинок, що взаємодіють.

3.2.3. Особливості постановки крайових умов

Постановка крайових умов для моделі SPH ускладнена через те, що:

- межі області визначаються наближено;
- інтерполяційне ядро на межах області не визначене.

I. Крайові умови на поверхні тіла

- 1) Вводяться фантомні (рис. 3.5) частинки Такеди [49, 51, 64, 65], тиск (p_g), координати (x_g) та швидкість (\vec{v}_g) яких визначається із співвідношень:

$$\begin{aligned} x_g &= x_b + x_{ij}; x_{ij} = x_i - x_j; \\ \vec{v}_g &= 2\vec{v}_b + \vec{v}_{ij}; \vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j; p_g = p_j. \end{aligned} \quad (3.51)$$

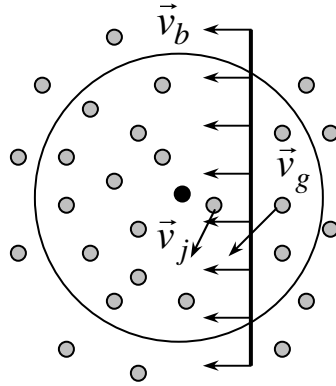


Рис. 3.5. До постановки крайових умов із використанням фантомних частинок [49]

- 2) Вводиться ланцюжок нерухомих примежових частинок (рис. 3.6), які взаємодіють з оточуючими "рідкими" частинками через репульсивні сили [51, 64, 65]:

$$f(r_{ij}) = \begin{cases} D_c \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^4 \right] \frac{x_{ij}}{r_{ij}^2}, & r_{ij} \leq r_0; \\ 0, & r_{ij} > r_0. \end{cases} \quad (3.52)$$

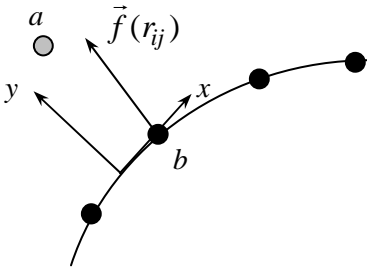


Рис. 3.6. До постановки крайових умов із використанням репульсивних сил [64]

Тут $r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$ – відстань між "рідкою" (a) і примежевою (b) частинками. Лінійний масштаб r_0 покладено рівним початковій відстані між частинками (Δr). Параметр D_c має розмірність m^2/c^2 , а отже, має той самий масштаб, що й gd (тут d – початковий рівень рідини).

- 3) Вводиться подвійний ланцюжок нерухомих "псевдорідких" частинок (рис. 3.7), що взаємодіють з оточуючими "рідкими" частинками за звичайними законами [49, 64, 65].

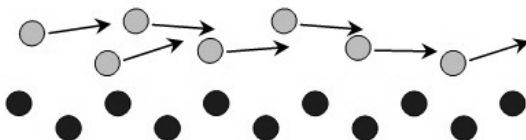


Рис. 3.7. До постановки крайових умов із використанням подвійного ланцюжка "псевдорідких" частинок

II. Крайові умови на вільній поверхні

Положення вільної поверхні визначається зі співвідношення $\rho(x) > 1/2 \rho_{water}$ (рис. 3.8), де

$$\rho(x) = \sum_j \rho_j W(x - x_j) V_j = \sum_j \rho_j. \quad (3.53)$$

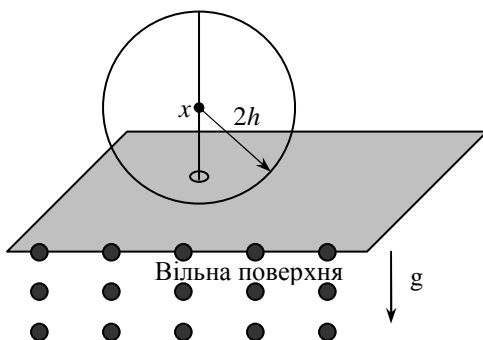


Рис. 3.8. До визначення положення вільної поверхні [64]

Крайові умови виконуються на вільній поверхні автоматично [64].

III. Періодичні крайові умови

На рис. 3.9 маємо приклад задання періодичних крайових умов у вертикальному напрямку. Розглянемо спочатку частинки, які містяться на відстані $2h$ від верхньої поверхні, на якій задано періодичні крайові умови. Згідно з рис. 3.9 кожену частинку (i) та частину її кола впливу, що виходить за межі верхньої поверхні області розрахунків, потрібно періодично перенести на нижню поверхню області розрахунків. Практично це виконується введенням додаткової фантомної частинки біля нижньої поверхні, параметри якої повністю збігаються з параметрами частинки (i), а положення по вертикалі переноситься періодично з верхньої поверхні. Аналогічно біля верхньої поверхні будуються фантомні частинки для тих частинок, що розміщені на відстані $2h$ від нижньої поверхні області розрахунків.

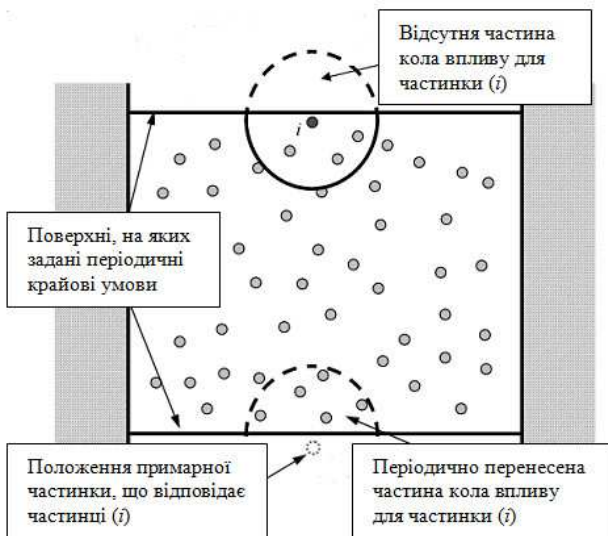


Рис. 3.9. Реалізація періодичних крайових умов [49]

3.2.4. Розв'язання основної системи рівнянь

Алгоритм SPH дозволяє звести початкову систему рівнянь в частинних похідних до системи звичайних диференціальних рівнянь для кожної індивідуальної "рідкої" частинки. Отримана система рівнянь може бути зінтегрована за часом стандартною процедурою, наприклад, за схемами Рунге – Кутта (RK), предиктор-коректор (PC), "чехарда" Дюфорта – Франкела (LF) тощо. Для розрахунків за часом тут використовується метод "чехарда". Вибір методу пов'язаний із тим, що для нього умова Куранта – Фрідріхса – Леві виконується автоматично. Водночас при використанні інших методів необхідно задовольнити CFL-умову, яка згідно із зауваженням Монахана в цьому випадку має вигляд [64, 65]:

$$\Delta t \leq \min \left(\min_i \left(0,4 \frac{h_i}{c_s (1 + 0,6\alpha)} \right), \min_i \left(0,25 \left(\frac{h_i}{G_i} \right)^{1/2} \right) \right). \quad (3.54)$$

Тут c_s – швидкість звуку, що використовується в даній моделі, α – коефіцієнт ефективної (або уявної) в'язкості; G_i – максимальна зовнішня сила для частинки, віднесена до її маси.

У двовимірній моделі SPH ми маємо лише п'ять незалежних змінних: густина ρ , швидкість \vec{v} і положення \vec{r} частинки відповідно. Тиск p у моделі SPH не є незалежною змінною, бо визначається з рівняння стану (3.43) через густину. Отже, як показано вище, на кожному кроці за часом для кожної частинки (i) необхідно розв'язати систему з п'яти звичайних диференціальних рівнянь:

$$\frac{dp^i}{dt} = f_1(\tilde{u}_1^i, \tilde{u}_2^i, x_1^i, x_2^i), \quad (3.55)$$

$$\frac{dv_a^i}{dt} = f_2^a(\rho^i, v_1^i, v_2^i, x_1^i, x_2^i), \quad (3.56)$$

$$\frac{dx_a^i}{dt} = \tilde{u}_a^i, \quad a = 1, 2. \quad (3.57)$$

Тут \tilde{u}_a^i – a -компонента вектора швидкості частинки, підправлена згідно з процедурою XSPH [49], v_a^i – a -компонента вектора швидкості частинки з рівняння (3.42). Функції f_k ($k = 1, 2$) представляють праву частину рівнянь (3.41) і (3.42) відповідно.

При інтегруванні системи рівнянь (3.55)–(3.57) скористаємося модифікованою схемою "чехарда" (LF), яка тут складається із двох кроків. Спочатку на першому кроці визначаємо попереднє значення густини ρ^{*n} і компонентів швидкості v_a^{*n} :

$$\rho^{*n} = \rho^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{2} \cdot f_1(\tilde{u}_1^{*n-1}, \tilde{u}_2^{*n-1}, x_1^{n-1}, x_2^{n-1}); \quad (3.58)$$

$$v_a^{*n} = v_a^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{2} \cdot f_2^a(\rho^{*n-1}, v_1^{*n-1}, v_2^{*n-1}, x_1^{n-1}, x_2^{n-1}), \quad a = 1, 2.$$

Тут \tilde{u}_a права частина рівняння (3.57). Потім для густини, компонентів швидкості та координат нового положення частинки виконується другий крок:

$$\rho^{n+1/2} = \rho^{n-1/2} + \Delta t \cdot f_1(\tilde{u}_1^n, \tilde{u}_2^n, x_1^n, x_2^n); \quad (3.60)$$

$$v_a^{n+1/2} = v_a^{n-1/2} + \Delta t \cdot f_2^a(\rho^{*n}, v_1^{*n}, v_2^{*n}, x_1^n, x_2^n); \quad (3.61)$$

$$x_a^{n+1} = x_a^n + \Delta t \cdot \tilde{u}_a^{n+1/2}, \quad a = 1, 2. \quad (3.62)$$

Запропонована модифікована схема "чехарда" (LF) дозволяє отримати розв'язок за часом із другим порядком точності, тобто $\sim O(\Delta t^2)$.

Зуваження. Оскільки компоненти вектор-функції f_2^a є компонентами прискорення "рідкої" частинки у кожний момент часу, тоді a -компоненти головного вектора сили \vec{F}_n , що діє на берегову споруду (перешкоду) у даний момент часу, знаходять з узагальненого II закону Ньютона

$$F_n^a = \sum_k^{N^a(t)} M_k \{f_2^a\}_k. \quad (3.63)$$

Тут M_k – маса "рідкої" частинки; $N^d(t)$ – кількість "рідких" частинок, що взаємодіють з a -поверхнею перешкоди у даний момент часу.

3.2.5. Розрахунки в'язкості

I. В'язкий член з уявною в'язкістю

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} -\frac{\alpha h_{ij} c_{ij}}{\bar{\rho}_{ij}} \cdot \frac{(\vec{v}_{ij}, \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^2 + \varphi^2} & (\vec{v}_{ij}, \vec{r}_{ij}) < 0; \\ 0 & (\vec{v}_{ij}, \vec{r}_{ij}) \geq 0, \end{cases} \quad (3.64)$$

де α – константа ($0,01 \leq \alpha \leq 2$); $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$ – вектор різниці швидкостей і $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ – вектор різниці радіусів-векторів двох частинок; член із $\varphi = 0,1 h_{ij}$ додано, щоб запобігти утворенню сингулярності, коли відстань між частинками прямує до нуля ($h_{ij} \rightarrow 0$); $\bar{\rho}_{ij} = (\rho_i + \rho_j)/2$, $c_{ij} = ((c_s)_i + (c_s)_j)/2$; $h_{ij} = (h_i + h_j)/2$; $(\vec{a}, \vec{b}) = \sum_k a_k b_k$. Вираз $\alpha h_{ij} c_{ij}$ тут називають уявною (ефективною) в'язкістю. Отже, α – коефіцієнт уявної (ефективної) в'язкості.

II. В'язкий член із ламінарною в'язкістю

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} -\frac{\beta \cdot v_0}{\bar{\rho}_{ij}} \cdot \frac{(\vec{v}_{ij}, \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^2 + \varphi^2} & (\vec{v}_{ij}, \vec{r}_{ij}) < 0; \\ 0 & (\vec{v}_{ij}, \vec{r}_{ij}) \geq 0. \end{cases} \quad (3.65)$$

Якщо член з уявною в'язкістю із (3.64) підставити в повне рівняння Нав'є – Стокса (3.35), то коефіцієнт кінематичної в'язкості v_0 виявляється пропорційним $\alpha h c_s$, тобто $v_0 = \alpha h c_s / \beta$. Згідно з даними різних джерел $\beta \approx 2$ [49] або $\beta \approx 8$ [51]. Проте автором цього посібника показано, що насправді тут $\beta \approx 16$ або навіть $\beta \approx 17$ [30].

III. В'язкий член із турбулентною в'язкістю

Ефективна в'язкість (3.64) є найпростішою моделлю, що дозволяє безпосередньо враховувати турбулентність потоку. Використання ефективної в'язкості в методі SPH дозволяє досить адекватно розраховувати більшість течій рідини з вільною поверхнею [49, 51]. Проте при розв'язанні деяких задач, наприклад, при моделюванні руху об'єктів, що швидко плавають, а також при розрахунках впливу хвиль на перешкоду [30, 66, 75], використання моделі ефективної в'язкості у кількісних розрахунках може призвести до суттєвих помилок. У таких випадках аналогічно в'язкому члену з ламінарною в'язкістю вводять в'язкий член із турбулентною в'язкістю:

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{\beta \cdot (v_0 + \{\bar{v}_t\}_{ij})}{\bar{\rho}_{ij}} \cdot \frac{(\bar{v}_{ij}, \bar{r}_{ij})}{\bar{r}_{ij}^2 + \phi^2} & (\bar{v}_{ij}, \bar{r}_{ij}) < 0; \\ 0 & (\bar{v}_{ij}, \bar{r}_{ij}) \geq 0 \end{cases} \quad (3.66a)$$

або

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} -\left(\frac{|I_{2\tau}|_i}{\rho_i^2} + \frac{|I_{2\tau}|_j}{\rho_j^2} \right) & (\bar{v}_{ij}, \bar{r}_{ij}) < 0; \\ 0 & (\bar{v}_{ij}, \bar{r}_{ij}) \geq 0. \end{cases} \quad (3.66b)$$

Тут $|I_{2\tau}| = (2\tau_{ab}\tau_{ab})^{1/2}$ – другий інваріант тензора напружень.

3.2.6. Особливості врахування турбулентності

В'язкий член із турбулентною в'язкістю дозволяє розглядати рівняння Нав'є – Стокса, як рівняння Рейнольдса для осереднених швидкостей, для яких згідно з моделлю вихрової в'язкості (SPS) досить просто знайти компоненти тензора напружень Рейнольдса $\tau = \{\tau_{ab}\}$ [49]:

¹ Риска зверху над v_t тут указує, що ця величина розраховується як середня по сусідніх частинках.

$$\frac{\tau_{ab}}{\bar{\rho}} = 2\bar{v}_t \varepsilon^{ab} - \frac{2}{3} k \delta_{ab}. \quad (3.67)$$

Тут коефіцієнт кінематичної турбулентної в'язкості v_t має вигляд

$$\{\bar{v}_t\}_{ij} = (C_{sm} \cdot h_{ij})^2 |I_{2\varepsilon}|, \quad (3.68)$$

де $C_{sm} = 0,12 \div 0,15$ – константа Смагорінського [72]; $|I_{2\varepsilon}| = (2\varepsilon^{ab} \varepsilon^{ab})^{1/2}$ – другий інваріант тензора швидкостей деформації.

Турбулентну кінетичну енергію (k) у виразі (3.67) також можна розрахувати за моделлю SPS:

$$k = v_t^2 / (C_v h)^2, \quad (3.69)$$

де константа $C_v = 0,08$.

Зуваження. В'язкий член Π_{ij} є інваріантним щодо повороту системи координат.

3.2.7. Швидкі алгоритми сортування і пошуку сусідніх частинок та основний алгоритм методу SPH

Очевидно, що найбільше часу при розрахунках за методом SPH витрачається на пошук взаємодіючих частинок. Прямий алгоритм пошуку вимагає виконання приблизно N_p^2 операцій. Водночас запропоновані швидкі алгоритми дозволяють суттєво скоротити час розрахунків [30, 49].

Отже, нехай N_p загальна кількість частинок (сума "рідких", "псевдорідких", примежових і фантомних частинок). Нехай ефективний радіус взаємодії окремої частинки дорівнює $D = 2h$. Тоді у двовимірному випадку реальну розрахункову область накриваємо прямокутною областю, яка поділена на квадрати розміром $D \times D$ – клітинкова сітка (рис. 3.10). Нехай N_c – максимальна кількість частинок у клітинці клітинкової сітки. Уведемо новий сортувальний масив $CELL(0 : N_c, 1 : N_x, 1 : N_y)$. Тут N_x, N_y – кількість клітинок клітинкової сітки в напрямках Ox та Oy , відповідно. Тоді маємо:

$$N_x = \mathbf{int}((X_{\max} - X_{\min}) / D) + 1; \quad N_y = \mathbf{int}((Y_{\max} - Y_{\min}) / D) + 1;$$

$$N_c = \max(20, N_x * N_y).$$

Наведемо для кожного кроку за часом двокроковий сортувальний алгоритм.

I. Попереднє сортування

Спочатку покладемо $CELL = 0$. Далі для кожної pos -частинки з N_p необхідно виконати таке.

1. Знайти індекси (i, j) , для яких кожна pos -частинка потрапляє у клітинку (i, j) :

$$i = \mathbf{int}((X(pos) - X_{\min}) / D) + 1;$$

$$j = \mathbf{int}((Y(pos) - Y_{\min}) / D) + 1.$$

2. Записати позицію pos -частинки до масиву $CELL$ і відповідно збільшити на одиницю значення першого індексу в масиві $CELL$:

$$k = CELL(0, i, j); \quad k = k + 1;$$

$$CELL(k, i, j) = pos; \quad CELL(0, i, j) = k.$$

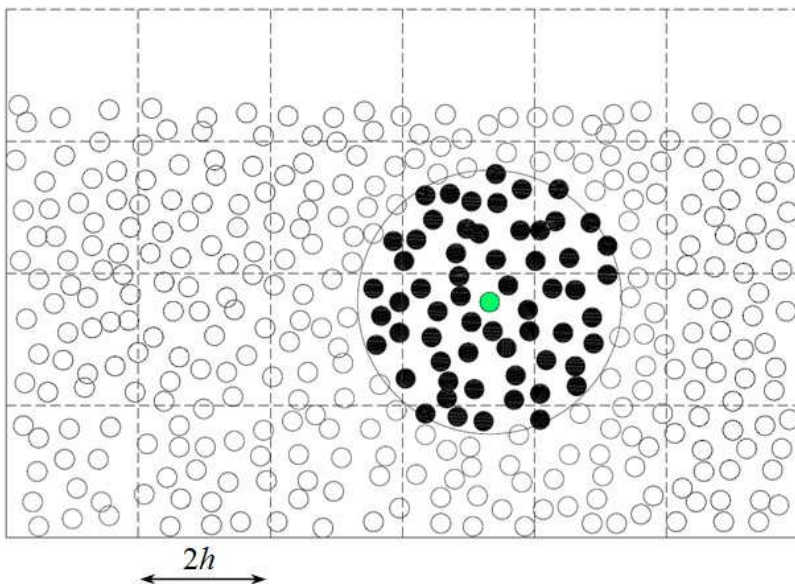


Рис. 3.10. Клітинкова сітка

¹ Тут і далі функція $\mathbf{int}()$ вказує на виділення цілої частини числа.

II. Основне сортування

Запускаємо основний цикл:

Для кожної pos -частинки з N_p виконати таке:

1. Визначити позицію "основної" клітинки (i_c, j_c) :
$$i_c = \mathbf{int}((X(pos) - X_{\min}) / D) + 1;$$
$$j_c = \mathbf{int}((Y(pos) - Y_{\min}) / D) + 1.$$
2. Визначити сусідні клітинки:
$$i = i_c + \{-1, 0, +1\}; \quad j = j_c + \{-1, 0, +1\}.$$
3. Якщо індекси (i, j) не виходять за межі клітинкової сітки $[N_x, N_y]$, то для кожної k -частинки з масиву $CELL(k, i, j)$ виконати переприсвоєння $pos_new = CELL(k, i, j)$.
4. Якщо $(pos_new > pos)$ та відстань між pos_new -частинкою і pos -частинкою менша ніж D , виконати процедуру SPH.

Згідно із запропонованим алгоритмом для перебору всіх пар взаємодіючих частинок необхідно $Z_p = 9 N_p / (N_x N_y)$ операцій. До того ж, якщо D достатньо мале, а добуток $N_x \times N_y$ достатньо великий, то величина Z_p суттєво менша ніж N_p^2 .

***Зауваження.** Запропонований швидкий алгоритм є найпростішим для розуміння, хоч і не є оптимальним. Основна причина – масив CELL має дуже неоптимальну структуру, тому потрібні дуже великі ресурси комп'ютера.*

Розглянемо тепер подібний попередньому, але менш ресурсномісткий ланцюжковий алгоритм швидкого сортування [30]. Згідно з цим алгоритмом для визначення, які саме частинки перебувають у сусідніх клітинках, як і для наведеного вище алгоритму, потрібно провести попереднє сортування частинок. Зауважимо, що з погляду ефективності числової процедури вигідніше сортувати адреси координат, а не самі координати. Попереднє адресне сортування виконується за таким алгоритмом. Спочатку вводимо два допоміжні сортувальні масиви: масив заголовків H , розмірністю $N_x \times N_y$, і ланцюжковий масив LL , розмірністю N_p . Перед початком сортування ці масиви потрібно обнулити і для кожної частинки виконати такі дії:

1. Визначити клітинку клітинкової сітки q , де перебуває частинка.

