Моделирование и анализ информационных систем. Т. 24, № 1 (2017), с. 39–63
Modeling and Analysis of Information Systems. Vol. 24, No 1 (2017), pp. 39–63

©Шапеев В. П., Ворожцов Е.В., 2016

DOI: 10.18255/1818-1015-2017-1-39-63

УДК 517.9

О комбинировании различных методов ускорения при итерационном решении уравнений с частными производными методом коллокаций и наименьших невязок

Шапеев В. П., Ворожцов Е.В.

получена 15 августа 2016

Аннотация. Рассматривается проблема ускорения итерационного процесса численного решения методом коллокаций и наименьших невязок (КНН) краевых задач для уравнений с частными производными (PDE). Для решения этой проблемы впервые предложено комбинированно применять одновременно три способа ускорения итерационного процесса: предобуславливатель, многосеточный алгоритм и коррекцию решения PDE на промежуточных итерациях в подпространстве Крылова. Исследовано влияние на итерационный процесс всех трех способов его ускорения как по отдельности, так и при их комбинировании. Показано, что каждый из указанных способов вносит свой вклад в количественный показатель ускорения итерационного процесса. При этом наибольший вклад дает применение алгоритма, использующего подпространства Крылова. Комбинированное применение одновременно всех трех способов ускорения итерационного процесса решения конкретных краевых задач позволило уменьшить время их решения на компьютере до 230 раз по сравнению со случаем, когда никакие способы ускорения не применялись. Исследован двухпараметрический предобуславливатель. Предложено находить оптимальные значения его параметров путем численного решения относительно нетрудоемкой задачи минимизации числа обусловленности модифицированной предобуславливателем системы линейных алгебраических уравнений, решаемой в методе КНН. Показано, что в многосеточном варианте метода КНН для существенного уменьшения времени решения краевой задачи достаточно ограничиться только простой операцией продолжения решения на многосеточном комплексе. Приводятся многочисленные примеры расчетов, демонстрирующие эффективность предлагаемых подходов к ускорению итерационных процессов решения краевых задач для двумерных уравнений Навье–Стокса. Указывается, что предложенная комбинация способов ускорения итерационных процессов может быть реализована также в рамках применения других численных методов решения PDE.

Ключевые слова: предобуславливание, подпространства Крылова, многосеточные алгоритмы, итерации Гаусса–Зейделя, уравнения Навье–Стокса, метод коллокаций и наименьших невязок

Для цитирования: Шапеев В. П., Ворожцов Е.В., "О комбинировании различных методов ускорения при итерационном решении уравнений с частными производными методом коллокаций и наименьших невязок", *Моделирование и анализ информационных систем*, **24**:1 (2017), 39–63.

Об авторах: Шапеев Василий Павлович, orcid.org/0000-0001-6761-7273, доктор физ.-мат. наук, профессор,
Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН,
ул. Институтская, 4/1, г. Новосибирск, 630090 Россия,
Новосибирский национальный исследовательский университет, ул. Пирогова, 2, г. Новосибирск, 630090, Россия,
e-mail: vshapeev@ngs.ru

Ворожцов Евгений Васильевич, orcid.org/0000-0003-2753-8399, доктор физ.-мат. наук, профессор,
Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН,
ул. Институтская, 4/1, г. Новосибирск, 630090 Россия,
e-mail: vorozh@itam.nsc.ru

Введение

В последние десятилетия идет бурное развитие математических методов моделирования, и прежде всего численного моделирования. Оно используется во всевозрастающем объеме, как в традиционных для него областях физики и техники, так и в связанных с экономикой, биологией и новыми технологиями. Большое разнообразие моделируемых явлений и процессов, сложности и особенности в возникающих при этом математических задачах предъявляют повышенные требования к свойствам и возможностям численных методов и алгоритмов, стимулируют поиск новых, с лучшими свойствами. От численных методов, в частности, требуется решать задачи точнее и быстрее, несмотря на сложность новых задач и и содержащиеся в них другие трудности. Для этого предлагаются новые подходы и методы. При этом не последнюю роль играет идея комбинированного применения уже известных алгоритмов. Зачастую применение комбинированного алгоритма эффективнее по сравнению с применением по отдельности его компонент. Многие исследователи в этом направлении ведут поиск.

Решение PDE различными численными методами сводится к решению систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). При этом стремление достичь большую точность решения приводит к необходимости решать СЛАУ больших размеров. Для решения последних приходится применять итерационные методы. Поэтому оптимизация итерационных процессов, и прежде всего их ускорение, – актуальная задача вычислительной математики, которой многие исследователи уделяют особое внимание. В частности, в работе [1] описан итерационный метод Ньютона–Крылова для ускорения итераций численного решения стационарных уравнений Навье–Стокса. В [2] дан обзор методов Ньютона–Крылова. В [3] возникающая в результате дискретизации исходных PDE-уравнений СЛАУ решалась с применением приведенного в [4] эффективного алгоритма GMRES, являющегося вариантом реализации метода Крылова [5]. Заметим, что в работе [6] также было реализовано ускорение итераций при решении PDE с применением подпространств Крылова, хотя в ней отсутствует термин "подпространства Крылова".