2. Додати частинку (i) у заголовок списку для клітинки q :

$$LL(i) = H(q), \quad H(q) = i;$$

Після проведеного сортування номер першої частинки, що перебуває у клітинці q , можна визначити як $i = H(q)$, а всі наступні частинки можна перебирати, користуючись співвідношенням $i = LL(i)$, доти, поки отриманий номер частинки не стане рівним нулю. У такий спосіб можна визначити всі частинки, що перебувають у клітинці q . Після зміни частинками свого положення (на наступному кроці за часом) необхідно знову обнулити сортувальні масиви і повторити процедуру сортування.

Основна перевага ланцюжкового методу сортування полягає в тому, що замість тривимірного масиву, в якому більшість елементів дорівнює нулю, тут користуються двома суттєво меншими за розміром одновимірними масивами, що в результаті дає дуже велику економію пам'яті комп'ютера.

Авторам роботи [49] вдалося ще більше вдосконалити наведений вище ланцюжковий алгоритм швидкого сортування.

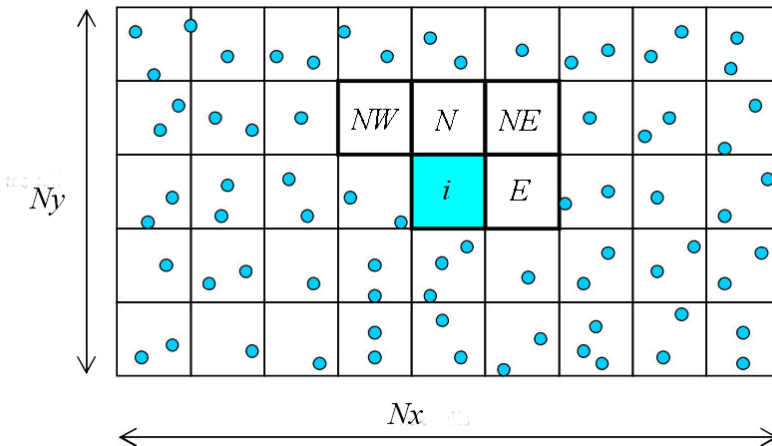


Рис. 3.11. Нова 2D-процедура обходу клітинкової сітки [49]

Запропоновано нову процедуру обходу клітинкової сітки (рис. 3.11). Замість перебирання всіх восьми клітинок навколо

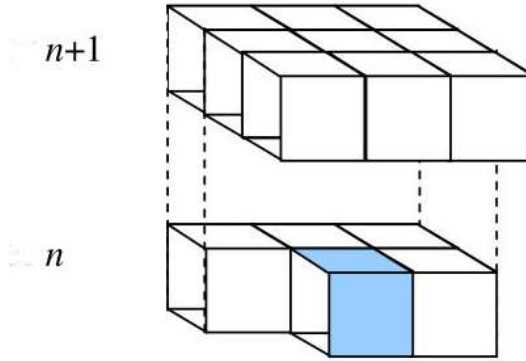


Рис. 3.12. Нова 3D-процедура обходу клітинкової сітки [49]

(i) клітинки, пропонується обхід чотирьох із них, як це видно з рис. 3.11. Отже, кількість варіантів перебирання зразу зменшується удвічі. Особливо ефективна ця процедура для тривимірного випадку (рис. 3.12).

Типова процедура методу SPH включає:

1. *Модуль ініціалізації* читає із зовнішнього файлу інформацію про початковий розподіл "рідких" і псевдорідких частинок усередині розрахункової області та примезових і псевдорідких частинок на зовнішніх межах цієї області, а також про властивості вказаних частинок, про величину початкового кроку за часом та іншу інформацію, що необхідна для розв'язання задачі. Для побудови початкового розподілу частинок, як правило, використовується зовнішня програма.
2. *Основний модуль* включає основні модулі SPH, у тому числі, якщо це потрібно, модуль обчислення нового кроку за часом. Оскільки для знаходження значень основних невідомих на новому кроці за часом у даному випадку використовується схема "чехарда" Дюфорта – Франкела (LF), яка є абсолютно збіжною, немає необхідності обчислення нового кроку за

часом. Модуль інтегрування за часом включає такі процедури:

2.1. Генерація примежових (віртуальних або фантомних) частинок.

2.2. Попереднє сортування частинок.

2.3. Знаходження всіх пар взаємодіючих частинок. Цей модуль може включати також процедуру обчислення нових значень довжини згладжування для кожної частинки (якщо це потрібно).

2.4. Корекція значень густини.

2.5. Обчислення в'язкого члена, що враховує вплив реальної або уявної в'язкості. Тут також може міститися процедура обчислення турбулентної в'язкості.

2.6. Розрахунок парних сил взаємодії між частинками різного типу. У цьому місці з рівняння стану можна знайти тиск.

2.7. Обчислення впливу зовнішніх сил на частинки, якщо це необхідно.

2.8. Знаходження моментів і густини частинок на новому кроці за часом.

2.9. Корекція довжини згладжування, якщо це необхідно.

2.10. Корекція моментів і густини частинок; процедура корекції позицій частинок та їх швидкості; якщо необхідно, процедура перевірки законів збереження маси й моментів.

2.11. Корекція крайових умов.

2.12. Обчислення сили, що діє на перешкоду.

3. *Модуль виведення.* Коли час інтегрування закінчується, а також у відповідні моменти часу у процесі інтегрування, отримані результати записують у зовнішні файли для подальшої обробки.

3.2.9. Розв'язання тестових прикладів

3.2.9.1. Течія Пуазейля та Куетта

Як тестові задачі спочатку розглянемо розвиток течії між двома паралельними площинами, $y = 0$ та $y = l$, під дією сталої поздовжньої сили (течія Пуазейля) або за рахунок миттєвого

руху площини $y=l$ (течія Куетта) зі сталою швидкістю U_0 . Початковий профіль швидкості – нульовий. Профіль швидкості в довільний момент часу можна знайти з рівнянь Нав'є – Стокса. Точний розв'язок у рядах для обох задач у довільний момент часу наведено в монографії Лью [25].

Нескінченність зовнішньої межі в напрямку потоку задають із використанням періодичних крайових умов, до яких належать параметри задач та кількість частинок:

$$20 \cdot 41 = 820 \text{ частинок, } \Delta r = 2.5 \cdot 10^{-5} \text{ м;}$$

$$\text{довжина згладжування } h = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{ м;}$$

уявна в'язкість $\alpha = 1,95$; течія ламінарна;

початкові умови: $u = 0, v = 0$.

Після 12000 кроків ($t = 0,6 \text{ s}$) в обох випадках досягається стаціонарний стан. На рис. 3.13 *a, б* показано швидкості рідких частинок у моменти часу $t = 0,01 \text{ с}$ (ромби); $0,1 \text{ с}$ (квадрати); $0,6 \text{ с}$ (трикутники). Точні розв'язки нанесено неперервними лініями. Відхилення числових розв'язків від точних не більше $0,25 \div 0,3 \%$.

Із цих тестових задач робимо висновок про те, що, хоча при використанні уявної в'язкості не використовуються другі похідні швидкості, SPH-модель дає потрібний профіль швидкості з достатньою точністю.

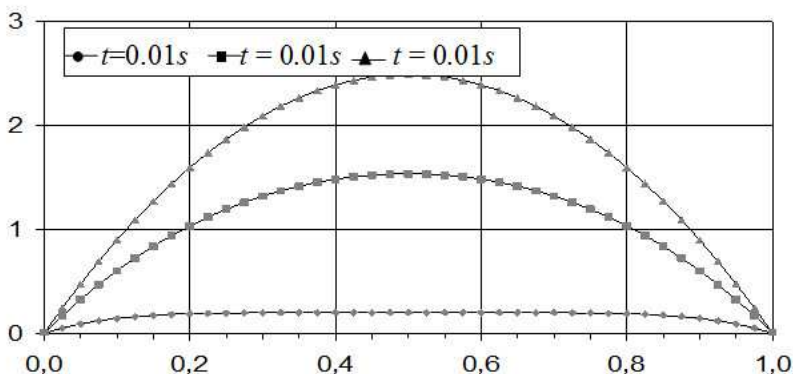


Рис. 3.13а. Профілі швидкості для течії Пуазейля у моменти часу $t = 0,01; 0,1; 0,6 \text{ с}$

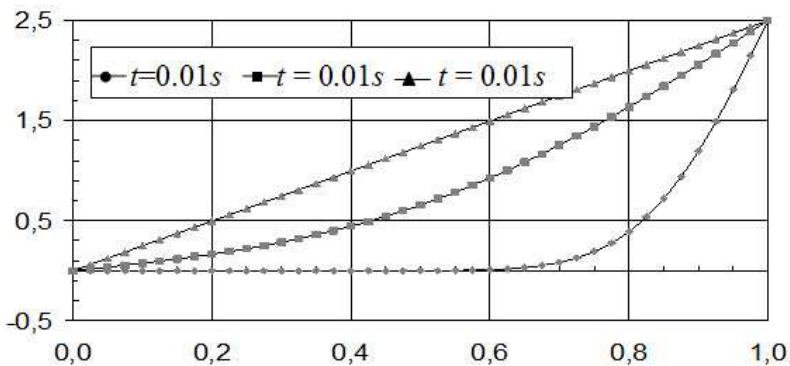


Рис. 3.136. Профілі швидкості для течії Куетта у моменти часу $t = 0,01; 0,1; 0,6$ с

3.2.9.2. Набігання хвиль на платформу

Руйнівна дія штормової хвилі пов'язана, в основному, з її підйомною силою (uplift force). Ця дія підйомної сили хвиль на берегові споруди, такі як прибережні дороги і мости (рис. 3.14),



Рис. 3.14. Результат дії хвиль у дельті Міссісіпі під час урагану Катерина (2005)

термінали LNG, тимчасові будівельні риштування в гавані та біля пірсів, бурові платформи тощо, несе великі економічні збитки. Для розрахунку дії підйомної сили хвиль на прибережні структури найчастіше використовували емпіричні й експериментальні методи [75]. Серед небагатьох числових методів, які лише останнім часом почали застосовувати для оцінювання впливу хвиль на структури типу пірса можна згадати напіваналітичний метод Каплана [58], VOF- [75] та SPH-алгоритми [31, 49, 75].

У процесі розв'язання задач руху рідини виникає потреба в обчисленні місцевого тиску на тверду поверхню. Один із можливих підходів запропоновано в роботі [66]:

$$\langle P(\vec{r}) \rangle_i = \sum_j P(\vec{r}_j) W(\vec{r}_j - \vec{r}_i, h_i) \omega_j. \quad (3.70)$$

При оцінюванні локального тиску в даній точці M його значення отримуємо осередненням значень тиску від частинок SPH у примезовій зоні навколо точки M . Отже, локальний тиск у точці M визначаємо за формулою

$$P_M = \int_{S_{sensor}} P ds / \int_{S_{sensor}} ds. \quad (3.71)$$

Вираз (3.71) апроксимується з використанням формули трапецій. Маємо

$$P_M = \sum_i P_i dS_i / \sum_i dS_i. \quad (3.72)$$

Оскільки поле тиску розглядається не точно на межі області, а поблизу від неї, то виникають похибки, зокрема, у значенні гідростатичної компоненти тиску. Тому вираз для P_i має такий вигляд [66]:

$$P_i = P_i - \rho_i g (x_2^i - x_2^j). \quad (3.73)$$

Підйомна сила хвиль визначається за формулою

$$F = \sum_i P_i dS_i. \quad (3.74)$$

Розглянемо *модельну задачу* про набігання регулярних (або нерегулярних) хвиль на платформу. Обчислення проводять у прямокутній області $[17 \times 1,2 \text{ м}]$. Генерує хвилі на лівій межі

вертикальний хвилепродуктор. Для гасіння хвиль праворуч розміщена похила ділянка (берег). Між крайнім лівим положенням хвилепродуктора та початком похилої ділянки відстань 6 м. Глибина потоку 0,8 м. Положення платформи зображено на рис. 3.15.

Параметри задачі та кількість частинок:
 84800 рідких частинок, 1901 примежова частинка;
 1781 частинка з фіксованим просторовим положенням,
 40 частинок перешкоди; ліва межа: хвилепродуктор;
 права межа: похилий берег із кутом нахилу $\alpha_0 = 4,2364^\circ$;
 течія турбулентна (модель SPS); початкові умови: $u = 0, v = 0$.

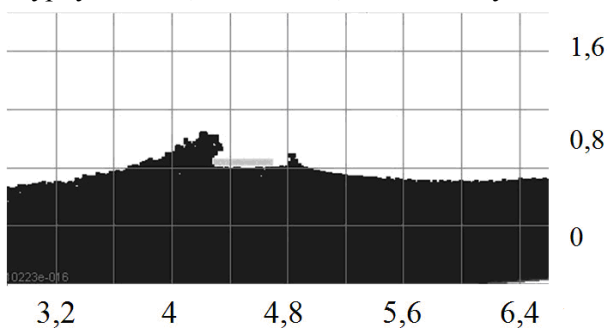


Рис. 3.15. Набігання хвилі на платформу

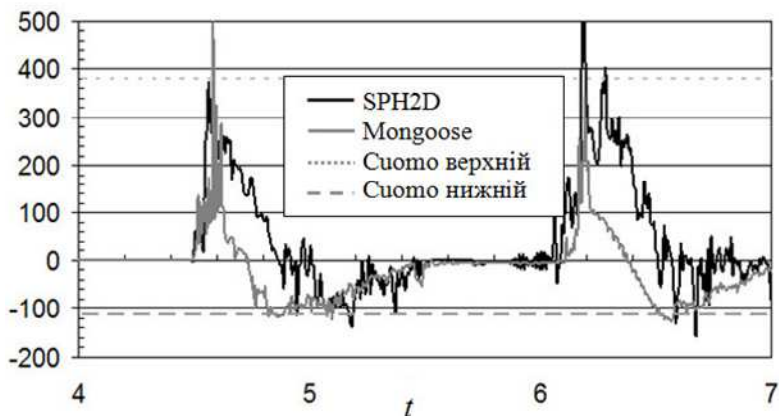


Рис. 3.16. Результати розрахунків дії підйомної сили хвиль на горизонтальну платформу

На рис. 3.15 зображено кадр мультимедійного фільму у момент набігання хвилі на платформу. На рис. 3.16 зображено розраховані значення дії підйомної сили хвиль на платформу для різних моментів часу (SPH2D). На цьому самому рисунку наведено дані експериментів Куомо (Cuomo impact & downward) та дані розрахунків Тіринделлі за VOF-алгоритмом [49, 75].

Задачі

1. Використовуючи VOF-алгоритм, розв'язати задачу про розрив в'язкого струменя. Побудувати графіки й мультиплікацію.

Зауваження. Скористатися пакетом **RIPPLE**.

2. Модифікуйте запропонований у задачі 1 алгоритм таким чином, щоб за ним можна було б отримати розв'язок задачі про рух ракетного палива у замкненій ємності. Побудувати графіки й мультиплікацію.
3. Модифікуйте запропонований у задачі 1 алгоритм таким чином, щоб за ним можна було отримати розв'язок задачі у випадку наповнення замкненого резервуару струменем в'язкої рідини. Побудувати графіки й мультиплікацію.
4. Використовуючи VOF-алгоритм, розв'язати задачу про падіння водяної дамби. Побудувати графіки й мультиплікацію.

Зауваження. Скористатися пакетом **NAST2D**.

5. Модифікуйте запропонований у задачі 4 алгоритм таким чином, щоб за ним можна було б отримати розв'язок задачі у випадку падіння краплі в'язкої рідини в посудину, що також заповнена в'язкою рідиною. Побудувати графіки й мультиплікацію.
6. Модифікуйте запропонований у задачі 4 алгоритм таким чином, щоб за ним можна було отримати розв'язок задачі у випадку руху в'язкої рідини у квадратній порожнині. Цей рух виникає внаслідок горизонтального руху площини, яка закриває вказану порожнину.

7. Використовуючи SPH-підхід, розв'язати плоску задачу про натікання хвилі на берег. Побудувати графіки й мультиплікацію.

Зауваження. Скористатися пакетом **SPHYSICS2D**.

8. Модифікуйте запропонований у задачі 7 алгоритм таким чином, щоб розв'язати плоску задачу про падіння водяної дамби. Побудувати графіки й мультиплікацію.

9. Використовуючи SPH-підхід, розв'язати тривимірну задачу про утворення хвилі цунамі за рахунок опускання частини дна. Побудувати графіки й мультиплікацію.

Зауваження. Скористатися пакетом **SPHYSICS3D**.

10. Модифікуйте запропонований у задачі 9 алгоритм таким чином, щоб розв'язати тривимірну задачу про падіння водяної дамби й натікання утвореної хвилі на прямокутну перешкоду. Побудувати графіки й мультиплікацію.

МЕТОДИ БАГАТОВИМІРНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ

Розглянемо методи пошуку оптимальних значень максимуму або мінімуму функції n дійсних змінних $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Із математичного погляду не грає істотної ролі, чи розглядати максимізацію, чи мінімізацію функції, оскільки максимізація функції f еквівалентна мінімізації функції $-f$. Обмежимося розглядом мінімізації функцій.

Значення змінних можуть бути обмеженими або змінюватися без обмежень. У першому випадку будь-яке розв'язання оптимізаційної задачі має враховувати ці обмеження. Для зручності спочатку розглянемо задачі, в яких на змінні не накладено обмеження, а потім – задачі з накладеними на змінні обмеженнями.

Для будь-якої практичної оптимізаційної задачі існує багато етапів, які збігаються. Найважливішим етапом є моделювання фізичної ситуації з метою одержання математичної функції, яку потрібно мінімізувати, а також визначення обмежень, якщо вони існують. Потім необхідно вибрати підхідну процедуру для здійснення мінімізації. Ця процедура має реалізуватися на практиці, що в багатьох реальних випадках змушує скористатися комп'ютером. І, нарешті, математичний результат повинен інтерпретуватися у термінах фізичного змісту задачі. Хоча жодним із цих етапів не можна знехтувати, основний наголос тут зроблено на вивченні процедур, які призначені безпосередньо для здійснення мінімізації, і на можливості їх використання на комп'ютері.

Не випадково те, що основні важливі методи оптимізації розроблено в період бурхливого розвитку комп'ютерів протягом декількох останніх десятиліть, а отже, ці методи є комп'ютерними. На багатьох сучасних комп'ютерах є пакети програм оптимізації, що реалізують розглянуті нижче методи [3]. Методи ці досить ефективні й дозволяють оптимізувати широке коло задач.

А.1. Класичні методи

А.1.1. Функція однієї змінної

Функція $f(x)$ має локальний мінімум у точці x_0 , якщо існує деяка додатна величина δ така, що, якщо $|x - x_0| < \delta$, то $f(x) \geq f(x_0)$, тобто, якщо існує окіл точки x_0 , такий, що для всіх значень x із цього околу, $f(x) > f(x_0)$. Функція $f(x)$ має глобальний мінімум у точці x^* , якщо для всіх x справедлива нерівність $f(x) \geq f(x^*)$.

На рис. А.1 показано графік функції $f(x)$, яка має локальний мінімум у точці x_0 і глобальний мінімум у точці x^* .

Класичний підхід до задачі знаходження значень x_0 та x^* полягає в пошуку рівнянь, які вони повинні задовольняти. Зображена на рис. А.1 функція та її похідні неперервні й очевидно, що в точках x_0 та x^* похідна $f'(x)$ як градієнт функції дорівнює нулю. Отже, x_0 та x^* будуть розв'язками рівняння

$$f'(x) = 0. \quad (\text{A.1})$$

Точка x_m , в якій функція досягає локального максимуму, і точка x_c , де спостерігається горизонтальний перегин функції, також задовольняють це рівняння. Отже, рівняння (А.1) дає лише *необхідну* умову мінімуму, але не є *достатньою* умовою існування мінімуму.

Зазначимо, однак, що в точках x_0 та x^* похідна $f'(x)$ змінює знак із від'ємного на додатний. У точці x_m знак змінюється з від'ємного на додатний також, а у точці x_c він не міняється. Отже, похідна в точці мінімуму є зростаючою функцією, а оскільки міра зростання $f'(x)$ визначається другою похідною, то можна чекати, що $f''(x_0) > 0$, $f''(x^*) > 0$, тоді як $f''(x_m) < 0$.

Однак, якщо і друга похідна також дорівнює нулю, то ситуація залишається невизначеною.

Отримані вище результати можна обґрунтувати, якщо розглянути розвинення функції $f(x)$ у ряд Тейлора в околі точки x_0 (або x^* , або x_m), що, звичайно, вимагає неперервності функції $f(x)$ та її похідних:

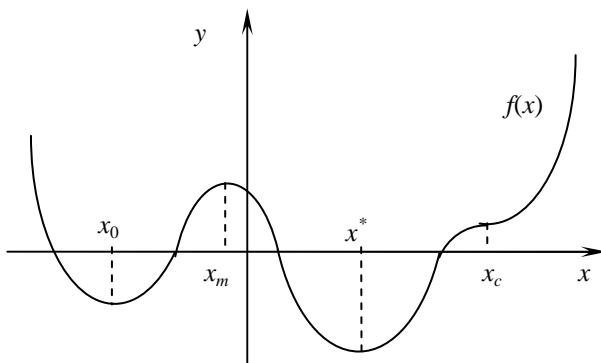


Рис. А.1. Визначення локальних та глобальних екстремумів

$$f(x_0 + h) - f(x_0) = h \cdot f'(x_0) + \frac{h^2}{2!} \cdot f''(x_0) + \dots \quad (\text{A.2})$$

Якщо в точці x_0 функція досягає мінімуму, то ліва частина (А.2) буде додатною для будь-якого досить малого h ($|h| < \delta$). Отже, перша похідна $f'(x_0)$ має дорівнювати нулю, що є тут достатньою умовою (див. рівняння (А.1)). Якщо б вона була додатною, то при досить малому від'ємному значенні h права частина (А.2) ставала б від'ємною, а якби вона була від'ємною, те при досить малому додатному значенні h права частина ставала б від'ємною. Оскільки в наступному члені (А.2) завжди $h^2 > 0$, то, якщо

$$f''(x) > 0, \quad (\text{A.3})$$

у точці x_0 функція досягає мінімуму. Якщо $f'(x_m) = 0$ і $f''(x_m) < 0$, то з аналогічних міркувань у точці x_m маємо максимум. Для визначення різниці між локальним і глобальним мінімумами необхідно порівняти значення функцій $f(x_0)$ та $f(x^*)$.

Неоднозначності, що виникає при $f''(x) = 0$, можна уникнути, якщо збільшити кількість членів у формулі розвинення в ряд Тейлора. Якщо функція $f(x)$ та її похідні неперервні, то точка x_0 є точкою екстремуму (максимуму або мінімуму) тоді і тільки тоді, коли n парне, де n – порядок першої похідної, що не перетворюється на нуль у точці x_0 . Якщо $f^n(x_0) < 0$, то в точці x_0 функція має максимум, якщо $f^n(x_0) > 0$, то в точці x_0 вона є мінімальною.

А.1.2. Функція n змінних

Розглянемо функцію n дійсних змінних

$$f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = f(\bar{x}). \quad (\text{A.4})$$

Точка в n -вимірному евклідовому просторі з координатами $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ позначається вектором-стовпцем \bar{x} . Градієнт функції, тобто вектор із компонентами $\partial f / \partial x_1, \partial f / \partial x_2, \dots$

$\dots, \partial f / \partial x_n$, позначається або $\nabla f(\bar{x})$, або $g(\bar{x})$. Матриця Гессе (гессіан) функції $f(\bar{x})$ позначається $\underline{G}(\bar{x})$ і є симетричною матрицею з $n \times n$ елементів, що мають вигляд

$$G_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}. \quad (\text{A.5})$$

Функція $f(\bar{x})$ має локальний мінімум у точці \bar{x}_0 , якщо існує окіл точки \bar{x}_0 такий, що $f(\bar{x})$ більше $f(\bar{x}_0)$ у всіх точках цього околу, тобто існує додатна величина δ , така, що для $|\bar{x} - \bar{x}_0| < \delta$ справедлива нерівність $f(\bar{x}) \geq f(\bar{x}_0)$.

У випадку глобального мінімуму в точці \bar{x}^* для всіх \bar{x} справедлива нерівність $f(\bar{x}) \geq f(\bar{x}^*)$.

При такому визначенні й очевидних припущеннях відносно диференційованості можна узагальнити рівняння (А.2) й одержати

$$\begin{aligned} f(\bar{x}_0 + \bar{h}) - f(\bar{x}_0) &= \sum_{i=1}^n h_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{1}{2!} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n h_i h_j \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} + \dots = \\ &= \bar{h}^T \nabla f(\bar{x}_0) + \frac{1}{2!} \bar{h}^T \underline{G}(\bar{x}_0) \bar{h} + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Тоді, якщо \bar{x}_0 є точкою мінімуму функції $f(\bar{x})$, то всі перші частинні похідні $\partial f / \partial x_i$ ($i = 1, \dots, n$) мають перетворюватися на нуль у точці \bar{x}_0 . Якщо ж це не відбулося, то

відповідним вибором h_i можна зробити так, щоб різниця $f(\bar{x}_0 + \bar{h}) - f(\bar{x}_0)$ була від'ємною.

Отже, необхідною умовою мінімуму в точці x_0 є рівняння

$$\nabla f(\bar{x}_0) = 0 \quad (\text{A.7})$$

або

$$\partial f / \partial x_i = 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

Тоді знак різниці $f(\bar{x}_0 + \bar{h}) - f(\bar{x}_0)$ визначається членом

$$\frac{1}{2!} \bar{h}^T \underline{G}(\bar{x}_0) \bar{h}. \quad (\text{A.9})$$

Якщо матриця $\underline{G}(\bar{x}_0)$ додатно визначена, то цей член додатний для довільних \bar{h} , а, отже, необхідними і достатніми умовами мінімуму є

$$\nabla f(\bar{x}_0) = 0, \quad \underline{G}(\bar{x}_0) - \text{додатно визначена.} \quad (\text{A.10})$$

Необхідними й достатніми умовами максимуму є

$$\nabla f(\bar{x}_m) = 0, \quad \underline{G}(\bar{x}_m) - \text{від'ємно визначена.} \quad (\text{A.11})$$

A.2. Методи прямого пошуку для функції n змінних

Методами прямого пошуку називають методи, які використовують тільки значення функції. Подібних методів багато, тому розглянемо докладно лише деякі з них. Практика показала, що саме ці методи найбільш ефективні й застосовні при розв'язанні різноманітних оптимізаційних задач.

Розглянемо функцію двох змінних. Її лінії сталого рівня показано на рис. A.2, а мінімум лежить у точці (x_1^*, x_2^*) .

Найпростішим методом пошуку є *метод покоординатного спуску*. Із точки A починаємо пошук мінімуму вздовж напрямку осі x_1 і таким чином знаходимо точку B , в якій дотична до лінії сталого рівня паралельна осі x_1 . Потім, виконуючи пошук із точки B у напрямку осі x_2 , одержуємо точку C ; продовжуючи пошук паралельно осі x_1 , одержуємо точку D і т. д. Таким чином, ми приходимо до оптимальної точки. Для пошуку вздовж осі тут можна використати будь-який з одновимірних методів. Вочевидь цю ідею можна застосувати і для функції n

змінних. Розглянутий метод є ефективним у випадку єдиного мінімуму функції. Проте на практиці він виявляється занадто

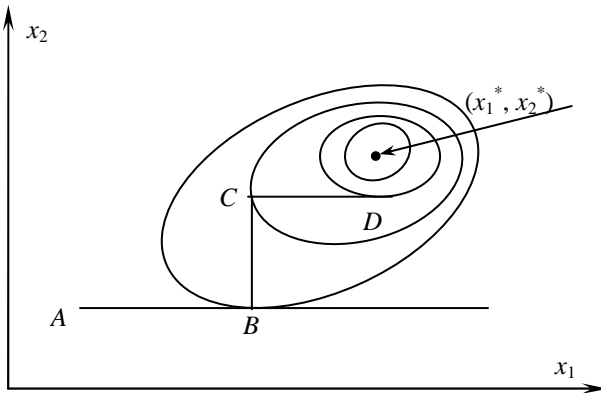


Рис. А.2. Приклад найпростішої стратегії пошуку екстремуму функції двох змінних

повільним. Тому розроблено складніші методи, які використовують більше інформації на підставі вже відомих значень функції.

Запропоновано декілька функцій, які через свої властивості є тестовими для таких методів. Далі наведено приклади таких функцій.

Функція Розенброка:

$$f(x_1, x_2) = 100 \cdot (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2; \quad \bar{x}^* = (1; 1). \quad (\text{A.12})$$

Функція Пауела:

$$f(\bar{x}) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^2 + 10(x_1 - x_4)^4; \quad \bar{x}^* = (0; 0; 0; 0). \quad (\text{A.13})$$

А.2.1. Метод Хука – Дживса

Цей метод розроблено в 1961 році, але й дотепер він є досить ефективним та оригінальним. Процедура методу

складається з послідовності кроків пошуку навколо базисної точки, за якими, у випадку успіху, іде пошук за зразком.

Розглянемо опис процедури методу Хука – Дживса [2].

А. Вибрати початкову базисну точку \vec{b}_1 і крок завдовжки h_i для кожної змінної x_i , $i = 1, 2, \dots, n$.

Зауваження. На практиці для кожної змінної використовується крок h , однак зазначена вище модифікація теж може виявитися корисною.

В. Обчислюється $f(\vec{x})$ у базисній точці \vec{b}_1 із метою одержання відомостей про локальну поведінку функції $f(\vec{x})$. Ці відомості використовуватимуться для відшукання підхідного напрямку пошуку за зразком, за допомогою якого можна досягти найбільшого спадання значення функції. Функція $f(\vec{x})$ у базисній точці \vec{b}_1 знаходиться у такий спосіб :

1. Обчислюється значення функції $f(\vec{b}_1)$ у базисній точці \vec{b}_1 .

2. Кожна змінна по черзі змінюється додаванням довжини кроку. Таким чином, ми розраховуємо значення функції $f(\vec{b}_1 + h_1 \vec{e}_1)$, де \vec{e}_1 — одиничний вектор у напрямку осі x_1 .

Якщо це веде до зменшення значення функції, то \vec{b}_1 змінюється на $\vec{b}_1 + h_1 \vec{e}_1$. У протилежному випадку обчислюємо значення функції $f(\vec{b}_1 - h_1 \vec{e}_1)$, і коли її значення зменшилося, то \vec{b}_1 міняємо на $\vec{b}_1 - h_1 \vec{e}_1$. Якщо жоден із виконаних кроків не приводить до зменшення значення функції, то точка \vec{b}_1 залишається незмінною й розглядаємо зміни в напрямку осі x_2 , тобто знаходимо значення функції $\vec{b}_1 + h_2 \vec{e}_2$ тощо. Після того, як будуть розглянуті всі n змінних, матимемо нову базисну точку \vec{b}_2 .

3. Якщо $\vec{b}_2 = \vec{b}_1$, тобто зменшення функції не досягнуто, то дослідження повторюється навколо тієї самої базисної точки

\vec{b}_1 , але зі зменшеною довжиною кроку. На практиці задовільним є зменшення кроку (кроків) у десять разів щодо початкової довжини.

4. Якщо $\vec{b}_2 \neq \vec{b}_1$, то виконується пошук за зразком.

C. При пошуку за зразком використовується інформація, яку отримано у процесі дослідження, і мінімізація функції завершується пошуком у напрямку, що заданий зразком. Ця процедура виконується в такий спосіб :

1. Потрібно рухатися з базисної точки \vec{b}_2 в напрямку $\vec{b}_2 - \vec{b}_1$, бо пошук у цьому напрямку вже привів до зменшення значення функції. Тому обчислимо функцію в точці зразка

$$\vec{P}_1 = \vec{b}_1 + 2(\vec{b}_2 - \vec{b}_1) \quad (\text{A.14})$$

або в загальному випадку

$$\vec{P}_i = \vec{b}_i + 2(\vec{b}_{i+1} - \vec{b}_i). \quad (\text{A.15})$$

2. Потім дослідження варто продовжувати навколо точки $\vec{P}_1 (\vec{P}_i)$.

3. Якщо найменше значення на кроці (C, 2) менше ніж значення в базисній точці \vec{b}_2 (у загальному випадку \vec{b}_{i+1}), то одержують нову базисну точку $\vec{b}_3 (\vec{b}_{i+2})$, після чого варто повторити крок (C, 1). У протилежному випадку не виконується пошук за зразком із точки $\vec{b}_2 (\vec{b}_{i+1})$, а продовжується дослідження в точці $\vec{b}_2 (\vec{b}_{i+1})$.

D. Завершити цей процес у випадку, якщо довжина кроку (довжини кроків) буде зменшена до заданого малого значення.

На рис. А.3 зображено блок-схему цього методу.

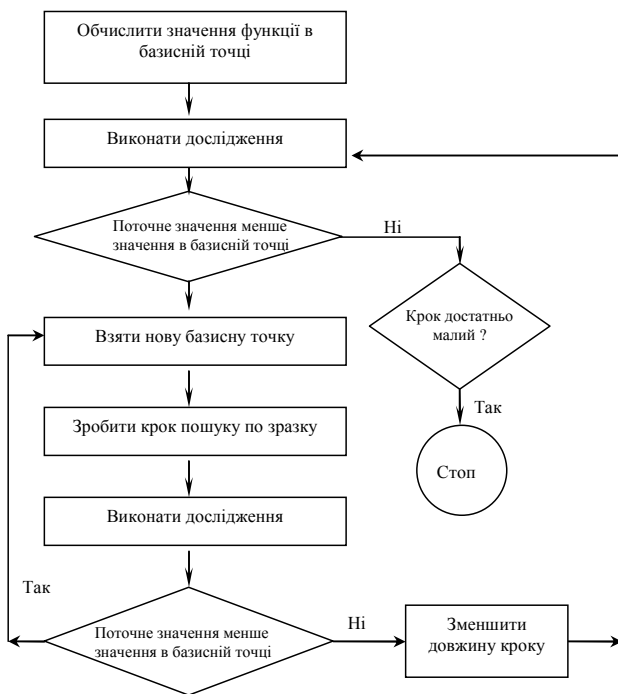


Рис. А.3. Блок-схема методу Хука – Дживса

А.2.2. Метод Нелдера – Міда

Метод Нелдера – Міда є розвитком симплекс-методу Спендлі, Хекста й Хімсворта [2]. Регулярним симплексом в n -вимірному просторі називають множину, що складається з $(n + 1)$ -ї рівновіддаленої точки. У двовимірному просторі симплексом є рівносторонній трикутник, а у тривимірному — правильний тетраедр. Ідея методу полягає в порівнянні значень функції у $(n + 1)$ вершинах симплексу й у переміщенні симплексу в напрямку оптимальної точки за допомогою ітераційної процедури. У симплекс-методі Спендлі, Хекста й Хімсворта регулярний симплекс використовується на кожному

етапі. Нелдер і Мід запропонували кілька модифікацій цього методу, які допускають використання нерегулярних симплексів. У результаті маємо дуже надійний метод прямого пошуку, який є одним з найефективніших при $n < 6$.

У методі Спендлі, Хекста й Хімсворта симплекс переміщується з використанням трьох основних операцій: відбиття, розтягнення й стискання. Зміст цих операцій стане зрозумілим при безпосередньому розгляді кроків процедури для цього методу [2].

A. Знаходимо значення функції у вершинах симплексу

$$f_1 = f(\bar{x}_1), f_2 = f(\bar{x}_2), \dots, f_{n+1} = f(\bar{x}_{n+1}).$$

B. Обчислюємо найбільше значення функції f_H , значення функції f_G , що йде за ним, найменше значення функції f_L і відповідні їм точки \bar{x}_H , \bar{x}_G та \bar{x}_L .

C. Знаходимо центр ваги всіх точок, за винятком точки \bar{x}_H . Нехай центром ваги буде

$$\bar{x}_0 = \frac{1}{n} \sum_{i \neq H} \bar{x}_i \quad (\text{A.16})$$

й обчислюємо $f(\bar{x}_0) = f_0$.

D. Зручніше за все почати переміщення від точки \bar{x}_H . Відбивши точку \bar{x}_H щодо точки \bar{x}_0 , одержимо точку \bar{x}_R і знайдемо $f(\bar{x}_R) = f_R$.

Операцію відбиття ілюструє рис. А.4, а. Нехай $\alpha > 0$ – коефіцієнт відбиття, тоді положення точки \bar{x}_R визначається в такий спосіб:

$$\bar{x}_R - \bar{x}_0 = \alpha(\bar{x}_0 - \bar{x}_H)$$

або

$$\bar{x}_R = (1 - \alpha)\bar{x}_0 - \alpha\bar{x}_H. \quad (\text{A.17})$$

Зауваження. Із (A.17) випливає, що $\alpha = |\bar{x}_R - \bar{x}_0| / |\bar{x}_0 - \bar{x}_H|$.

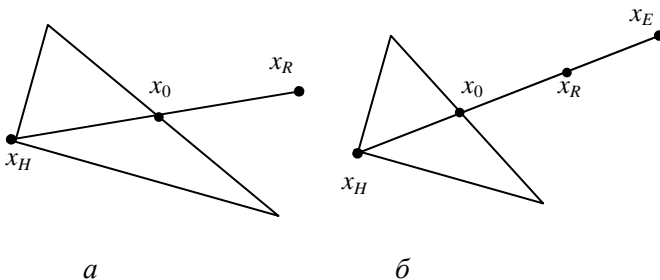


Рис. А.4. Операції відбиття й розтягнення симплексу

Е. Порівняємо значення функцій f_R та f_L .

1. Якщо $f_R < f_L$, то маємо найменше значення функції. Напрямок із точки \bar{x}_0 в точку \bar{x}_R – найзручніший для переміщення. Таким чином, виконуємо розтягнення в цьому напрямку і знаходимо точку \bar{x}_E та значення функції $f(\bar{x}_E) = f_E$. Рис. А.4, б ілюструє операцію розтягнення симплексу. Коефіцієнт розтягнення $\gamma > 1$ можна знайти з таких співвідношень:

$$\bar{x}_E - \bar{x}_0 = \gamma(\bar{x}_R - \bar{x}_0)$$

або

$$\bar{x}_E = \gamma\bar{x}_R + (1 - \gamma)\bar{x}_0. \quad (\text{A.18})$$

Зауваження. Із (А.18) випливає, що $\gamma = \frac{|\bar{x}_E - \bar{x}_0|}{|\bar{x}_R - \bar{x}_0|}$.

а) Якщо $f_E < f_L$, то замінюємо точку \bar{x}_H на точку \bar{x}_E й перевіряємо $(n + 1)$ -шу точку симплексу на збіжність до мінімуму (див. далі крок *H*). Якщо збіжність досягнута, то процес зупиняється; у протилежному випадку повертаємося на крок *B*.

б) Якщо $f_E \geq f_L$, то відкидаємо точку \bar{x}_E . Очевидно, ми перемістилися занадто далеко від точки \bar{x}_0 до точки \bar{x}_R . Тому варто замінити точку \bar{x}_H на точку \bar{x}_R , в якій

отримано поліпшення (крок $(E, 1)$), перевірити збіжність і, якщо вона не досягнута, повернутися на крок C .

2. Якщо $f_R > f_L$ але $f_R \leq f_G$, то \bar{x}_R є кращою точкою порівняно з іншими двома точками симплексу й ми замінюємо точку \bar{x}_H на точку \bar{x}_R . Далі, якщо збіжність не досягнута, повертаємося на крок B , тобто виконуємо п. (1.б), який описано вище.

3. Якщо $f_R > f_L$ й $f_R > f_G$, переходимо на крок F .

F. Порівнюємо значення функцій f_R та f_H .

1. Якщо $f_R > f_H$, то переходимо безпосередньо до кроку стискання $(F, 2)$. Якщо $f_R < f_H$, то замінюємо точку \bar{x}_H на точку \bar{x}_R та значення функції f_H на значення функції f_R . Запам'ятовуємо значення $f_R > f_G$ із кроку $(E, 2)$, що наведений вище. Потім переходимо на крок $(F, 2)$.

2. Якщо в цьому випадку $f_R > f_H$, то очевидно, що ми перемістилися занадто далеко в напрямку від точки \bar{x}_H до точки \bar{x}_0 . Спробуємо виправити це, знайшовши точку \bar{x}_C (а потім значення f_C) за допомогою кроку стискання, що показаний на рис. А.5, а. Знаходимо точку \bar{x}_C зі співвідношення:

$$\bar{x}_C - \bar{x}_0 = \beta(\bar{x}_H - \bar{x}_0),$$

де $0 < \beta < 1$ – коефіцієнт стискання. Тоді

$$\bar{x}_C = \beta\bar{x}_H + (1 - \beta)\bar{x}_0. \quad (\text{A.19})$$

Якщо ж $f_R < f_H$, то замінимо спочатку точку \bar{x}_H на точку \bar{x}_R , а потім виконаємо стискання. Тоді точку \bar{x}_C знаходимо зі співвідношення (рис. А.5б):

$$\bar{x}_C - \bar{x}_0 = \beta(\bar{x}_R - \bar{x}_0)$$

або

$$\bar{x}_C = \beta\bar{x}_R + (1 - \beta)\bar{x}_0. \quad (\text{A.20})$$

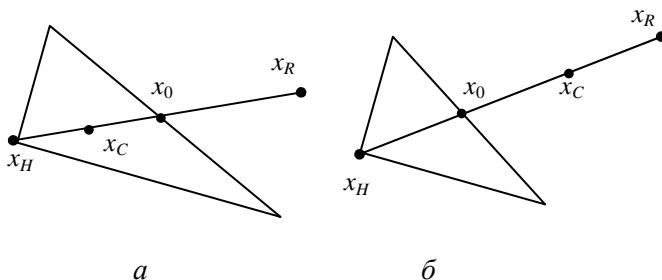


Рис. А.5. Операції стискання симплексу

G. Порівняємо значення функцій f_C та f_H .

1. Якщо $f_C < f_H$, то замінимо точку \bar{x}_H на точку \bar{x}_C і, якщо збіжність не досягнута, то повертаємося на крок B.

2. Якщо $f_C > f_H$, то очевидно, що всі наші спроби знайти значення, яке менше ніж f_H , закінчилися невдачею, тому переходимо на крок H.

H. На цьому кроці зменшуємо розмір симплексу поділом навпіл відстані від кожної точки симплексу до точки \bar{x}_L , у якій маємо найменше значення функції.

Таким чином, точку \bar{x}_i замінюємо точкою

$$0,5 (\bar{x}_i + \bar{x}_L). \quad (\text{A.21})$$

Потім обчислюємо f_i для $i = 1, 2, \dots, (n + 1)$, перевіряємо збіжність і, якщо вона не досягнута, повертаємося на крок C.

I. Перевірка збіжності заснована на тому, щоб стандартне відхилення $(n + 1)$ -го значення функції було менше деякого заданого малого значення ϵ . У цьому випадку обчислюється

$$\sigma^2 = \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} (f_i - \bar{f})^2, \quad (\text{A.22})$$

де
$$\bar{f} = \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} f_i.$$

Якщо $\sigma < \epsilon$, то всі значення функції дуже близькі одне до одного, і тому вони, можливо, лежать поблизу точки мініму-

му функції \bar{x}_L . Кроки цієї процедури зображено у вигляді блок-схеми на рис. А.6. Коефіцієнти α, β, γ у наведеній вище процедурі є відповідно коефіцієнтами відбиття, стискання й розтягнення. Нелдер і Мід [2] рекомендують узяти $\alpha = 1$; $\beta = 0,5$; $\gamma = 2$.