В последнее время ряд исследователей показали еще большую эффективность от комбинированного применения алгоритмов ускорения итерационных процессов. Например, комбинирование методов Крылова и Федоренко [7] ранее применялось в ряде численных методов. В [3, 8–12] оно применялось в случаях, когда СЛАУ возникала в результате дискретизации уравнений Навье–Стокса с помощью конечно-разностных методов и методов конечного объема. Техника ускорения итерационных процессов путем последовательного включения многосеточного и GMRES алгоритмов была реализована в [11]. В результате было достигнуто ускорение до 25 раз по сравнению со стандартным нелинейным многосеточным алгоритмом. В работах [13–16] описаны некоторые варианты комбинирования методов Крылова и Федоренко в рамках различных вариантов метода конечных элементов (МКЭ). На практике часто используются различного вида предобуславливатели, эффективность влияния которых на итерационный процесс заключается в уменьшении числа обусловленности матрицы решаемой СЛАУ. Ввиду относительной простоты диагональные предобуславливатели получили широкое распространение. В целях краткости мы здесь процитируем только две репрезентативные работы [17,18], в которых

используются такие предобуславливатели для ускорения сходимости итерационных процессов решения стационарных уравнений Навье–Стокса, описывающих течения вязкой несжимаемой жидкости. Уравнения Навье–Стокса решаются численно в работе [17] в терминах скорости и давления с использованием комбинации метода конечных элементов и метода наименьших квадратов (LSFEM). Возникающая при этом СЛАУ решается предобусловленным методом сопряженных градиентов. Используется простой диагональный предобуславливатель (Якоби). Проведенные многочисленные расчеты подтверждают высокую эффективность этого простого предобуславливателя.

В [18] описан метод граничных элементов (BEM) для численного решения двумерных уравнений Навье–Стокса, записанных в терминах функции тока и завихренности. В указанной работе приводятся примеры отсутствия сходимости итерационного решателя в случае, когда предобуславливатель не используется, и наличие сходимости при применении диагонального предобуславливателя. Важно отметить, что в варианте BEM, описанном в [18], используются условия непрерывности решения и его производной в направлении нормали к каждому граничному элементу, которые фактически совпадают с условиями согласования на стыках между соседними ячейками пространственной расчетной сетки в методе коллокаций и наименьших невязок (КНН), рассматриваемом в данной статье.

В представленной работе идея комбинации алгоритмов реализована двояко: во-первых, комбинированным является собственно метод КНН, во-вторых, при его реализации используется комбинация трех способов ускорения итерационного процесса решения СЛАУ, к решению которой сводится применение метода КНН.

В методе КНН метод коллокации (МК) комбинируется с требованием минимизации функционала, составленного из невязок линейных алгебраических уравнений, из которых определяется приближенное решение задачи. Существенное его отличие от многих методов решения PDE в том, что для приближенного решения дифференциальной задачи в нем выписывается переопределенная СЛАУ. О достоинстве такого подхода будет указано далее в содержательной части статьи. Идея метода была предложена Слепцовым А.Г. и реализована в [19]. Следует отметить, что она была опубликована одновременно с работой [20], которая, по-видимому, положила начало большой серии работ, объединенных аббривиатурой LSFEM. Обзор работ по LSFEM вне предмета данной работы, и здесь укажем только некоторые из них [17, 21–23]. В методе LSFEM так же, как и в КНН, для определения приближенного решения задачи выписывается переопределенная СЛАУ, решение которой ищется методом наименьших квадратов (LS), на котором достигается минимум функционала – суммы квадратов невязок ее уравнений. В первых вариантах реализации метода КНН решение переопределенной СЛАУ (псевдорешение) также искалось методом LS. Однако в последующем при реализации метода КНН в нем переопределенная СЛАУ решается с помощью QR-декомпозиции ее матрицы, где Q – ортогональная, а R – верхнетреугольная матрицы. Как будет показано далее, на таком псевдорешении переопределенной СЛАУ также достигается минимум указанного функционала невязки.