Початковий симплекс вибирається на розсуд програміста.

Зауваження. При перевірці збіжності для обчислення суми у вивазі (А.22) використовують співвідношення

$$\sum_{i=1}^{n+1} (f_i - \bar{f})^2 = \sum_{i=1}^{n+1} f_i^2 - (n+1)\bar{f}^2. \quad (\text{A.23})$$

А.3. Градієнтні методи для функції n змінних

А.3.1. Метод найшвидшого спуску

Розглянемо методи пошуку, в яких поряд зі значеннями функції використано значення її градієнта. Згідно зі згаданим у п. А.2 методом покоординатного спуску здійснюється пошук із заданої точки у напрямку, що паралельний одній з осей, до точки мінімуму в цьому напрямку. Далі пошук продовжують у напрямку, що паралельний іншій осі, і т. д. Напрямки, звичайно, фіксовані. Спробуємо модифікувати цей метод таким чином, щоб на кожному етапі пошук точки мінімуму здійснювався вздовж "найкращого" напрямку. Не зрозуміло тільки, який із напрямків вважати "найкращим", але відомо, що напрямок градієнта є напрямком найшвидшого зростання функції. Отже, протилежний напрямок очевидно є напрямком найшвидшого спадання функції.

Процедура пошуку "найкращого" напрямку може бути обґрунтована в такий спосіб [2]. Припустимо, що здійснюється переміщення з точки \bar{x} у наступну точку $\bar{x} + h\bar{d}$, де \bar{d} – деякий напрямок, а h – крок деякої довжини. Отже, переміщення йде з точки (x_1, x_2, \dots, x_n) у точку $(x_1 + \delta x_1, x_2 + \delta x_2, \dots, x_n + \delta x_n)$, де

$$\delta x_i = h d_i, \quad (\text{A.24})$$

а d_i – косинуси напрямку \bar{d} такі, що

$$\sum_{i=1}^n d_i^2 = 1. \quad (\text{A.25})$$

Приріст значення функції визначається співвідношеннями

$$\begin{aligned} df &= f(x_1 + \delta x_1, x_2 + \delta x_2, \dots, x_n + \delta x_n) - f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \\ &= \frac{\partial f}{\partial x_1} \cdot \delta x_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} \cdot \delta x_2 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n} \cdot \delta x_n \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

з точністю до першого порядку δx_i . Причому частинні похідні обчислюються в точці \bar{x} (відповідно до рівняння (A.6)). Яким чином варто вибрати напрямки d_i , що задовольняє рівняння (A.25), щоб одержати найбільше значення приросту функції df ?

Тут виникає задача максимізації з обмеженнями, і для її розв'язання використаємо метод множників Лагранжа. Визначимо допоміжну функцію

$$\varphi(d_1, d_2, \dots, d_n) = df + \lambda \left(\sum_{i=1}^n d_i^2 - 1 \right).$$

Величина df , що задовольняє обмеження (A.25), досягає максимуму одночасно із функцією

$$\varphi(d_1, d_2, \dots, d_n) = h \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \cdot \delta x_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} \cdot \delta x_2 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n} \cdot \delta x_n \right) + \lambda \left(\sum_{i=1}^n d_i^2 - 1 \right).$$

А оскільки її частинні похідні мають вигляд

$$\frac{\partial \varphi}{\partial d_j} = h \frac{\partial f}{\partial x_j} + 2\lambda d_j \quad \text{при } j = 1, 2, \dots, n, \quad (\text{A.27})$$

то з умови існування максимуму функції випливає, що

$$\frac{\partial \varphi}{\partial d_j} = 0. \quad (\text{A.28})$$

Отже,

$$\frac{d_1}{\frac{\partial f}{\partial x_1}} = \frac{d_2}{\frac{\partial f}{\partial x_2}} = \dots = \frac{d_n}{\frac{\partial f}{\partial x_n}}. \quad (\text{A.29})$$

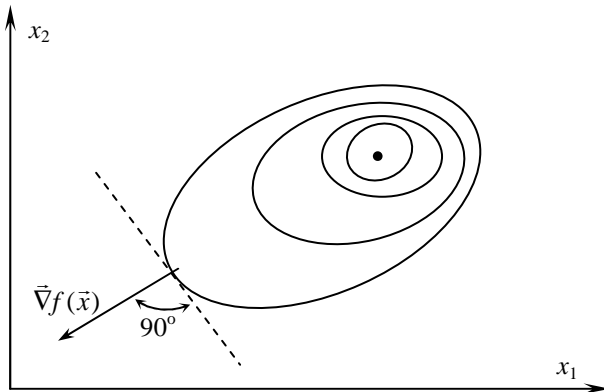


Рис. А.7. Схема методу найшвидшого спуску

Тоді $d_j \sim \partial f / \partial x_j$ і напрямок \vec{d} в точці \vec{x} паралельний напрямку $\nabla f(\vec{x})$.

Таким чином, найбільше локальне зростання функції для заданого малого кроку h маємо, коли напрямок \vec{d} збігається з напрямком $\nabla f(\vec{x})$ або $g(\vec{x})$. Тому напрямком найшвидшого спуску є протилежний напрямок

$$-\nabla f(\vec{x}) \text{ або } -g(\vec{x}). \quad (\text{A.30})$$

Тоді $d_j \sim \partial f / \partial x_j$ і напрямок \vec{d} в точці \vec{x} паралельний напрямку $\nabla f(\vec{x})$.

У компактнішому вигляді рівняння (A.26) можна записати як

$$df = |\nabla f(\vec{x})| \cdot |d\vec{x}| \cdot \cos \theta,$$

де θ – кут між векторами $\nabla f(\vec{x})$ і $d\vec{x}$. Для заданої величини $d\vec{x}$ ми мінімізуємо df , якщо вибрати $\theta = 180^\circ$, при цьому напрямок $d\vec{x}$ збігається з напрямком $-\nabla f(\vec{x})$ (рис. А.7).

Зауваження. Напрямок градієнта перпендикулярний у будь-якій точці лінії сталого рівня, оскільки вздовж цієї лінії функція

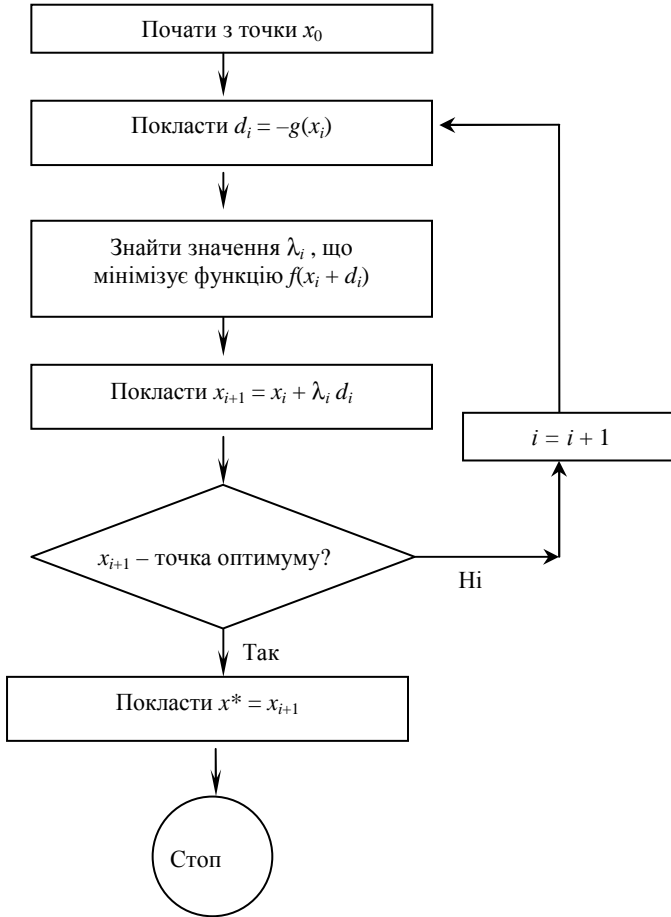


Рис. А.8. Блок-схема методу найшвидшого спуску

стала. Таким чином, якщо (d_1, d_2, \dots, d_n) – малий крок уздовж лінії рівня, то

$$f(x_1 + d_1, x_2 + d_2, \dots, x_n + d_n) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

і отже,

$$df = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_j} d_j = [\nabla f(\bar{x})]^T \cdot \vec{d} = 0. \quad (\text{A.31})$$

У методі найшвидшого спуску використовується розглянута вище властивість градієнта. Отже, якщо на деякому кроці процесу оптимізації ми перебуваємо в точці \bar{x}_j , то пошук мінімуму функції здійснюється вздовж напрямку $-\nabla f(\bar{x}_j)$. Цей метод є ітераційним. На кроці i точка мінімуму апроксимується точкою \bar{x}_i . Наступною апроксимацією є точка

$$\bar{x}_{i+1} = \bar{x}_i - \lambda_i \cdot \nabla f(\bar{x}_i), \quad (\text{A.32})$$

де λ_i – значення λ , що мінімізує функцію

$$\varphi(\lambda) = f[\bar{x}_i - \lambda \cdot \nabla f(\bar{x}_i)]. \quad (\text{A.33})$$

Значення λ_i можна знайти за допомогою одного з методів одновимірного пошуку. Блок-схему методу найшвидшого спуску зображено на рис. А.8.

8.3.2. Особливості мінімізації квадратичних функцій

Квадратична функція

$$F(\bar{x}) = a + \bar{x}^T \cdot \bar{b} + 1/2 \cdot \bar{x}^T \underline{G} \bar{x}^T, \quad (\text{A.34})$$

де a – константа; \bar{b} – сталий вектор і \underline{G} – позитивно визначена симетрична матриця, що має мінімум у точці \bar{x}^* . Причому \bar{x}^* визначається в такий спосіб:

$$\nabla F(\bar{x}^*) = \bar{b} + \underline{G} \bar{x}^* = 0, \quad (\text{A.35})$$

звідки $\bar{x}^* = -\underline{G}^{-1} \bar{b}$. Із рівняння (А.6) випливає, що при виконанні умов неперервності будь-яку функцію в околі точки \bar{x}_0 можна апроксимувати функцією

$$\varphi(\bar{x}) = f(\bar{x}_0) + (\bar{x} - \bar{x}_0)^T \nabla f(\bar{x}_0) + 1/2 \cdot (\bar{x} - \bar{x}_0)^T \underline{G}(\bar{x}_0) (\bar{x} - \bar{x}_0), \quad (\text{A.36})$$

де $\underline{G}(\bar{x}_0)$ – матриця Гессе, обчислена в точці \bar{x}_0 .

Отже, апроксимацією мінімуму функції $f(\bar{x})$ буде мінімум функції $\varphi(\bar{x})$. Якщо останній міститься в точці \bar{x}_m , то

$$\nabla f(\bar{x}_0) + \underline{G}(\bar{x}_0) (\bar{x}_m - \bar{x}_0) = 0,$$

звідки

$$\bar{x}_m = \bar{x}_0 - \underline{G}^{-1}(\bar{x}_0) \nabla f(\bar{x}_0)$$

або

$$\bar{x}_m = \bar{x}_0 - \underline{G}^{-1}(\bar{x}_0) g(\bar{x}_0). \quad (\text{A.37})$$

Таким чином, ітераційне рівняння (A.32) можна модифікувати, а точкою наступної апроксимації мінімуму \bar{x}_i буде

$$\bar{x}_{i+1} = \bar{x}_i - \underline{G}^{-1}(\bar{x}_i) \cdot g(\bar{x}_i) \quad (\text{A.38})$$

або, у зручнішому вигляді,

$$\bar{x}_{i+1} = \bar{x}_i - \lambda_i \cdot \underline{G}^{-1}(\bar{x}_i) \cdot g(\bar{x}_i), \quad (\text{A.39})$$

де довжина кроку λ_i визначається одновимірним пошуком у напрямку $\underline{G}^{-1}(\bar{x}_i) g(\bar{x}_i)$.

Алгоритм методу Ньютона – Рафсона базується на рівнянні (A.39). Не розглядатимемо його в усіх подробицях, нагадаємо лише деякі його особливості. Рівняння (A.38) і (A.39) у тому вигляді, як вони записані, вимагають на кожному кроці обчислення й обернення матриці Гессе $\underline{G}(\bar{x}_i)$, що складає основну частину обчислень. Якщо точка \bar{x}_i близько розташована біля точки \bar{x}^* , а в загальному випадку функція $\varphi(\bar{x})$ добре апроксимуватиме функцію $f(\bar{x})$ у цьому околі, то збіжність буде достатньо швидкою. При цьому варто перевірити щодо виконання критерію завершення як норму градієнта $|g(\bar{x}_{i+1})|$, так і відстань між точками $|\bar{x}_{i+1} - \bar{x}_i|$. Цікаво зазначити, що, порівняно з простим методом найшвидшого спуску, напрямком спуску в цьому випадку буде не $-g(\bar{x})$, а $-\underline{G}^{-1}(\bar{x}) \cdot g(\bar{x})$, тобто враховуються і другі похідні початкової функції.

Отже, якщо йдеться про ефективність ітераційних методів пошуку, то основний внесок тут дає напрямок пошуку на кожній ітерації. А саме, на кожній ітерації потрібно виконувати одновимірний пошук у "найкращому" напрямку. Для квадратичної функції n змінних (A.34) "найкращим" є напрямок, що *спряжений* із попереднім напрямком пошуку.

Згідно з визначенням, два напрямки \vec{p} і \vec{q} спряжені щодо симетричної додатно визначеної матриці \underline{G} , якщо

$$\vec{p}^T \cdot \underline{G} \cdot \vec{q} = 0. \quad (\text{A.40})$$

Зауваження. Можна показати, що коли $\vec{p}_0, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_{n-1}$ — це n взаємно спряжених напрямків у n -вимірному просторі, то вони лінійно незалежні.

Перед подальшими обчисленнями зручно переписати функцію $F(\vec{x})$ із (A.34). Очевидно, що її мінімум міститься в точці $\vec{x}^* = -\underline{G}^{-1}\vec{b}$, а отже, $\nabla F(\vec{x}^*) = 0$. Скориставшись розвиненням у ряд Тейлора, маємо

$$\begin{aligned} F(\vec{x}) &= F(\vec{x}^*) + 1/2 \cdot (\vec{x} - \vec{x}^*)^T \underline{G} (\vec{x} - \vec{x}^*) = \\ &= a + \vec{x}^{*T} \cdot \vec{b} + 1/2 \cdot \vec{x}^{*T} \underline{G} \vec{x}^* + 1/2 \cdot (\vec{x} - \vec{x}^*)^T \underline{G} (\vec{x} - \vec{x}^*) = \quad (\text{A.41}) \\ &= c + 1/2 \cdot (\vec{x} - \vec{x}^*)^T \underline{G} (\vec{x} - \vec{x}^*), \end{aligned}$$

де $c = a - 1/2 \cdot \vec{b}^T \underline{G} \vec{b}$ — константа.

Припустимо, що для пошуку мінімуму функції (A.41) використовується ітераційна процедура.

Очевидно, що не слід відразу використовувати результати розв'язків уздовж одновимірних напрямків пошуку (як наприклад, при пошуку за методом покоординатного спуску), а краще накопичувати інформацію, яка отримана на попередніх етапах пошуку.

Почнемо з точки \vec{x}_0 пошук у напрямку \vec{p}_0 з метою знаходження мінімуму в точці

$$\vec{x}_1 = \vec{x}_0 + \lambda_0 \vec{p}_0, \quad (\text{A.42})$$

де λ_0 — деяка скалярна величина.

Значимо, що в точці \vec{x}_1 напрямком $g(\vec{x}_1) = \nabla F(\vec{x}_1)$ ортогональний напрямку \vec{p}_0 й

$$g(\vec{x}_1)^T \cdot \vec{p}_0 = 0. \quad (\text{A.43})$$

У загальному випадку на кроці i здійснюють пошук із точки \vec{x}_i у напрямку \vec{p}_i з метою знаходження мінімуму в точці

$$\bar{x}_{i+1} = \bar{x}_i + \lambda_i \bar{p}_i, \quad (\text{A.44})$$

де для функції $F(\bar{x})$ справедливі співвідношення

$$g(\bar{x}_{i+1})^T \cdot \bar{p}_i = 0, \quad (\text{A.45})$$

$$g(\bar{x}_i) = \underline{G}(\bar{x}_i - \bar{x}^*). \quad (\text{A.46})$$

При повторному застосуванні рівняння (A.44) після n кроків маємо

$$\begin{aligned} \bar{x}_n &= \bar{x}_{n-1} + \lambda_{n-1} \bar{p}_{n-1} = \bar{x}_{n-2} + \lambda_{n-2} \bar{p}_{n-2} + \lambda_{n-1} \bar{p}_{n-1} = \\ &= \bar{x}_{j+1} + \sum_{i=j+1}^{n-1} \lambda_i \bar{p}_i. \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

для всіх j в інтервалі $0 \leq j < n-1$.

Розглянемо значення функції $F(\bar{x}_n)$. Згідно з (A.41) маємо

$$\underline{G}(\bar{x}_n - \bar{x}^*) = \underline{G}(\bar{x}_{j+1} - \bar{x}^*) + \sum_{i=j+1}^{n-1} \lambda_i \bar{p}_i^T \underline{G} \bar{p}_i. \quad (\text{A.48})$$

Використаємо співвідношення (A.46), виконаємо транспонування й помножимо отриманий вираз праворуч на \bar{p}_j , у результаті одержимо

$$g(\bar{x}_n)^T \cdot \bar{p}_j = g(\bar{x}_{j+1})^T \cdot \bar{p}_j + \sum_{i=j+1}^{n-1} \lambda_i \bar{p}_i^T \underline{G} \bar{p}_j, \quad (\text{A.49})$$

Використовуючи вираз (A.45), остаточно маємо

$$g(\bar{x}_n)^T \cdot \bar{p}_j = \sum_{i=j+1}^{n-1} \lambda_i \bar{p}_i^T \underline{G} \bar{p}_j. \quad (\text{A.50})$$

Якщо всі вектори $\bar{p}_0, \bar{p}_1, \bar{p}_2, \dots, \bar{p}_{n-1}$ взаємно спряжені так, що

$$\bar{p}_i^T \underline{G} \bar{p}_j = 0 \text{ при } i \neq j, \quad (\text{A.51})$$

то зі співвідношення (A.45) випливає

$$g(\bar{x}_n)^T \cdot \bar{p}_j = 0 \text{ при } j = 0, 1, \dots, n-1... \quad (\text{A.52})$$

Проте оскільки, згідно із зауваженням, у цьому випадку вектори $\bar{p}_0, \bar{p}_1, \bar{p}_2, \dots, \bar{p}_{n-1}$ також лінійно незалежні й, таким чином, утворюють базис, то

$$g(\bar{x}_n) = 0 \quad (\text{A.53})$$

звідки

$$\underline{G}(\bar{x}_n - \bar{x}^*) = 0 \quad (\text{A.54})$$

та

$$\bar{x}_n = \bar{x}^* .$$

Отже, якщо пошук здійснюється по взаємно спряжених напрямках, то мінімум квадратичної функції n змінних буде знайдено не більше ніж за n кроків.

8.3.3. Метод Давидона – Флетчера – Пауела

Алгоритм псевдоньютонівського методу Давидона – Флетчера – Пауела (DFP) так само, як і алгоритм методу Ньютона – Рафсона, який ми згадували вище, засновано на використанні співвідношень (A.37) та (A.39). Однак для нього вже не потрібно на кожному кроці обчислювати обернений гессіан $\underline{G}^{-1}(\bar{x}_i)$, бо напрямок пошуку на кроці (i) тут збігається з напрямком $-\underline{H}_i g(\bar{x}_i)$, де \underline{H}_i – додатно визначена симетрична матриця, яка *оновлюється* на кожному кроці відповідно до процедури, що буде описана далі. У кінці процедури матриця \underline{H}_i стає рівною оберненому гессіану.

Починаємо пошук із початкової точки \bar{x}_0 , взявши за початкову матрицю \underline{H}_0 (звичайно одиничну матрицю, хоча в цьому випадку може підійти будь-яка симетрична додатно визначена матриця). Ітераційну процедуру можна зобразити в такий спосіб (замість $g(\bar{x}_i)$ зручніше писати \bar{g}_i) [2]:

1. На кроці (i) маємо точку \bar{x}_i та додатно визначену симетричну матрицю \underline{H}_i .

2. Як напрямок пошуку візьмемо напрямок

$$\bar{d}_i = -\underline{H}_i \bar{g}_i . \quad (\text{A.55})$$

3. Щоб знайти значення λ_i , яке мінімізує функцію $f(\bar{x}_i + \lambda_i \bar{d}_i)$, виконати одновимірний пошук уздовж прямої $\bar{x}_i + \lambda_i \bar{d}_i$.

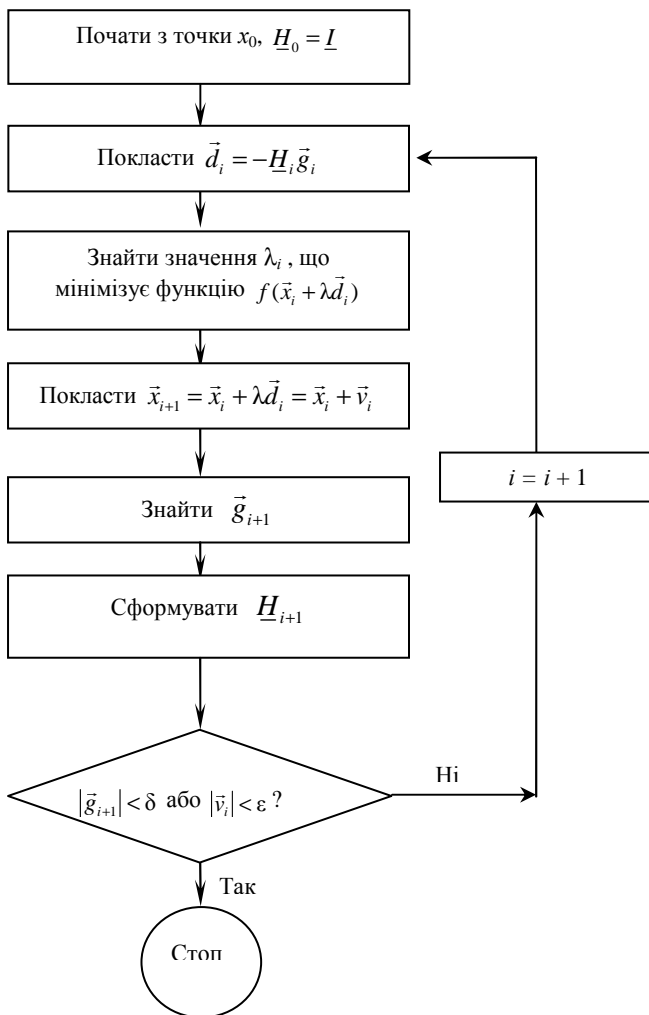


Рис. А.9. Блок-схема методу Давидона – Флетчера – Пауела

4. Покласти $\vec{v}_i = \lambda_i \vec{d}_i$. (A.56)

5. Покласти $\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + \vec{v}_i$. (A.57)

6. Знайти $f(\bar{x}_{i+1})$ та \bar{g}_{i+1} . Завершити процедуру, якщо норми $|\bar{g}_{i+1}|$ або $|\bar{v}_i|$ достатньо малі. У протилежному випадку продовжити.

Зауваження. Зі співвідношення (A.45) випливає, що

$$\bar{g}_{i+1}^T \bar{v}_i = 0. \quad (\text{A.58})$$

7. Покласти $\bar{u}_i = \bar{g}_{i+1} - \bar{g}_i$. (A.59)

8. Оновити матрицю \underline{H} у такий спосіб:

$$\underline{H}_{i+1} = \underline{H}_i + \underline{A}_i + \underline{B}_i, \quad (\text{A.60})$$

де

$$\underline{A}_i = \bar{v}_i \bar{v}_i^T / (\bar{v}_i^T \bar{u}_i); \quad (\text{A.61})$$

$$\underline{B}_i = -\underline{H}_i \bar{u}_i \bar{u}_i^T \underline{H}_i / (\bar{u}_i^T \underline{H}_i \bar{u}_i). \quad (\text{A.62})$$

9. Збільшити i на одиницю й повернутися на крок 2.

Доказ того, що побудована згідно з (A.60)–(A.62) матриця є симетричною, додатно визначеною й поблизу межі області визначення прямує до оберненого гессіана, можна знайти у книзі Банді [2]. Також там доводиться, що подібний процес мінімізації для довільної функції стійкий, а для квадратичної функції мінімум міститься точно за n кроків.

Блок-схему методу зображено на рис. A.9.

8.3.4. Метод спряжених градієнтів

Метод спряжених градієнтів Флетчера – Рівса базується на розглянутому вище положенні про те, що для квадратичної функції n змінних мінімум можна знайти, використовуючи n одновимірних пошуків уздовж взаємно спряжених напрямків.

Розглянемо квадратичну функцію

$$f(\bar{x}) = a + \bar{x}^T \cdot \bar{b} + 1/2 \cdot \bar{x}^T \underline{G} \bar{x}^T.$$

Одновимірний пошук будемо вести вздовж напрямків, що взаємно спряжені щодо матриці \underline{G} .

За перший напрямок пошуку з першої точки \bar{x}_i візьмемо напрямок найшвидшого спуску

$$\bar{d}_1 = -\bar{g}_1 \quad (\text{A.63})$$

і знайдемо значення λ_1 , що мінімізує функцію $f(\bar{x}_1 + \lambda\bar{d}_1)$.

Покладемо

$$\bar{x}_2 = \bar{x}_1 + \lambda_1\bar{d}_1. \quad (\text{A.64})$$

Виконаємо пошук у напрямку \bar{d}_2 , що спряжений напрямку $d\bar{x}$ (виберемо вектор \bar{d}_2 як лінійну комбінацію векторів \bar{d}_1 і $-\bar{g}_2$), та, мінімізуючи функцію $f(\bar{x}_2 + \lambda\bar{d}_2)$, знайдемо

$$\bar{x}_3 = \bar{x}_2 + \lambda_2\bar{d}_2. \quad (\text{A.65})$$

Напрямок пошуку \bar{d}_3 із точки \bar{x}_3 вибирається спряженим напрямкам \bar{d}_1 і \bar{d}_2 . На $(k+1)$ -му кроці беремо \bar{d}_{k+1} у вигляді лінійної комбінації $-\bar{g}_{k+1}, \bar{d}_1, \bar{d}_2, \dots, \bar{d}_k$, що спряжена всім напрямкам $\bar{d}_1, \bar{d}_2, \dots, \bar{d}_k$.

Таким чином, маємо $\bar{d}_{k+1} = -\bar{g}_{k+1} + \sum_{r=1}^k \alpha_r \bar{d}_r$, $k = 1, 2, \dots$

Виявляється, що в останньому виразі під знаком суми всі α_r дорівнюють нулю, за винятком α_k , а, отже

$$\bar{d}_{k+1} = -\bar{g}_{k+1} + \alpha_k \bar{d}_k \quad (\text{A.66})$$

та

$$\alpha_k = g_{k+1}^2 / g_k^2. \quad (\text{A.67})$$

Справедливість співвідношень (A.66) і (A.67) може бути доведена по індукції.

Таким чином, напрямки пошуку в методі Флетчера – Рівса є взаємно спряженими й відповідно до співвідношень, що наведені у підп. А.3.2, мінімум квадратичної функції n змінних можна знайти не більше ніж за n кроків. Це означає, що у випадку виконання одновимірного пошуку з потрібною точністю, усуваються будь-які помилки округлення, які можуть виникнути.

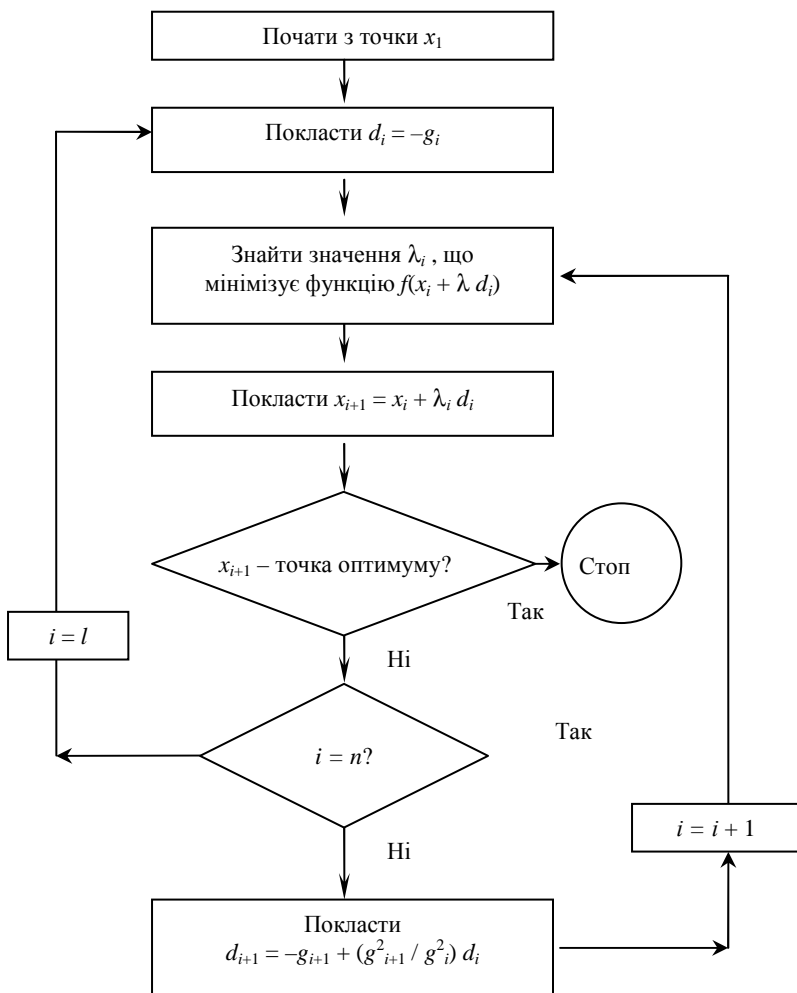


Рис. А.10. Блок-схема методу спряжених градієнтів

Описаний метод можна з успіхом застосовувати й до неквадратичних функцій, бо коли пошук здійснюється поблизу точки мінімуму, то за умови, що тут має місце квадратична апроксимація, можна сподіватися на досягнення квадратичної

збіжності. Банді [2] вважає, що в цій ситуації кожен напрямок пошуку має бути напрямком найшвидшого спуску.

Блок-схему методу зображено на рис. А.10.

Зауваження:

- У загальному випадку наведений метод трохи менш ефективний, ніж розглянутий раніше метод DFP, проте він буває досить корисним, особливо при великих значеннях n .
- Розглянуті вище градієнтні методи належать до сім'ї методів, що базуються на двох фундаментальних положеннях: використання спряжених напрямків пошуку й оновлення матриці \underline{H} , замість обчислення оберненого гессіана $\underline{G}^{-1}(\bar{x}_i)$. Літературу, що присвячена розробці градієнтних методів, можна знайти у книзі Банді [2].

А.4. Оптимізація за наявності обмежень

А.4.1. Обмеження у вигляді рівностей

Розглянемо спочатку задачу мінімізації функції двох змінних

$$z = f(x, y),$$

де на x і y накладене обмеження, що задається рівнянням

$$g(x, y) = 0. \quad (\text{A.68})$$

Рівняння $g(x, y) = 0$ можна розв'язати відносно y як функції від x , тобто знайти $y = h(x)$ ¹. За виконання певних умов диференційованості знайдемо похідну функції $h(x)$:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{d}{dx} h(x) = -\frac{\partial g}{\partial x} / \frac{\partial g}{\partial y}. \quad (\text{A.69})$$

Тоді функцію

$$z = f(x, y) = f[x, h(x)] \quad (\text{A.70})$$

перепишемо як функцію однієї незалежної змінної x .

Необхідною умовою мінімуму функції z буде співвідношення

$$\frac{dz}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{dy}{dx} = 0,$$

¹ Звичайно, на практиці може виявитися важким або навіть неможливим знайти явний вигляд функції $h(x)$.

тобто

$$\frac{\partial f}{\partial x} + \left(-\frac{\partial f}{\partial y} / \frac{\partial g}{\partial y} \right) \cdot \frac{\partial g}{\partial x} = 0. \quad (\text{A.71})$$

Співвідношення (A.68) і (A.69) можна розв'язати з метою одержання значень (x^*, y^*) у точці мінімуму.

Отриманий результат можна подати в іншій формі. Якщо покласти

$$\lambda = -\frac{\partial f(x, y)}{\partial y} / \frac{\partial g(x, y)}{\partial y} \quad (\text{A.72})$$

при $x = x^*, y = y^*$, то в точці мінімуму виконуються співвідношення

$$\begin{aligned} g(x, y) &= 0, \\ \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} + \lambda \cdot \frac{\partial g(x, y)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} + \lambda \cdot \frac{\partial g(x, y)}{\partial y} &= 0, \end{aligned}$$

причому останнє впливає безпосередньо з виразу (A.72).

Одержати ці три необхідні умови можна і з використанням функції Лагранжа

$$F(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda g(x, y), \quad (\text{A.73})$$

яка є сумою цільової функції й добутку множника Лагранжа λ на функцію обмеження. Тоді необхідні умови мінімуму функції $f(x, y)$ за наявності обмежень запишемо в такому вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(x, y, \lambda)}{\partial x} &= \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} + \lambda \cdot \frac{\partial g(x, y)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial F(x, y, \lambda)}{\partial y} &= \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} + \lambda \cdot \frac{\partial g(x, y)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial F(x, y, \lambda)}{\partial \lambda} &= g(x, y) = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.74})$$

У результаті маємо систему трьох рівнянь, розв'язками якої є значення x^*, y^* та λ^* у точці мінімуму.

Необхідні умови мінімуму (A.74) можна узагальнити для функцій n змінних за наявності m обмежень у вигляді рівностей. Розглянемо задачу мінімізації функції

$$z = f(\bar{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n),$$

коли на змінну \bar{x} накладено обмеження

$$g_1(\bar{x}) = 0, g_2(\bar{x}) = 0, \dots, g_m(\bar{x}) = 0. \quad (\text{A.75})$$

Обмеження можна використати для того, щоб виразити m змінних (без обмеження спільності їх можна позначити x_1, x_2, \dots, x_m) через інші $(n-m)$ змінних, які можна розглядати як незалежні змінні. У точці мінімуму за наявності обмежень $f(\bar{x} + \bar{h}) - f(\bar{x}) \geq 0$ для всіх \bar{h} , що задовольняють умову $g_i(\bar{x} + \bar{h}) = g_i(\bar{x}) = 0$ при $i=1, \dots, m$.

Тоді з точністю до першого порядку мализни h_j

$$\sum_{j=1}^n h_j \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = 0 \quad \text{при } i = 1, \dots, m.$$

Останню умову можна переписати у вигляді

$$\sum_{j=1}^n h_j \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} \right) = 0, \quad (\text{A.76})$$

де $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ – множники Лагранжа.

Оскільки $h_{m+1}, h_{m+2}, \dots, h_n$ – це незалежні прирости, коефіцієнти при них повинні дорівнювати нулю, тобто

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = 0 \quad \text{при } j = m+1, \dots, n.$$

Прирости h_1, h_2, \dots, h_m не є незалежними, їх можна покласти рівними нулю при відповідному виборі множників Лагранжа у рівнянні (A.76). Таким чином, вибираючи множники $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ такими, що

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = 0 \quad \text{при } j = 1, \dots, m,$$

остаточно маємо

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = 0 \quad \text{при } j = 1, \dots, n. \quad (\text{A.77})$$

Отже, якщо визначити функцію Лагранжа у вигляді

$$F(\bar{x}, \lambda) = f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(\bar{x}), \quad (\text{A.78})$$

то необхідні умови мінімуму функції $f(\bar{x})$ за наявності обмежень можна записати так:

$$\frac{\partial F}{\partial x_j} = \frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^n \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = 0 \quad \text{при } j = 1, 2, \dots, n, \quad (\text{A.79})$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_i} = g_i(\bar{x}) = 0 \quad \text{при } i = 1, \dots, m. \quad (\text{A.80})$$

Зазначимо, що для допустимих значень \bar{x} (таких, що задовольняють обмеження) справедливе співвідношення

$$F(\bar{x}, \lambda) = f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^n \lambda_i g_i(\bar{x}) = f(\bar{x}).$$

У точці мінімуму за наявності обмежень на значення \bar{x}^* можна записати, що $f(\bar{x}^* + \vec{h}) - f(\bar{x}^*) \geq 0$, де \vec{h} задовольняє рівняння $g_i(\bar{x}^* + \vec{h}) = 0$ для всіх i . Таким чином,

$$F(\bar{x}^* + \vec{h}) - F(\bar{x}^*) = \sum_{j=1}^n \frac{\partial F}{\partial x_j} \cdot h_j + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n h_i \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} \cdot h_j + \dots \geq 0,$$

де похідні обчислюються в точці \bar{x}^* при $\lambda = \lambda^*$.

З урахуванням рівняння (A.79) одержимо для всіх \vec{h} , які задовольняють обмеження:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n h_i \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} \cdot h_j \geq 0.$$

Достатніми умовами мінімуму за наявності обмежень є рівняння (A.79) і (A.80), а також додатна визначеність квадратичної форми

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n h_i \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} \cdot h_j \quad (\text{A.81})$$

для значень \vec{h} , які задовольняють обмеження.

A.4.2. Обмеження у вигляді нерівностей

У цьому підпункті метод множників Лагранжа буде поширено на обмеження у вигляді нерівностей.

Нехай необхідно мінімізувати функцію $f(\bar{x})$ за наявності m обмежень вигляду $g_i(\bar{x}) \leq b_i$ ($i = 1, 2, \dots, m$). Указані обмеження не зменшують загальності, оскільки нерівність $\varphi(\bar{x}) \geq c$ можна записати у вигляді $-\varphi(\bar{x}) \leq -c$.

Зауваження. Досі немає методу, який гарантує існування розв'язку для задачі знаходження мінімуму з обмеженнями у вигляді нерівностей.

Обмеження у вигляді нерівностей можна звести до обмежень у вигляді рівностей додаванням до кожного з них додатної послаблюючої змінної u_i^2 :

$$g_i(\bar{x}) + u_i^2 = b_i$$

або

$$g_i(\bar{x}) + u_i^2 - b_i = 0.$$

Таким чином, задача зводиться до мінімізації функції $f(\bar{x})$ за наявності m обмежень у вигляді рівностей $g_i(\bar{x}) + u_i^2 - b_i = 0$. Згідно з процедурою попереднього підрозділу сформуємо функцію Лагранжа

$$F(\bar{x}, \lambda) = f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^n \lambda_i [g_i(\bar{x}) + u_i^2 - b_i]. \quad (\text{A.83})$$

Необхідні умови, що мають виконуватися у стаціонарній точці:

$$\frac{\partial F}{\partial x_j} = \frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^n \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = 0 \quad \text{при } j = 1, 2, \dots, n, \quad (\text{A.84})$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_i} = g_i(\bar{x}) + u_i^2 - b_i = 0 \quad \text{при } i = 1, 2, \dots, m, \quad (\text{A.85})$$

$$\frac{\partial F}{\partial u_i} = 2\lambda_i u_i = 0 \quad \text{при } i = 1, 2, \dots, m. \quad (\text{A.86})$$

Помноживши останнє рівняння на $u_i/2$, одержимо $\lambda_i / u_i^2 = 0$, звідки

$$\lambda_i (b_i - g_i(\bar{x})) = 0 \quad \text{при } i = 1, 2, \dots, m. \quad (\text{A.87})$$

Рівняння (A.84), (A.85) й (A.87) є необхідними умовами мінімуму в точці \bar{x}^* за наявності обмежень. Рівняння (A.85) є

іншим записом обмежень, $g_i(\bar{x}) \leq 0$. Рівняння (A.87) означає, що або $\lambda_i = 0$, або $b_i - g_i(\bar{x}^*) = 0$. Якщо $\lambda_i \neq 0$, то $g_i(\bar{x}^*) = b_i$, обмеження є активним та являє собою обмеження у вигляді рівності. З іншого боку, якщо обмеження є обмеженням у вигляді строгої нерівності $g_i(\bar{x}^*) < b_i$, то відповідний множник Лагранжа $\lambda_i = 0$. Справді, якщо $g_i(\bar{x}^*) < b_i$, то розглядається мінімум, що задовольняє обмеження, яке є неактивним і яким можна знехтувати, а відповідні множники $\lambda_i = 0$. Звичайно, заздалегідь не відомо, якими обмеженнями можна знехтувати.

Існує також додаткова умова, що має виконуватися в точці мінімуму за наявності обмежень, а саме, $\lambda_i \geq 0$. Доведемо це.

Припустимо, що рівняння (A.84), (A.85) та (A.87) справедливі в точці $(\bar{x}^*, \lambda^*, u^*)$. Якщо фактичним мінімумом функції за наявності обмежень є $z = f(\bar{x}^*)$, то можна розглядати z як функцію від b_i , а отже, зміни b_i будуть змінювати обмеження і, таким чином, змінювати саму функцію z . Покажемо, що

$$\frac{\partial z}{\partial b_i} = -\lambda_i^*, \quad \frac{\partial z}{\partial b_i} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial x_j}{\partial b_i}, \quad (\text{A.88})$$

де частинні похідні обчислюються в точці \bar{x}^* . Оскільки

$$g_k(\bar{x}) + u_k^2 = b_k, \text{ то}$$

$$\frac{\partial g_k}{\partial b_i} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial g_k}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial x_j}{\partial b_i} = \begin{cases} 0, & \text{якщо } i \neq k, \\ 1, & \text{якщо } i = k. \end{cases}$$

Тоді

$$\frac{\partial z}{\partial b_i} + \sum_{j=1}^n \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_j} = \frac{\partial z}{\partial b_i} + \lambda_i^* = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^n \lambda_k^* \frac{\partial g_k}{\partial x_j} \right) \cdot \frac{\partial x_j}{\partial b_i}.$$

Проте вираз у дужках під знаком суми дорівнює нулю згідно з рівнянням (A.84). Таким чином,

$$\frac{\partial z}{\partial b_i} = -\lambda_i^*.$$

Зі зростанням b_i область обмежень розширюється, що не може привести до збільшення значення z – мінімуму функції

$f(\bar{x})$, який перебуває всередині області обмежень, а може лише зменшити його. Таким чином,

$$\frac{\partial z}{\partial b_i} \leq 0,$$

тобто

$$\lambda_i^* \geq 0. \quad (\text{A.89})$$

Із необхідних умов мінімуму функції $f(\bar{x})$ за наявності обмежень $g_i(\bar{x}) \leq b_i$ ($i = 1, 2, \dots, m$) знаходимо \bar{x} та λ_i , для яких

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^n \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} &= 0 && \text{при } j = 1, \dots, n, \\ g_i(\bar{x}) &\leq b_i && \text{при } i = 1, 2, \dots, m, \\ \lambda_i (b_i - g_i(\bar{x})) &= 0 && \text{при } i = 1, 2, \dots, m, \\ \lambda_i &\geq 0 && \text{при } i = 1, 2, \dots, m. \end{aligned} \quad (\text{A.90})$$

(Знак λ_i міняється на протилежний, якщо розглядається максимум.) Умови (A.90) мають назву *умов Куна – Такера*.