В данной работе в качестве объекта, на котором демонстрируются предлагаемые подходы, взята краевая задача для уравнений Навье–Стокса. Их численное решение при умеренных и больших числах Рейнольдса представляет трудности для многих

методов, так как в этом случае в результате их дискретизации получается плохо обусловленная СЛАУ. Метод КНН – один из методов, который позволяет эффективно решать задачи для эллиптических, параболических и гиперболических PDE [24–35] на различных адаптивных сетках с прямоугольными и треугольными ячейками с использованием графов для их упорядочивания в процессе расчета. В [25, 34, 36] были построены варианты метода, которые позволили получить решения 2D и 3D эталонных задач о течении вязкой жидкости в каверне и обтекании обратной ступеньки, находящиеся среди наиболее точных на сегодняшний день [37,38]. В [35] дан краткий обзор по методу КНН, а обзор работ по применению метода КНН для численного решения двумерных несжимаемых уравнений Навье–Стокса имеется в [32]. В [33, 34] метод КНН применен для решения трехмерных уравнений Навье–Стокса несжимаемой жидкости на пространственной расчетной сетке из кубических ячеек. В качестве примера приведены результаты расчетов течения в кубической каверне с движущейся крышкой при Re = 100 и Re =1000, показано их сравнение с известными наиболее точными расчетами. В [39, 40] различные варианты метода КНН применены для расчета напряженного состояния пластин из изотропных и анизотропных композиционных материалов. В [41] метод КНН приложен к решению задачи о продольных колебаниях бимодулярных балок, в [42] — к решению уравнения Бюргерса и уравнения Кортевега–де Вриза–Бюргерса, в [27, 43] — к трехмерному моделированию лазерной сварки металлических пластин на адаптивных сетках в областях с криволинейной поверхностью.

Здесь для ускорения итерационного процесса решения СЛАУ в методе КНН конструируется диагональный предобуславливатель. Для достижения большего ускорения он применяется в комбинации с использованием многосеточного комплекса (метода Федоренко [7]) и алгоритма с использованием подпространств Крылова. Здесь предложен и применяется новый вариант реализации этого метода, отличающийся и не уступающий весьма эффективному GMRES, различные варианты которого приведены в [4]. На практике указанные способы ускорения итерационного процесса применяются как в отдельности, так и в комбинации. Сначала рассматриваем применение диагонального предобуславливателя на каждой сетке многосеточного алгоритма в рамках метода КНН. Поскольку диагональный предобуславливатель в нашем случае по результатам оказался недостаточно эффективным для наших целей, мы далее вводим двухпараметрический предобуславливатель и находим оптимальные значения входящих в него параметров из требования минимизации числа обусловленности матрицы СЛАУ. В данной работе рассматривается комбинированное применение трех способов ускорения итерационного процесса: предобуславливателя, метода подпространств Крылова и операции продолжения на многосеточном комплексе, являющемся составной частью метода Федоренко. Комбинирование в методе КНН метода Крылова только с операцией продолжения на многосеточном комплексе впервые было реализовано в [44]. Уже там было получено ускорение решения задачи на ЭВМ в сотни раз.

1. Описание метода КНН

Рассмотрим краевую задачу для системы уравнений Навье–Стокса

$$(\mathbf{V}\cdot\nabla)\mathbf{V}+\nabla p=\frac{1}{\mathrm{Re}}\Delta\mathbf{V}-\mathbf{f},\quad \operatorname{div}\mathbf{V}=0,\quad (x_1,x_2)\in\Omega, \tag{1}$$

$$\mathbf{V}\big|_{\partial\Omega}=\mathbf{g} \tag{2}$$

в области Ω с границей $\partial\Omega$. В уравнениях (1) x_1, x_2 — декартовы пространственные координаты, $\mathbf{V}=(v_1(x_1,x_2,v_2(x_1,x_2))$ — вектор скорости; $p=p(x_1,x_2)$ — давление, $\mathbf{f}=(f_1,f_2)$ – заданная вектор-функция, Re — число Рейнольдса, $\Delta=\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}$, $(\mathbf{V}\cdot\nabla)=v_1\frac{\partial}{\partial x_1}+v_2\frac{\partial}{\partial x_2}$. Система (1) решается с граничными условиями Дирихле (2), где $\mathbf{g}=\mathbf{g}(x_1,x_2)=(g_1,g_2)$ — заданная вектор-функция. На давление налагается условие

$$\iint_\Omega p\,dx_1dx_2=0 \tag{3}$$

при $\mathbf{f}=0$ [45]. Давление определяется из (1), (2) с точностью до константы. Если потребовать выполнения условия (3), то тем самым фактически задается эта константа. В качестве области решения задачи в дальнейшем берется квадрат