A.4.3. Опуклість й увігнутість

Загальна задача математичного програмування, яка сформульована на початку цього розділу, дуже складна і дотепер не має повного розв'язання. Деякі труднощі, які звичайно зустрічаються в реальних задачах, графічно проілюстровано на рис. A.11. Тут зображено лінії сталого рівня функції. При переміщенні від точки \bar{x}^* – точки мінімуму функції за відсутності обмежень – значення функції зростатимуть. На рис. A.11 показано також межі області обмежень $g_i(\bar{x}) = b_i$, а сама область заштрихована.

На рис. A.11, *a* мінімум функції за наявності обмежень збігається з мінімумом функції без обмежень. Усі обмеження мають вигляд строгих нерівностей, а отже, тут можна знехтувати обмеженнями і розв'язати задачу методами, що розглядалися у п. A.2 та п. A.3.

На рис. A.11, *б* точка мінімуму за наявності обмежень лежить на кривій $g_2(\bar{x}) = b_2$, а два інші обмеження неактивні.

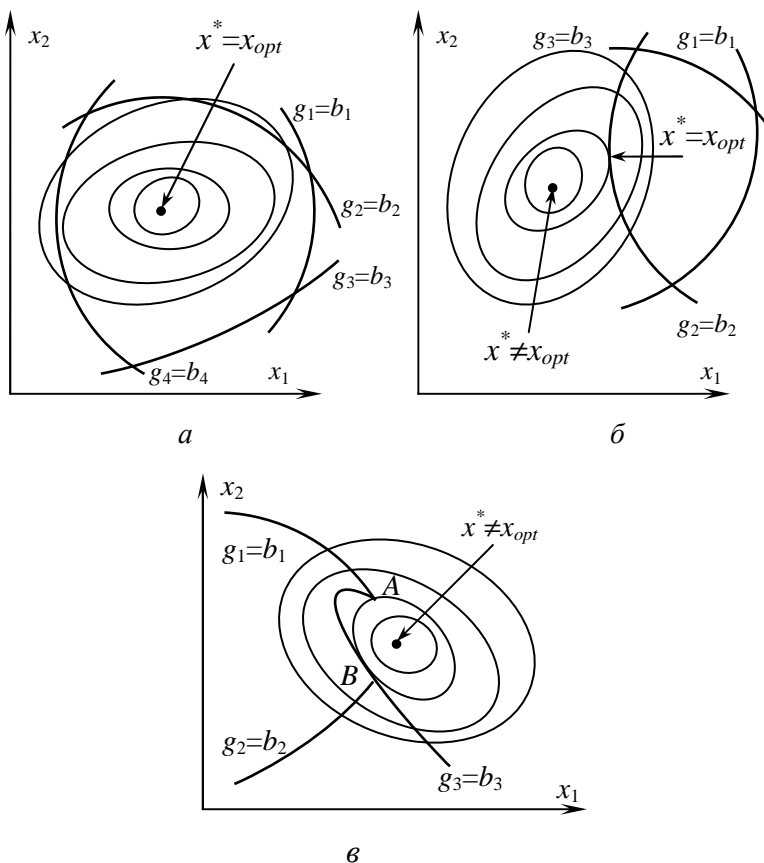


Рис. А.11. Положення точки мінімуму у випадку різних обмежень

Отже, тут також можна знехтувати обмеженнями $g_1(\bar{x}) = b_1$ та $g_3(\bar{x}) = b_3$ і розв'язати цю задачу як задачу з обмеженнями у вигляді рівностей, враховуючи тільки обмеження $g_2(\bar{x}) = b_2$.

Із цього випливає, що в точці мінімуму \bar{x} за наявності обмежень справедливе співвідношення $\nabla f(\bar{x}) = \lambda \cdot \nabla g_2(\bar{x})$, оскільки напрямок $\nabla f(\bar{x})$ перпендикулярний лінії сталого рівня й межі області обмежень у даній точці. (Порівняйте з рівнянням (А.84)).

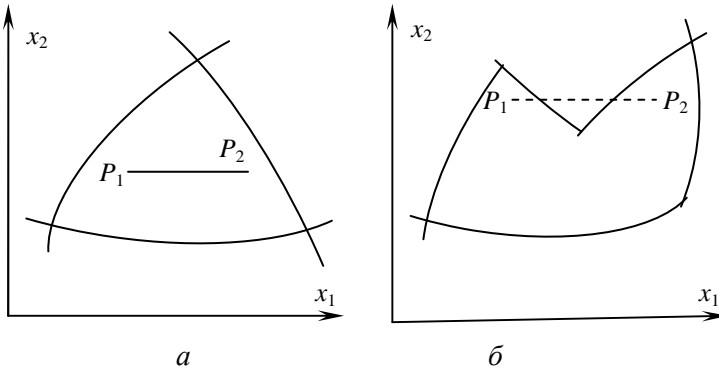


Рис. А.12. До визначення опуклої функції у плоскому випадку

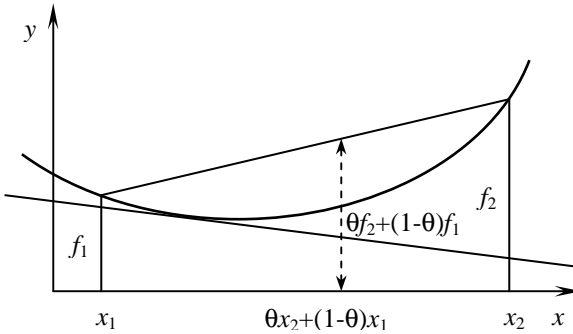


Рис. А.13. До визначення опуклої функції в одновимірному випадку

Через наявність обмежень також можлива поява локального мінімуму. Це може відбутися навіть у випадку, коли за відсутності обмежень функція має тільки одну точку мінімуму (рис. А.11, е). Із рисунка видно, що за відсутності обмежень функція має лише одну точку мінімуму. Однак для задачі з обмеженнями обидві точки A і B є точками локального мінімуму, оскільки в жодній із допустимих точок у найближчих околах A або B функція не набуває менших значень.

Деяких із розглянутих вище труднощів вдається уникнути, якщо обмежитися випадком, коли область обмежень опукла, а функція, що мінімізується (максимізується), опукла (увігнута).

Визначення. Область є опуклою, якщо відрізок прямої, що з'єднує будь-які дві точки області, належить цій області.

Отже, якщо x_1 та x_2 належать області, то будь-яка точка вигляду $\theta x_2 + (1-\theta)x_1$, де $0 < \theta < 1$, належить також цій області. На рис. А.12, а зображено опуклу область, а на рис. А.12, б неопуклу.

Функція $f(\bar{x})$ є опуклою на опуклій області X , якщо для будь-яких двох точок $x_1, x_2 \in X$, виконується співвідношення $f[\theta \bar{x}_2 + (1-\theta)\bar{x}_1] \leq \theta \cdot f(\bar{x}_2) + (1-\theta) \cdot f(\bar{x}_1)$ при $0 < \theta < 1$. (А.91)

Для функції однієї змінної це означає, що вона лежить нижче хорди, яка з'єднує будь-які дві точки її графіка (рис. А.13).

Для увігнутої функції, що задана на опуклій множині, варто змінити знак нерівності, у результаті чого маємо співвідношення

$$f[\theta \bar{x}_2 + (1-\theta)\bar{x}_1] \geq \theta \cdot f(\bar{x}_2) + (1-\theta) \cdot f(\bar{x}_1). \quad (\text{А.92})$$

Така функція лежить вище хорди, що з'єднує будь-які дві точки її графіка.

Якщо у співвідношеннях (А.91) та (А.92) нерівності замінити на строгі нерівності, то функція $f(\bar{x})$ буде строго опуклою або строго увігнутою.

Існує ще дві важливі властивості опуклих (увігнутих) функцій, які можна вивести зі співвідношень (А.91) та (А.92).

Якщо функція $f(\bar{x})$ опукла на опуклій області X і $\bar{x}_1, \bar{x}_2 \in X$, то

$$f(\bar{x}_2) \geq f(\bar{x}_1) + (\bar{x}_2 - \bar{x}_1)^T \nabla f(\bar{x}_1). \quad (\text{А.93})$$

Для увігнутих функцій знак нерівності змінюється на протилежний.

Доведемо справедливості нерівності (А.93). Оскільки $f(\bar{x})$ опукла, то для $0 < \theta < 1$ справедливе співвідношення (А.91), отже,

$$f[\bar{x}_1 + \theta(\bar{x}_2 - \bar{x}_1)] - f(\bar{x}_1) \leq \theta \cdot [f(\bar{x}_2) - f(\bar{x}_1)]$$

і

$$f(\bar{x}_2) \geq f(\bar{x}_1) + \frac{f[\bar{x}_1 + \theta(\bar{x}_2 - \bar{x}_1)] - f(\bar{x}_1)}{\theta}.$$

Проте за теоремою про середнє

$f[\bar{x}_1 + \theta(\bar{x}_2 - \bar{x}_1)] = f(\bar{x}_1) + \theta \cdot (\bar{x}_2 - \bar{x}_1)^T \nabla f[\bar{x}_1 + \lambda\theta(\bar{x}_2 - \bar{x}_1)]$,
де $0 < \lambda < 1$, тобто похідна обчислюється в деякій точці, що лежить між точками x_1 та $x_1 + \theta(x_2 - x_1)$. Отже,

$$f(\bar{x}_2) \geq f(\bar{x}_1) + (\bar{x}_2 - \bar{x}_1)^T \nabla f[\bar{x}_1 + \theta\lambda(\bar{x}_2 - \bar{x}_1)]$$

і при $\theta \rightarrow 0$ одержуємо співвідношення (А.93).

Із співвідношення (А.93) випливає, що опуклі функції однієї змінної (двох змінних) лежать вище будь-якої дотичної лінії (площини) до даної функції (див. рис. А.13).

Покажемо, що функція n -змінних опукла, якщо її гессіан

$$\underline{H} = \left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right\}$$

додатно визначений. Згідно з формулою Тейлора запишемо

$$f(\bar{x}) = f(\bar{x}_1) + (\bar{x} - \bar{x}_1)^T \nabla f(\bar{x}_1) + 1/2 \cdot (\bar{x} - \bar{x}_1)^T \underline{H} (\bar{x} - \bar{x}_1),$$

де \underline{H} обчислюється в точці $\bar{x}_1 + \lambda(\bar{x}_2 - \bar{x}_1)$ та $0 < \lambda < 1$.

Таким чином, досить показати, що додатно визначена квадратична функція $1/2 \cdot \bar{x}^T \underline{H} \bar{x}$ є опуклою.

Нехай \bar{x}_1 та \bar{x}_2 – довільні значення \bar{x} і нехай $\bar{x} = \theta\bar{x}_2 + (1-\theta)\bar{x}_1$, де $0 < \theta < 1$. Тоді

$$\begin{aligned} \bar{x}^T \underline{H} \bar{x} - \theta \cdot \bar{x}_2^T \underline{H} \bar{x}_2 - (1-\theta) \cdot \bar{x}_1^T \underline{H} \bar{x}_1 &= \theta^2 \cdot \bar{x}_2^T \underline{H} \bar{x}_2 + 2\theta(1-\theta) \times \\ &\times \bar{x}_2^T \underline{H} \bar{x}_1 + (1-\theta)^2 \bar{x}_1^T \underline{H} \bar{x}_1 - \theta \cdot \bar{x}_2^T \underline{H} \bar{x}_2 - (1-\theta) \cdot \bar{x}_1^T \underline{H} \bar{x}_1 = \\ &= -\theta(1-\theta)(\bar{x}_2 - \bar{x}_1)^T \underline{H} (\bar{x}_2 - \bar{x}_1). \end{aligned}$$

Оскільки $0 < \theta < 1$, то $(1-\theta) > 0$ і $-\theta(1-\theta) \leq 0$. Отже, якщо матриця \underline{H} додатно визначена, то

$$[\theta\bar{x}_2 + (1-\theta)\bar{x}_1]^T \underline{H} [\theta\bar{x}_2 + (1-\theta)\bar{x}_1] \leq \theta \cdot \bar{x}_2^T \underline{H} \bar{x}_2 - (1-\theta) \cdot \bar{x}_1^T \underline{H} \bar{x}_1. \quad (\text{А.94})$$

Що й потрібно було довести.

Доведемо наступну **теорему**: якщо $f(\bar{x})$ – опукла функція на області обмежень, що задана нерівностями $g_i(\bar{x}) \leq b_i$, де $g_i(\bar{x})$ – опуклі функції, то локальний мінімум функції $f(\bar{x})$ у цій області є глобальним мінімумом у цій самій області.

Припустимо, що в точці \bar{x}^* функція досягає глобального мінімуму, а в точці \bar{x}_0 – локального мінімуму, причому $f(\bar{x}^*) < f(\bar{x}_0)$. Обидві ці точки є допустимими, а оскільки допустима область і функція $f(\bar{x})$ є опуклими, то

$$\begin{aligned} f[\theta\bar{x}^* + (1-\theta)\bar{x}_0] &\leq \theta f(\bar{x}^*) + (1-\theta)f(\bar{x}_0) \leq \\ &\leq \theta f(\bar{x}_0) + (1-\theta)f(\bar{x}_0) \leq \\ &\leq f(\bar{x}_0) \end{aligned}$$

для довільного $\theta: 0 < \theta < 1$.

Проте, якщо при цьому θ досить мала, то відрізок $\theta\bar{x}^* + (1-\theta)\bar{x}_0$ лежить усередині δ -околу точки \bar{x}_0 . Тоді, оскільки в точці \bar{x}_0 функція досягає локального мінімуму, $f(\bar{x}^*) \geq f(\bar{x}_0)$. Отже, ми приходимо до протиріччя і точки \bar{x}^* та \bar{x}_0 повинні збігатися.

Для задачі мінімізації функції $f(\bar{x})$ при обмеженнях $g_i(\bar{x}) \leq b_i$, де $f(\bar{x})$ й $g_i(\bar{x})$ – опуклі функції, необхідні умови Куна – Такера (див. співвідношення (A.90)) є також і достатніми. Доведемо це твердження.

Для даного випадку функція Лагранжа

$$F(\bar{x}, \lambda, \bar{u}) = f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^n \lambda_i [g_i(\bar{x}) + u_i^2 - b_i]$$

є сумою опуклих функцій, тому вона сама також опукла, а всі множники $\lambda_i \geq 0$. Отже, функція F має глобальний мінімум у точці, де її похідні малі, а така точка єдина. Тому необхідні умови є також й достатніми.

A.4.4. Прямі методи пошуку. Комплексний метод

Труднощі, які зустрічаються при спробі використати існуючі методи пошуку без обмежень, підштовхнули Бокса в 1964 році до створення свого методу. Власне кажучи, цей метод є глибокою модифікацією симплекс-методу Нелдера – Міда, що

дозволяє враховувати обмеження. Бокс назвав його комплексним методом.

Нехай потрібно мінімізувати функцію $f(\vec{x})$, коли $\vec{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ визначаються явними обмеженнями

$$l_j \leq x_j \leq u_j \text{ при } j = 1, 2, \dots, n, \quad (\text{A.95})$$

а також неявними обмеженнями

$$g_i(\vec{x}) \leq b_i \text{ при } j = 1, 2, \dots, m. \quad (\text{A.96})$$

Якщо цільова функція $f(\vec{x})$ опукла і функції $g_i(\vec{x})$ теж опуклі, то задача матиме єдиний розв'язок. Значення l_j та u_j представляють собою нижню й верхню межі змінних. Якщо в конкретній задачі задані змінні теоретично не мають обмежень, то припущення про наявність у них "безпечних" меж, тобто меж, які включають оптимум, дозволяє застосовувати комплексний метод.

Указаний метод є ітераційним. Вважаємо, що відомі значення n та m , межі l_j , u_j , а також початкова точка \vec{x}_i , яка задовольняє всі обмеження (див. нерівності (A.95) та (A.96)). У першу чергу вибирають k точок, які задовольняють обмеження, а також обчислюють цільову функцію в цих k точках. Множина таких точок називається *комплексом*. Бокс виявив, що k має бути більше $(n+1)$, де n – кількість точок, що використовувалися в симплекс-методі Нелдера – Міда, і поклав $k = 2n$.

Як згадувалося вище, передбачається, що точка \vec{x}_i , яка задовольняє всі обмеження, задана. Інші точки, що задовольняють нерівності (A.95), можна обрати в такий спосіб:

$$x_{ij} = l_j + r(u_j - l_j), \quad (\text{A.97})$$

для $j = 1, 2, \dots, n$ й $i = 2, 3, \dots, k$, де r — псевдовипадкова рівномірно розподілена величина в інтервалі $(0, 1)$.

Для даного j вибрані згідно з рівнянням (A.97) точки будуть автоматично задовольняти нерівності (A.95). Якщо ці точки задовольняють також нерівності (A.96), то їх обирають як початкові точки комплексу. Якщо точка, що обрана відповідно до рівняння (A.97), не задовольняє нерівності (A.96), то її переміщують на половину відстані до центра ваги множини вже прийнятих точок, тобто формується точка

$$\vec{x}'_i = \frac{\vec{x}_i + \vec{x}_c}{2}, \quad (\text{A.98})$$

де

$$\bar{x}_c = \frac{1}{i-1} \sum_{e=1}^{i-1} \bar{x}_e. \quad (\text{A.99})$$

Якщо точка у співвідношенні (A.98) не є допустимою, то описана співвідношенням (A.97) процедура повторюється знову доти, поки точка не стане допустимою. Якщо функція $g_i(\bar{x})$ опукла, то зрештою обмеження будуть виконані. А оскільки, точка \bar{x}_i перебуває всередині області обмежень, то комплекс складатиметься лише з допустимих точок.

Далі точки комплексу відповідно зі значеннями функції впорядковуються.

Тепер ми підійшли безпосередньо до побудови ітераційної процедури комплексного методу, яка виконує пошук мінімуму функції переміщенням у його напрямку всередині області обмежень.

Процедура комплексного методу складається з таких кроків [2].

1. Знаходимо точку з найбільшим значенням функції \bar{x}_h та знаходимо центр \bar{x}_0 інших $(k-1)$ точок.
2. Намагаємося зміститися від точки \bar{x}_h й одержати при цьому точку \bar{x}_r , що є відображенням точки \bar{x}_h відносно точки \bar{x}_0 , використовуючи коефіцієнт відображення $\alpha > 1$. Цю процедуру можна записати у вигляді

$$\bar{x}_r = (1 + \alpha) \cdot \bar{x}_0 - \alpha \cdot \bar{x}_h. \quad (\text{A.100})$$

3. Перевіряємо, чи є точка \bar{x}_r допустимою:
 - а) якщо точка \bar{x}_r не є допустимою і не виконується обмеження для l_j , то покладаємо $x_{rj} = l_j + 10^{-6}$; якщо не виконується обмеження для u_j , то покладаємо $x_{rj} = u_j - 10^{-6}$.
 - б) якщо не виконуються обмеження, то точку переміщаємо на половину відстані між \bar{x}_r і центром \bar{x}_0 , тобто

$$\bar{x}_r(\text{new}) = (\bar{x}_r + \bar{x}_0)/2. \quad (\text{A.101})$$

Потім виконуємо повторну перевірку на допустимість і крок 3 повторюємо доти, поки не буде отримана допустима точка.

4. Якщо точка \bar{x}_r є допустимою, то обчислюємо значення функції $f(\bar{x}_r)$ і порівнюємо з $f(\bar{x}_h)$ – найбільшим значенням функції.

Якщо $f(\bar{x}_r) > f(\bar{x}_h)$, тобто "гірше", ніж найбільше значення, отримане раніше, то точка \bar{x}_r переміщується до центра \bar{x}_0 на половину відстані між ними, тобто

$$\bar{x}_r(\text{new}) = (\bar{x}_r + \bar{x}_0)/2,$$

і процес повертається на крок 3.

Якщо $f(\bar{x}_r) < f(\bar{x}_h)$, то точка \bar{x}_h міняється на точку \bar{x}_r , потім точки і значення функції комплексу знову впорядковуються.

Далі розраховуємо середнє квадратичне відхилення σ для k значень функції і максимальну відстань d_m між двома точками комплексу, які використовуються при перевірці збіжності методу. Першу величину можна розрахувати так:

$$\sigma = \left\{ \sum_{e=1}^k [f(\bar{x}_e) - \bar{f}]^2 / k \right\}^{1/2}, \quad (\text{A.102})$$

де

$$\bar{f} = \frac{1}{k} \sum_{e=1}^k f(\bar{x}_e). \quad (\text{A.103})$$

Проте для обчислення σ^2 краще використати вираз

$$\sigma^2 = \left\{ \sum_{e=1}^k [f(\bar{x}_e)]^2 - \frac{1}{k} \left[\sum_{e=1}^k f(\bar{x}_e) \right]^2 \right\} / k. \quad (\text{A.104})$$

5. Величини σ^2 і d_m перевіряємо на збіжність. Якщо обидві ці величини досить малі, то процедура пошуку мінімуму закінчується. У протилежному випадку необхідно повернутися на крок 1 і повторити процедуру наново.

A.4.5. Штрафні функції

Основна ідея методу штрафних функцій полягає у перетворенні задачі мінімізації функції $z = f(\bar{x})$ із відповідними

обмеженнями, накладеними на \bar{x} , на задачу пошуку мінімуму функції *без обмежень* [2, 36]:

$$Z = f(\bar{x}) + P(\bar{x}). \quad (\text{A.105})$$

Функція $P(\bar{x})$ є штрафною. Штрафну функцію вибирають таким чином, щоб при порушенні обмежень вона "штрафувала" функцію Z , тобто збільшувала її значення. У цьому випадку мінімум функції Z міститиметься всередині області обмежень. Вибір функції $P(\bar{x})$, що задовольняє цю умову, не єдиний. Сформулюємо задачу мінімізації. Отже, потрібно мінімізувати функцію

$$z = f(\bar{x}) \quad (\text{A.106})$$

при обмеженнях

$$c_j(\bar{x}) \geq 0, j = 1, 2, \dots, m.$$

Функцію $P(\bar{x})$ зручно записати у вигляді

$$P(\bar{x}) = r \cdot \sum_{j=1}^m \frac{1}{c_j(\bar{x})}, \quad (\text{A.108})$$

де r – додатна величина. Тоді функція $Z = \varphi(\bar{x}, r)$ набуває вигляду

$$Z = \varphi(\bar{x}, r) = f(\bar{x}) + r \cdot \sum_{j=1}^m \frac{1}{c_j(\bar{x})}. \quad (\text{A.109})$$

Якщо \bar{x} набуває допустимих значень, тобто значень, для яких $c_j(\bar{x}) \geq 0$, то Z набуває значень, які більші відповідних значень $f(\bar{x})$ – початкової цільової функції даної задачі, і цю різницю можна зменшити за рахунок того, що r може бути дуже малою величиною. Проте, якщо \bar{x} набуває значень, які хоч і допустимі, але близькі до межі області обмежень, і принаймні одна з функцій $c_j(\bar{x})$ близька до нуля, то значення функції $P(\bar{x})$, а отже, і значення функції Z стануть дуже великі. Таким чином, вплив функції $P(\bar{x})$ полягає у створенні "гребеня із крутими краями" уздовж кожної межі області обмежень. Отже, якщо, починаючи з допустимої точки, здійснювати пошук мінімуму функції $\varphi(\bar{x}, r)$ без обмежень, то мінімум для задачі з обмеженнями досягатиметься також усередині допустимої

області. Вважаючи r досить малою величиною – такою, щоб вплив $P(\bar{x})$ був малим у точці мінімуму, ми можемо зробити точку мінімуму функції $\varphi(\bar{x}, r)$ без обмежень такою, що збігається з точкою мінімуму функції $f(\bar{x})$ з обмеженнями.

Розглянемо дуже простий приклад, який дозволяє зрозуміти стратегію вибору штрафних функцій.

Приклад

Використовуючи штрафну функцію, що задана рівнянням (А.108), мінімізувати функцію $f(x) = x$ при обмеженнях $x > 2$, тобто $x - 2 > 0$. Мінімальним значенням функції є $f(2) = 2$. Як за допомогою штрафної функції знайти розв'язок? Розглянемо нову функцію

$$\varphi(x, r) = x + \frac{r}{x - 2}.$$

На рис. А.14 зображено графік функції $\varphi(x, r)$ й показано положення точок її мінімуму для різних значень $r = \{1; 0,25; 0,01\}$.

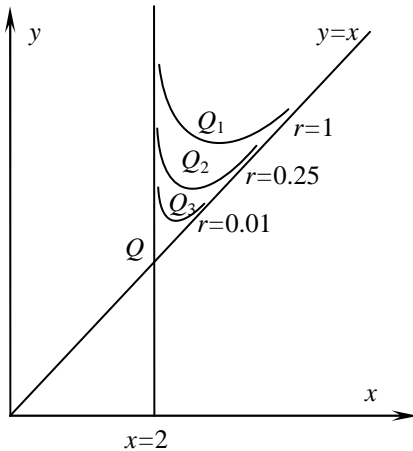


Рис. А.14. Приклад використання штрафних функцій

Область обмежень лежить праворуч від вертикальної прямої $x = 2$. Неважко помітити, що послідовність точок Q_1, Q_2, Q_3 прямує до точки Q – мінімуму функції за наявності обмежень. Справді, знайдемо мінімум функції $\varphi(x,r)$ методом, що наведений у підп. А.1.1. Нехай

$$\frac{d\varphi}{dx} = 1 - \frac{r}{(x-2)^2}.$$

Отже, якщо $d\varphi/dx = 0$, $(x-2)^2 = r$, тобто $x = 2 + \sqrt{r}$. Тоді

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{2r}{(x-2)^3}$$

і мінімуму функція досягає при $x = 2 + \sqrt{r}$ у середині області обмежень.

Таким чином, функція $\varphi(x,r)$ при $x = 2 + \sqrt{r}$ має мінімум, що дорівнює $2 + 2\sqrt{r}$. Тоді Q_1 – це точка з координатами (3; 4), Q_2 – точка з координатами (2,5; 3), Q_3 – точка з координатами (2,1; 2,2). Ясно, що при $r \rightarrow 0$ мінімум без обмежень функції $\varphi(x,r)$ наближається до значення 2 і мінімальною точкою є точка $x = 2$.

У загальному випадку неможливо аналітично знайти положення мінімуму функції $\varphi(x,r)$, розглядаючи її як звичайну функцію від r . Для його визначення необхідно скористатися числовими методами.

Значимо, що у випадку, коли цільова функція $f(\bar{x})$ опукла, а функція $c_j(\bar{x})$ увігнута, функція $\varphi(x,r)$, що задана рівнянням (А.108), є опуклою функцією в області обмежень, причому остання також є опуклою. Таким чином, $\varphi(x,r)$ має для даного значення r єдиний мінімум.

Якщо \bar{x}_1 і \bar{x}_2 – точки, що належать допустимій області, тобто $c_j(\bar{x}_1) \geq 0$ та $c_j(\bar{x}_2) \geq 0$ для $j = 1, 2, \dots, m$, і оскільки, функція $c_j(\bar{x})$ є опуклою, то при $0 < \theta < 1$ справедлива нерівність

$$c_j(\theta \cdot \bar{x}_2 + (1-\theta) \cdot \bar{x}_1) \geq \theta \cdot c_j(\bar{x}_2) + (1-\theta) \cdot c_j(\bar{x}_1) \geq 0.$$

Отже, допустима область є опуклою, а точка $\bar{x}_2 + (1-\theta)\bar{x}_1$ при $0 < \theta < 1$ також є допустимою.

Крім того, функція $1/c_j(\bar{x})$ є опуклою для всіх \bar{x} , що задовольняють нерівності $c_j(\bar{x}) \geq 0$. Якщо ж $h(\bar{x}) = 1/c_j(\bar{x})$, то

$$\nabla h(\bar{x}) = \frac{-\nabla c_j(\bar{x})}{[c_j(\bar{x})]^2}.$$

Отже, гесіан функції $h(\bar{x})$ має вигляд

$$\underline{H}(\bar{x}) = -\frac{\underline{C}(\bar{x})}{[c_j(\bar{x})]^2} + \frac{2\nabla c(\bar{x})\nabla c(\bar{x})^T}{[c_j(\bar{x})]^3},$$

де $C(\bar{x})_{ik} = \partial^2 c_j(\bar{x}) / \partial x_i \partial x_j$ – гесіан функції $c_j(\bar{x})$. Тоді, якщо \bar{p} – довільний вектор, то справедлива рівність

$$\bar{p}^T \underline{H}(\bar{x}) \bar{p} = -\frac{\bar{p}^T \underline{C}(\bar{x}) \bar{p}}{[c_j(\bar{x})]^2} + \frac{2[\bar{p}^T \nabla c_j(\bar{x})]^2}{[c_j(\bar{x})]^3}.$$

Зауважимо, що завжди $\bar{p}^T \underline{H}(\bar{x}) \bar{p} > 0$, оскільки $c_j(\bar{x}) \geq 0$ – опукла функція, а отже, $\underline{C}(\bar{x})$ – від’ємно визначена матриця. Таким чином, матриця $\underline{H}(\bar{x})$ додатно визначена і $h(\bar{x}) = 1/c_j(\bar{x})$ опукла в усій області визначення. Як наслідок маємо таке: при $r > 0$ функція $P(\bar{x})$, що задана рівнянням (A.108), і функція $\varphi(\bar{x}, r)$, що задана рівнянням (A.109), також опуклі.

Тепер можна узагальнити результат, який отримано у прикладі в підп. A.4.5, на випадок загальної задачі з обмеженнями (див. рівняння (A.106) і (A.107)).

Припустимо, що $\bar{x}_1^*, \bar{x}_2^*, \dots, \bar{x}_k^*, \dots$ – мінімальні точки функції $\varphi(\bar{x}, r)$ для спадної послідовності значень $r_1, r_2, \dots, r_k, \dots$, що прямує до нуля. Тоді послідовність точок $\bar{x}_1^*, \bar{x}_2^*, \dots, \bar{x}_k^*, \dots$ збігається до оптимального розв’язку задачі з обмеженнями при $r_k \rightarrow 0$. Маємо

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \bar{x}_k^* = \bar{x}^* \quad (\text{A.110})$$

і

$$\lim_{r_k \rightarrow 0} [\min \varphi(\bar{x}, r_k)] = f(\bar{x}^*), \quad (\text{A.111})$$

де \bar{x}^* – мінімальна точка функції $f(\bar{x})$ за наявності обмежень.

Отриманий результат можна довести в такий спосіб. Оскільки $f(\bar{x})$ неперервна функція й $f(\bar{x}^*) \leq f(\bar{x})$ для всіх допустимих точок, то, задаючи довільне досить мале значення ϵ , можна знайти допустиму точку \bar{x}' таку, що

$$f(\bar{x}) \leq f(\bar{x}') + \epsilon/2. \quad (\text{A.112})$$

Враховуючи те, що r_k – спадна послідовність, яка збігається до нуля, можна знайти таке значення K , що для $k > K$ справедлива нерівність

$$r_k \leq \left\{ \frac{\epsilon}{2m} \min_j \left[\frac{1}{c_j(\bar{x}')} \right] \right\}. \quad (\text{A.113})$$

Оскільки $P(\bar{x}) > 0$, то з визначення функції $\varphi(\bar{x}, r)$, маємо

$$f(\bar{x}^*) \leq \min_k \varphi(\bar{x}, r_k) = \varphi(\bar{x}_k^*, r_k), \quad (\text{A.114})$$

де \bar{x}_k^* – мінімальна точка функції $\varphi(\bar{x}, r_k)$ для задачі без обмежень.

Крім того, якщо $k > K$, то $r_k < r_K$ і справедлива нерівність

$$\varphi(\bar{x}_k^*, r_k) \leq \varphi(\bar{x}_K^*, r_k), \quad (\text{A.115})$$

яка є наслідком системи нерівностей

$$f(\bar{x}^*) \leq \varphi(\bar{x}_k^*, r_k) \leq \varphi(\bar{x}_K^*, r_k) < \varphi(\bar{x}_K^*, r_K). \quad (\text{A.116})$$

Остання, у свою чергу, є наслідком нерівності

$$\varphi(\bar{x}_K^*, r_K) > \varphi(\bar{x}_K^*, r_k) \quad (\text{A.117})$$

і визначення (A.114).

Доведемо нерівність (A.117). Оскільки \bar{x}_k^* мінімізує функцію $\varphi(\bar{x}, r_k)$, то в будь-якій іншій точці області \bar{x} , зокрема в точці \bar{x}_K^* , ця функція набуватиме значень, що більші ніж $\varphi(\bar{x}_k^*, r_k)$. Тому, враховуючи те, що $r_k < r_K$, маємо

$$\varphi(\bar{x}_K^*, r_K) = f(\bar{x}_K^*) + r_K \cdot \sum_{j=1}^m \frac{1}{c_j(\bar{x}_K^*)} >$$

$$> f(\bar{x}_K^*) + r_K \cdot \sum_{j=1}^m \frac{1}{c_j(\bar{x}_K^*)},$$

що й потрібно було довести.

Значення \bar{x}_K^* мінімізує функцію $\varphi(\bar{x}, r_K)$, тобто

$$\varphi(\bar{x}_K^*, r_K) = \varphi(\bar{x}', r_K) = f(\bar{x}') + r_K \cdot \sum_{j=1}^m \frac{1}{c_j(\bar{x}')}. \quad (\text{A.118})$$

Отже, із рівнянь (A.117) і (A.118) маємо

$$f(\bar{x}^*) \leq \varphi(\bar{x}_k^*, r_k) \leq f(\bar{x}') + r_K \cdot \sum_{j=1}^m \frac{1}{c_j(\bar{x}')}. \quad (\text{A.119})$$

Із рівняння (A.113) випливає

$$f(\bar{x}') + r_K \cdot \sum_{j=1}^m \frac{1}{c_j(\bar{x}')} \leq f(\bar{x}') + \frac{\varepsilon}{2}. \quad (\text{A.120})$$

Тоді з рівняння (A.112) дістаємо

$$f(\bar{x}^*) \leq \varphi(\bar{x}_k^*, r_k) < f(\bar{x}') + \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2}$$

або

$$\varphi(\bar{x}_k^*, r_k) - f(\bar{x}^*) < \varepsilon. \quad (\text{A.121})$$

Оскільки ε можна обрати як завгодно малим, то завжди знайдеться таке k , при якому

$$f(\bar{x}^*) < \varphi(\bar{x}_k^*, r_k) < f(\bar{x}^*) + \varepsilon.$$

Таким чином,

$$\lim_{\substack{k \rightarrow \infty \\ r_k \rightarrow 0}} \varphi(\bar{x}_k^*, r_k) = f(\bar{x}^*). \quad (\text{A.122})$$

Із наведеного вище доведення випливає, що при $r_k \rightarrow 0$

$$f(\bar{x}_k^*) \rightarrow f(\bar{x}^*) \quad \text{і} \quad r_k \cdot \sum_{j=1}^m \frac{1}{c_j(\bar{x}_k^*)} \rightarrow 0. \quad (\text{A.123})$$

Можна довести, що $f(\bar{x}_1^*), f(\bar{x}_2^*), \dots, f(\bar{x}_k^*), \dots$ утворюють спадну послідовність

$$f(\bar{x}_{k+1}^*) < f(\bar{x}_k^*). \quad (\text{A.124})$$

Тоді у випадку, коли функція $f(\bar{x})$ опукла, а функції $c_j(\bar{x})$ при $j = 1, \dots, m$ увігнуті, очевидно, що функція $f(\bar{x})$ за наявності обмежень має єдиний мінімум.

A.4.6. Метод SUMT Фіакко й Маккорміка

Результати попереднього підрозділу показують, що можна розв'язати задачу мінімізації з обмеженнями (тобто мінімізувати функцію $f(\bar{x})$ при обмеженнях $c_j(\bar{x}) \geq 0$), розв'язуючи для послідовності значень r , що прямує до нуля, задачу без обмежень такого вигляду:

$$\text{мінімізувати функцію } \varphi(\bar{x}, r) = f(\bar{x}) + r \cdot \sum_{j=1}^m \frac{1}{c_j(\bar{x})}.$$

Метод SUMT (sequential unconstrained minimisation technique) уперше запропоновано Керролом в 1961 році. Його ідеї були досліджені Фіакко й Маккорміком, які не тільки обґрунтували його теоретично, у тому числі довели збіжність методу, але і запропонували його реалізацію. Цей метод не можна використати так, як це зроблено у прикладі в підп. A.4.5, оскільки далеко не завжди можна знайти оптимальну точку для функцій $\varphi(\bar{x}, r)$ у вигляді функції $\bar{x}^*(r)$, границю якої при $r \rightarrow 0$ можна дослідити.

Тому при застосуванні цього методу на практиці необхідно побудувати обчислювальний алгоритм, що використовує теоретичні властивості збіжності, які розглядалися в попередньому підрозділі. На перший погляд тут не виникає жодних труднощів. Для заданих функції $f(\bar{x})$ та обмежень $c_j(\bar{x}) \geq 0$, $j = 1, \dots, m$, необхідно вибрати початкове значення $r = r_0$, щоб побудувати функцію $\varphi(\bar{x}, r_0)$, яка мінімізується без обмежень методом DFP, що викладений у підп. A.3.3. Знайшовши мінімум функції $\varphi(\bar{x}, r_0)$, слід зменшити значення r . Це можна зробити ефективно і просто, якщо взяти $r_1 = r_0 / c$, де константа $c > 1$. Звичайно беруть $c = 10$, $c = 12$, $c = 16$ тощо. Потім потрібно мінімізувати функцію $\varphi(\bar{x}, r_1)$, для чого знову використовують метод DFP. Таким чином будується ітераційна процедура. На

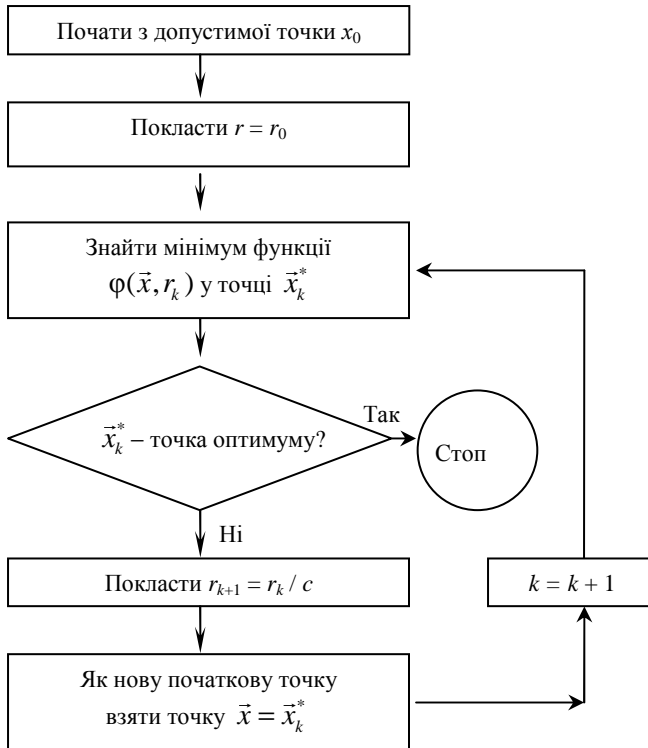


Рис. А.15. Блок-схема методу SUMT

k -му кроці мінімізується функція $\varphi(\bar{x}, r_k)$, мінімум якої міститься в точці \bar{x}_k^* . Важливо те, що її можна використати надалі як початкову точку в ітераційній процедурі мінімізації функції $\varphi(\bar{x}, r_{k+1})$, де $r_{k+1} = r_k / c$. Очевидно, що послідовність r_k спадає і прямує до нуля при $k \rightarrow \infty$. Отже, послідовність точок мінімумів буде сходитися до розв'язку задачі з обмеженнями.

На рис. А.15 зображено блок-схему методу SUMT. Уточнимо деякі особливості його алгоритму.

Вважаємо, що на початку процедури існує допустима точка. Важливо, щоб у процесі наступних обчислень усі проміжні точки належали допустимій області. Метод DFP є градієнтним методом мінімізації, що використовує при одновимірному пошуку кубічну інтерполяцію. Тоді при наближенні точки \bar{x} до межі із середини допустимої області $\varphi(\bar{x}, r) \rightarrow \infty$, а при наближенні точки \bar{x} до границі ззовні допустимої області $\varphi(\bar{x}, r) \rightarrow -\infty$. Таким чином, якщо пошук здійснюється вздовж прямої, що з'єднає дві точки, одна з яких лежить усередині, а інша поза областю обмежень, кубічна інтерполяція виявляється неприйнятною, оскільки функція має розрив уздовж даної прямої. Отже, якщо мінімум на якомусь кроці буде знайдено поза допустимою областю, метод DFP не дозволить знов увійти в область обмежень. Тому при побудові алгоритму методом DFP необхідно ретельніше досліджувати подібні виключення.

Вибір початкового значення r може виявитися важливим із погляду скорочення кількості ітерацій при мінімізації функції $\varphi(\bar{x}, r)$. Якщо спочатку для того, щоб функція $\varphi(\bar{x}, r)$ мало відрізнялася від функції $f(\bar{x})$, r обрано дуже малим, метод буде сходитися швидко. Однак такий вибір може призвести до серйозних ускладнень при обчисленнях. Як видно з рис. А.14, для малих r функція $\varphi(\bar{x}, r)$ швидко мінятиметься в околі мінімуму, що може викликати помилки в роботі градієнтного методу. Занадто велике значення r може призвести до того, що штрафна функція $P(\bar{x})$ у рівнянні (А.109) стане домінуючою. Тому "розумний" вибір початкової точки є дуже важливим.

Для більшості задач "розумним" значенням для початкової точки є значення $r_0 = 1$. Раціональнішим є врахування такого моменту: якщо початкова точка \bar{x} лежатиме поблизу мінімуму функції

$$\varphi(\bar{x}, r) = f(\bar{x}) + r \cdot \sum_{j=1}^m \frac{1}{c_j(\bar{x})} = f(\bar{x}) + r \cdot P(\bar{x}),$$

то градієнт функції $\varphi(\bar{x}, r)$ буде малим

$$\nabla \varphi(\bar{x}, r) = \nabla f(\bar{x}) + r \cdot \nabla P(\bar{x}). \quad (\text{А.125})$$

Квадрат норми цього вектора дорівнює

$$\nabla f(\bar{x})^T \nabla f(\bar{x}) + 2r \nabla f(\bar{x})^T \nabla P(\bar{x}) + r^2 \nabla P(\bar{x})^T \nabla P(\bar{x}) \quad (\text{А.126})$$

і мінімум його буде досягнуто при

$$r = \frac{-\nabla f(\bar{x})^T \nabla f(\bar{x})}{\nabla P(\bar{x})^T \nabla P(\bar{x})}. \quad (\text{A.127})$$

Таке початкове значення r , як припускають Фіакко й Маккормік, має давати добрі результати в загальному випадку. Зменшити значення r дуже просто: $r_{k+1} = r_k / c$, де $c = 10$.

Для мінімізації функції $\phi(\bar{x}, r_{k+1})$ використовується метод DFP. Як початкову точку використовуємо оптимальну точку функції $\phi(\bar{x}, r_k)$. Також необхідно слідкувати за тим, щоб у процесі одновимірного пошуку не вийти за область обмежень. Грубим, але цілком ефективним є такий алгоритм. Нехай є точка \bar{p} і напрямок пошуку $\bar{d} = -\underline{H} \cdot \bar{g}$. Наступна точка $\bar{q} = \bar{p} + \lambda \bar{d}$ потрібна для здійснення кубічної інтерполяції. Почнемо зі значення $\lambda = 2$ (подвоєний крок у методі Ньютона) і перевіримо, чи є точка \bar{q} допустимою, тобто, чи виконуються нерівності $c_j(\bar{q}) \geq 0$ для всіх j . Якщо вони виконуються, то λ не міняють, але якщо нерівність не виконується, то λ міняють на λ / a , будують нову точку \bar{q} і знову виконують перевірку. Зрештою допустиму точку \bar{q} буде знайдено і тоді можна інтерполювати. Вибір значення a не є цілком очевидним. Так, якщо вибір $a = 2$ може бути успішним, то при $a = 1,05$ довжина кроку стає близькою до відстані до найближчої межі області обмежень і тому є "безпечною" для інтерполяційної процедури. Важливо не дати точкам вийти за область обмежень у процесі мінімізації.

Функція $\phi(\bar{x}, r)$ мінімізується доти, поки два послідовні значення ϕ_1 та ϕ_2 не стануть такими, що $|\phi_1 - \phi_2 / \phi_1| < \varepsilon_1$, де $\varepsilon_1 = 0,000001$.

Відповідно до співвідношення (A.123) програма закінчує роботу, коли

$$r \cdot \sum_{j=1}^m \frac{1}{c_j(x_k^*)} < 0,000001.$$

Значення мінімуму $f(\bar{x})$ при цьому визначається з точністю до п'яти десяткових цифр. Програма також завершується при $r_k < 10^{-12}$.

Зауваження. Методи багатовимірної оптимізації дозволяють досить просто розв'язувати системи нелінійних алгебраїчних рівнянь (СНЛАР). Для цього досить знайти мінімум функціонала

$$F(\vec{x}) = \sum_{k=1}^N \alpha_k \cdot \varphi_k^2(\vec{x}), \quad (\text{A.128})$$

де $\varphi_k(\vec{x}) = 0$ – канонічна форма для k -го рівняння СНЛАР; α_k – довільні константи (можна покласти рівними одиниці).

Задачі

1. Скористатися методом Хука – Дживса для обчислення мінімуму функцій:

а) Розенброка:

$$f(x_1, x_2) = 100 \cdot (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2; \quad \vec{x}^* = (1; 1), \quad (\text{3-A.1})$$

б) Пауела:

$$f(\vec{x}) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^2 + 10(x_1 - x_4)^4; \quad \vec{x}^* = (0; 0; 0; 0). \quad (\text{3-A.2})$$

Взяти як початкову точку $(-1.2, 1)$ для функції Розенброка та $(3, -1, 0, 1)$ для функції Пауела.

2. Використовуючи метод штрафних функцій сумісно з методом Хука – Дживса, розв'язати систему нелінійних рівнянь:

$$\begin{cases} x + y + z = 6, \\ x^2 + y^2 + z^2 = 14, \\ x^3 + y^3 + z^3 = 36, \end{cases} \quad (\text{3-A.3})$$

за умови, що $x, y, z \geq 0$. Взяти як початкову точку $(0, 0, 0)$.

3. Повторити задачу 1 із використанням методу Нелдера – Міда.
4. Повторити задачу 2 з використанням методу штрафних функцій сумісно з методом Нелдера – Міда.
5. Повторити задачу 1 із використанням градієнтного методу найшвидшого спуску.
6. Повторити задачу 2 з використанням методу штрафних функцій сумісно з градієнтним методом найшвидшого спуску.
7. Повторити задачу 1 із використанням методу Давидона – Флетчера – Пауела.
8. Повторити задачу 2 з використанням методу штрафних функцій сумісно з методом Давидона – Флетчера – Пауела.
9. Повторити задачу 1 із використанням методу Флетчера – Рівса.
10. Повторити задачу 2 з використанням методу штрафних функцій сумісно з методом Флетчера – Рівса.
11. Повторити задачу 2 з використанням комплексного методу Бокса.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

Основна

1. Андерсон Д. Вычислительная гидромеханика и теплообмен : в 2 ч. / Д. Андерсон, Дж. Танненхилл, Р. Плетчер. – М. : Мир, 1990.
2. Банди Б. Методы оптимизации. Основной курс / Б. Банди. – М. : Радио и связь, 1988.
3. Бим Р. М. Неявная факторизованная разностная схема для уравнения Навье – Стокса сжимаемого газа / Р. М. Бим, Р. Ф. Уорминг // Ракетная техника и космонавтика, 1978. – Т. 16. – № 4. – С. 145–156.
4. Деги Д. В. Численное решение уравнений Навье – Стокса на компьютерах с параллельной архитектурой / Д. В. Деги, А. В. Старченко // Вестн. Томск. гос. ун-та. Математика и механика, 2012, № 2, С. 88–98.
5. Воропаев Г. А. Моделирование турбулентных сложных течений / Г. А. Воропаев, Ю. А. Птуха. – К. : Наук. думка, 1991.
6. Каліон В. А. Обчислювальна гідромеханіка. Модельні задачі / В. А. Каліон. – К. : ВПЦ "Київський університет". – 2011.
7. Каліон В. А. Обчислювальна гідромеханіка. Примежовий шар та нев'язкі течії / В. А. Каліон. – К. : ВПЦ "Київський університет". – 2013.
8. Мак-Кормак Р. В. Численный метод решения уравнений вязких течений // Аэрокосмическая техника : в Х т. / Р. В. Мак-Кормак. – 1983. – Т. 1. – № 4. – С. 114–123.
9. Оран Э. Численное моделирование реагирующих потоков / Э. Оран, Дж. Борис. – М. : Мир, 1990.
10. Пасконов В. М. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена / В. М. Пасконов, В. И. Полежаев, Л. А. Чудов. – М. : Наука, 1984.
11. Патанкар С. В. Численное решение задач теплообмена и динамики жидкости / С. В. Патанкар. – М. : Энергоатомиздат, 1984.

-
12. Патанкар С. В. Численное решение задач теплопроводности и конвективного теплообмена при течении в каналах / С. В. Патанкар. – М. : Изд-во МЭИ, 2003.
13. Пейре Р. Вычислительные методы в задачах механики жидкости / Р. Пейре, Т. Д. Тейлор. – Л. : Гидрометеоиздат, 1986.
14. Роуч П. Дж. Вычислительная гидромеханика / П. Дж. Роуч. – М. : Мир, 1980.
15. Самарский А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – М. : Наука, 1983.
16. Самарский А. А. Введение в численные методы / А. А. Самарский. – М. : Наука, 1987.
17. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей : в 2 ч. – Ч. I–II. – М. : Мир, 1991.
18. Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики / Н. Н. Яненко. – Новосибирск : Наука, 1967.
19. Briley W. R. Analysis and Computation of Viscous Subsonic Primary and Secondary Flows / W. R. Briley, H. McDonald. – Williamsburg ; Virginia. – 1979. – AIAA Paper 79–1453.
20. Hoffmann K. A. Computational Fluid Dynamics / K. A. Hoffmann, S. T. Chiang. – Wichita : Publication of Engineering Education System, Kansas, USA. – 2000. – Vol. 1–3.
21. Kazachkov I. V. Numerical continuum mechanics / I. V. Kazachkov, V. A. Kalion. – Stockholm : Royal Institute of Technology, 2002. – Vol. 1.
25. Liu G. R. Smoothed particle Hydrodynamics : a meshfree particle method / G. R. Liu, M. B. Liu. – Singapore : World Scientific, 2003. – 473 p.
26. Warming R. F. On the Construction and Application of Implicit Factored Schemes for Conservation Laws / R. F. Warming, R. M. Beam // SIAM AMS Proceedings. – 1978. – Vol. 11. – P. 159–179.
27. Арналь А. Численное исследование течений вдоль двугранного угла / А. Арналь, Ж. Кустей // Трехмерные турбулентные пограничные слои / под ред. Х. Фернхольца и Е. Краузе. – М. : Мир, 1985. – С. 331–343.

Додаткова

28. Белов И. А. Задачи и методы расчета отрывных течений несжимаемой жидкости / И. А. Белов, С. А. Исаев, В. А. Коробков. – Л. : Судостроение, 1989.

29. Белоцерковский С. М. Отрывное и безотрывное обтекание тонких крыльев идеальной жидкостью / С. М. Белоцерковский, М. И. Ништ. – М. : Наука, 1979.

30. Метод численного решения уравнений Навье – Стокса в переменных скорость–давление / Е. В. Бруцкий, А. Г. Костин, Е. И. Никифорович, Н. В. Розумнюк // Прикладна гідромеханіка. – 2008. – Том 10. – № 2. – С. 13 – 23.

31. Каліон В. А. Використання методу гідродинаміки згладжених частинок для розв'язання задач гідродинаміки довкілля / В. А. Каліон, І. О. Бровченко, А. О. Кушан // Вісник Київського університету. – 2007. – № 4. – С. 63–70.

32. Каліон В. А. Метод гідродинаміки згладжених частинок у задачах про рух в'язкої рідини / В. А. Каліон, К. О. Семенович, М. В. Сорокін // Вісник Київського університету. – 2011.– № 4. – С. 71–74.

33. Ламли Дж. Модели второго порядка для турбулентных течений / Дж. Ламли // Методы расчета турбулентных течений / под ред. А. Д. Хонькина. – М. : Мир, 1984. – С.8–34.

34. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики / Г. И. Марчук. – М. : Наука, 1980.

35. Математическое моделирование плоскопараллельного отрывного обтекания тел / под ред. С. М. Белоцерковского. – М. : Наука, 1988.

36. Полак Э. Численная оптимизация. Единый поход / Э. Полак. – М. : Мир, 1974.

37. Роди В. Модели турбулентности окружающей среды / В. Роди // Методы расчета турбулентных течений / под ред. А. Д. Хонькина. – М. : Мир, 1984. – С. 227–322.

38. Себиси Т. Конвективный теплообмен. Физические основы и вычислительные методы / Т. Себиси, П. Брэдшоу. – М. : Мир, 1987.

-
39. Таннехилл Дж. К. Численное исследование двумерного вязкого течения, развивающегося при взаимодействии затупленных тел с внешней ударной волной / Дж. К. Таннехилл, Т. Л. Холст, Дж. В. Рэкич // Ракетная техника и космонавтика, 1976. – Т. 14. – № 2. – С. 94–103.
40. Тэйлор Т. Д. Расчет течения вязкой жидкости в канале при помощи метода расщепления / Т. Д. Тэйлор, Э. Ндефо // Численные методы в механике жидкостей. – М. : Мир, 1973. – С. 218–229.
41. Шенг Дж. С. Неявно-явный метод численного решения уравнений Навье – Стокса / Дж. С. Шенг // Ракетная техника и космонавтика, 1978. – Т. 16. – № 5. – С. 102–109.
42. Шифф Л. Б. Численный расчет стационарных сверхзвуковых вязких течений / Л. Б. Шифф, Дж. Л. Стегер // Ракетная техника и космонавтика, 1980. – Т. 18. – № 12. – С. 16–29.
43. Amsden A. A. The SMAC Method: A Numerical Technique for Calculating Incompressible Fluid Flows / A. A. Amsden, F. N. Harlow. – Los Alamos ; New Mexico : Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-4370. – 1970.
44. Briley W. R. A Numerical Study of Laminar Separation Bubbles using the Navier – Stokes Equations / W. R. Briley. – United Aircraft Research Laboratories, East Hartford, Connecticut. – 1970. – Report J110614-1.
45. Boussinesq J. Essai sur la théorie des eaux courantes / J. Boussinesq. – Paris : Mémoires présentées par diverses savants á l'Acad. D. Sci., 1877. – Vol. 23.
46. Cebeci T. Momentum transfer in boundary layers / T. Cebeci, P. Bradshaw. – 1977. – N. Y. : McGraw-Hill.
47. Chorin A. J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems / A. J. Chorin // Journal of computational physics, 1967. – Vol. 2. – P. 12–26.
48. Christensen E. D. Large eddy simulation of spilling and plunging breakers / E. D. Christensen // Coastal Eng., 2006. – Vol. 53. – P. 463–485.
49. Cuomo G. SPH-LES two-phase simulation of wave breaking and wave-structure interaction / G. Cuomo, A. Panizzo,

R. Dalrymple. – Proc. 30-th International Conference on Coastal Engineering (ICCE). – 2006. – P. 1732.

50. De Serio F. Experimental study on the hydrodynamics of regular breaking waves / F. De Serio, M. Mossa // Coastal Engineering, 2006. – Vol. 53. – P. 99 – 113.

51. De Wit L. Smoothed Particle Hydrodynamics. A Study of the possibilities of SPH in hydraulic engineering / L. De Wit. – Delft University of Technology. Faculty of Civil Engineering and Geosciences Environmental. Fluid Mechanics Section. – 2006. – MSc Thesis.

52. Gosman, A. D. The Prediction of Confined Three-dimensional Boundary Layers / A. D. Gosman, D. B. Spalding. – Salford Symposium on Internal Flows, Inst. Mech. Engrs., London. – 1971. – Paper 19.

53. Gotoh H. Key issues in the particle method for computation of wave breaking / H. Gotoh, T. Sakai // Coastal Engineering. – 2006. – Vol. 53. – P. 171–179.

54. Griebel M. Numerical Simulation in Fluid Dynamics, a Practical Introduction / M. Griebel, T. Dornseifer, T. Neunhoeffler. – 1998. – Philadelphia : SIAM.

55. Harlow F. H. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface / F. H. Harlow, J. F. Welch // Phys. Fluids. – 1965. – Vol. 8. – P. 2182–2189.

56. Hirt C. W. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries / C. W. Hirt, B. D. Nichols // J. Comput. Phys. – 1981. – Vol. 39. – P. 201–225.

57. Jensen V. G. Viscous Flow Round a Sphere at Low Reynolds Number (≤ 40) / V. G. Jensen // Proc. Roy. Soc. London. – 1959. – Ser. A. – Vol. 249. – P. 346–366.

58. Kaplan P. Theoretical analysis of wave impact forces on platform deck structures / P. Kaplan, J. J. Murray, W. C. Yu // 1–A Offshore Technology, OMAE Copenhagen, June 1995. – Copenhagen, Denmark : proceedings. – 1995. – Vol. 2. – P. 22–43.

59. Kothe D. B. RIPPLE: A computer program for incompressible flows with free surfaces / D. B. Kothe, R. C. Mjolsness, M. D. Torrey. – Los Alamos National Laboratory. – 1991. – Report LA-12007.

-
60. Launder B. E. Progress in the development of a Reynolds stress turbulent closure / B. E. Launder, G. I. Reece, W. Rodi // *J. Fluid Mech*, 1975. – Vol. 68. – P. 537–566.
61. Li C. P. Numerical Solution of Viscous Reacting Blunt Body Flows of a Multicomponent Mixture / C. P. Li. – Los Angeles; California. – 1973. – AIAA Paper 77–168.
62. Li C. P. A Numerical Study Separated Flows Induced by Shock-Wave/Boundary-Layer Interaction / C. P. Li. – Los Angeles; California. – 1977. – AIAA Paper 77–168.
63. Miyakoda K. Contribution to the Numerical Weather Prediction – Computation with Finite Difference / K. Miyakoda // *Japan J. Geophys.* – 1962. – Vol. 3. – P. 75–190.
64. Monaghan J. Simulating free surface flows with SPH / J. Monaghan // *Journal of computational physics.* – 1994. – Vol. 110. – P. 399–406.
65. Monaghan J. Smoothed particle hydrodynamics / J. Monaghan // *Reports on progress in physics.* – 2005. – Vol. 68. – P. 1703–1759.
66. Two-dimensional SPH simulations of wedge water entries / G. Oger, M. Doring, B. Alessandrini, P. Ferrant // *Journal of computational physics.* – 2006. – 213. – P. 803–822.
67. Prandtl L. Untersuchungen zur ausgebildete Turbulenz / L. Prandtl // *Zeitschr. f. angew. Math. U. Mech.* – 1925. – Vol. 5.
68. Reynolds O. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion / O. Reynolds // *Phil. Trans. of the Roy. Soc.* – 1895.
69. Rubin S. G. A Review of Marching Procedures for Parabolized Navie – Stokes Equations: Symp. on Numerical and Physical Aspects of Aerodynamic Flows / S. G. Rubin. – N. Y.: Springer-Verlag. – 1981. – P. 171–186.
70. Rubin S. G. Numerical Methods for Two- and Three-dimensional Viscous Flow Problems: Application to Hypersonic Leading Edge Equations / S. G. Rubin, T. C. Lin // *Polytechnic Institute of Brooklyn.* – 1971. – N. Y.: Farmingdale. – PIBAL Report 71–8.
71. Modeling wave interaction with complex coastal structures using an enhanced VOF model / F. Shi, Q. Zhao, J. T. Kirby et al. –

Proc. 30-th International Conference on Coastal Engineering (ICCE). – September, 2006.

72. Smagorinsky J. General circulation experiment with the primitive equations. I. The basic experiment / J. Smagorinsky // *Mon. Weath. Rev.* – 1963. – Vol. 91. – P. 99–164.

73. Steger J. L. Implicit Finite-Difference Procedures for the Computation of Vortex Wakes / J. L. Steger, P. Kutler. – San Diego ; California. – 1976. – AIAA Paper 76–385.

74. Steger J. L. Implicit Finite-Difference Simulation of Flow about Arbitrary Geometries with Application to Airfoils / J. L. Steger. – Albuquerque; New Mexico. – 1977. – AIAA Paper 77–665.

75. Tirindelli M. Evaluation of empirical and numerical methods for wave uplift force calculation / M. Tirindelli, S. Fenical, G. Cuomo // *Coastal Structures.* – 2007. – P. 1683–1693.

76. Tulin M. P. Breaking waves in the ocean and ships / M. P. Tulin, M. Landrini. – Proc. 23. Symp. Naval Hydrodynamics. Val de Reuil. France. – 2000. – Vol. 4. – P.1–32.

77. Simulation of Wave Impact Pressure on Vertical Structures with the SPH Method / G. Viccione, F. Dentale, V. Bovolín, E. Pugliese Carratelli. – 3-rd ERCOFTAC SPHERIC workshop on SPH applications, June 2008, Lausanne, Switzerland, 2008. – P. 237–240.

78. Vigneron Y. C. Calculation of Supersonic Viscous Flow over Delta Wings with Sharp Subsonic Leading Edges / Y. C. Vigneron, J. V. Rakich, J. C. Tannehill. – Seattle ; Washington. – 1978. – AIAA Paper 78–1137.

79. Wang K. C. Three-dimensional Laminar Boundary Layer over a Body of Revolution at Incidence, СКІЛЬКИ ВСЬОГО ЧАСТИН Part VI: General Methods and Results of the Case at High Incidence / K. C. Wang. – Martin Marietta Laboratories, Baltimore ; Maryland. – 1973. – MML TR 73–02c.

80. Zhao Q. Numerical simulation of breaking waves by a multi-scale turbulence model / Q. Zhao, S. Armfield, K. Tanimoto // *Coastal Engineering*, 2004. – Vol. 51. – P. 53–80.

Зміст	
Основні позначення	3
Передмова	8
Вступ	10
1. Методи розв'язання вкорочених рівнянь	
Нав'є – Стокса	16
1.1. Рівняння Нав'є – Стокса в наближенні тонкого шару	16
1.2. Параболізовані рівняння Нав'є – Стокса	20
1.2.1. Виведення параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса	20
1.2.2. Особливості розв'язання параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса	26
1.2.3. Ефективна неявна наближено факторизована схема без ітерацій	31
1.3. Методи розв'язання тривимірних параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса для дозвукових течій	40
1.4. Модель частково параболізованих рівнянь Нав'є – Стокса	49
Задачі	63
2. Методи розв'язання повних рівнянь	
Нав'є – Стокса	65
2.1. Рівняння Нав'є – Стокса для стисливої рідини	65
2.1.1. Явні схеми Мак-Кормака	67
2.1.2. Неявна схема Біма – Уормінга	76
2.1.3. Неявна схема Мак-Кормака	83
2.2. Рівняння Нав'є – Стокса для нестисливої рідини	89
2.2.1. Незалежні змінні – завихреність і функція течії	91
2.2.2. Примітивні незалежні змінні	102
2.2.3. SIMPLE-подібні алгоритми	108
Задачі	117
3. Особливості числового розв'язання повних рівнянь	
Нав'є – Стокса у випадку вільної поверхні	120
3.1. Метод об'ємів рідини (VOF)	120

3.1.1. Фізична модель	121
3.1.1.1. Рівняння руху вільної поверхні	121
3.1.1.2. Крайові умови на вільній поверхні	122
3.1.1.3. Крайові умови на стінці	124
3.1.1.3. Течія навколо перешкоди	126
3.1.2. Числова модель	126
3.1.2.1. Апроксимація члена з адвекцією	128
3.1.2.2. Розв'язання рівняння для тиску	129
3.1.2.3. Розв'язання рівняння адвекції для VOF-функції	130
3.1.2.3. Особливості числової реалізації CSF-моделі	131
3.1.2.4. Крайова умова прилипання до твердої стінки	134
3.2. Метод гідродинаміки згладжених частинок (SPH)	135
3.2.1. Постановка задачі	135
3.2.2. Дискретизація основних рівнянь	136
3.2.3. Особливості постановки крайових умов	139
3.2.4. Розв'язання основної системи рівнянь	143
3.2.5. Розрахунки в'язкості	145
3.2.6. Особливості врахування турбулентності	146
3.2.7. Швидкі алгоритми сортування і пошуку сусідніх частинок та основний алгоритм методу SPH	147
3.2.8. Розв'язання тестових прикладів	152
3.2.8.1. Течія Пуазейля та Куетта	152
3.2.8.2. Набігання хвиль на платформу	154
Задачі	157
Додаток. Методи багатовимірної оптимізації	159
Задачі	211
Список літератури	213