$$\Omega=\{(x_1,x_2),\ 0\le x_i\le L,\ i=1,2\}, \tag{4}$$

где $L>0$ — заданная длина стороны квадрата. Величина L использовалась в конкретных расчетах в качестве характерной длины при обезразмеривании независимых и зависимых переменных, и она входит естественным образом в определение числа Рейнольдса Re в (1). В данной задаче (1)–(4) область (4) покрывается сеткой из квадратных ячеек Ω_{ij}, $i,j=1,\dots,I$, $I\ge 1$. Удобно ввести локальные координаты y_1, y_2 в каждой ячейке Ω_{ij}. Зависимость локальных координат от глобальных координат x_1, x_2 задается формулами $y_m=(x_m-x_{m,i,j})/h$, $m=1,2$, где $x_{m,i,j}$ — значение координаты x_m в центре ячейки Ω_{ij}, а h – половина длины стороны квадратной ячейки. Пусть $\mathbf{u}(y_1,y_2)=(u_1,u_2)=\mathbf{V}(hy_1+x_{1,i,j},hy_2+x_{2,i,j})$, $q(y_1,y_2)=p(hy_1+x_{1,i,j},hy_2+x_{2,i,j})$. В локальных переменных уравнения Навье–Стокса принимают следующий вид:

$$\Delta u_m-\mathrm{Re}h\left(u_1\frac{\partial u_m}{\partial y_1}+u_2\frac{\partial u_m}{\partial y_2}+\frac{\partial q}{\partial y_m}\right)=\mathrm{Re}\cdot h^2f_m,\quad m=1,2; \tag{5}$$

$$\frac{1}{h}\left(\frac{\partial u_1}{\partial y_1}+\frac{\partial u_2}{\partial y_2}\right)=0, \tag{6}$$

где $\Delta=\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}$. Линеаризация по Ньютону уравнений (5) приводит к формулам

$$\Delta u_m^{s+1}-(\mathrm{Re}\cdot h)\left(u_1^su_{m,y_1}^{s+1}+u_1^{s+1}u_{m,y_1}^s+u_2^su_{m,y_2}^{s+1}+u_2^{s+1}u_{m,y_2}^s+q_{y_m}^{s+1}\right)=F_m, \tag{7}$$

где $m=1,2$ и s – номер итерации по нелинейности, $s=0,1,2,\dots$, u_1^s,u_2^s,q^s — известное приближение решения на s-ой итерации начиная с выбранного начального приближения с индексом $s=0$, $F_m=\mathrm{Re}\left[h^2f_m-h\left(u_1^su_{m,y_1}^s+u_2^su_{m,y_2}^s\right)\right]$, $u_{m,y_l}=\partial u_m/\partial y_l$, $q_{y_m}=\partial q/\partial y_m$, $l,m=1,2$.

Таблица 1. Вид базисных функций φ_l

l	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
φ_l	1	y_1	y_2	y_1^2	$-2y_1y_2$	y_2^2	0	0	0	0	0	0
	0	$-y_2$	0	$-2y_1y_2$	y_2^2	0	1	y_1	y_1^2	0	0	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	y_1	y_2

Приближенное решение в каждой ячейке $\Omega_{i,j}$ ищется в виде линейной комбинации базисных вектор-функций φ_l:

$$(u_1^s, u_2^s, q^s)^T = \sum_{l=1}^{12} b_{i,j,l}^s \varphi_l, \tag{8}$$

где верхний индекс T обозначает операцию транспонирования. В данном варианте метода решение задачи проектируется в пространство многочленов. Таким образом, искомое приближенное решение является кусочно-полиномиальным. В данной работе для аппроксимации составляющих скорости использованы многочлены второй степени по переменным y_1, y_2, а для аппроксимации давления – многочлены первой степени. Всего базисных функций в выбранном пространстве пятнадцать. Поскольку в уравнении неразрывности коэффициенты константы, то его легко удовлетворить за счет выбора базисных полиномов φ_l. Нетрудно установить, что для этого требуется удовлетворить ими три линейных соотношения. В итоге из первоначальных пятнадцати базисных полиномов независимыми останутся только двенадцать. Они приведены в табл. 1. Их совокупность можно назвать соленоидальным базисом, так как $\operatorname{div} \varphi_l = 0$.

Сформулируем “локальную” СЛАУ — дискретную задачу, из которой определяется приближенное решение в каждой отдельной ячейке — локальное решение, и “глобальную” СЛАУ, из которой определяется приближенное глобальное решение задачи (1)–(3).

Количество точек коллокаций и их расположение внутри ячейки может варьироваться в различных вариантах метода. В данной работе были реализованы три варианта задания координат точек коллокации. Обозначим через N_c число точек коллокации внутри каждой ячейки. При $N_c = 4$ локальные координаты точек коллокаций имеют вид $(\pm\omega, \pm\omega)$, где ω – задаваемое пользователем значение в интервале $0 < \omega < 1$. В случае $N_c = 8$ координаты точек коллокации задавались следующим образом: расположение первых четырех точек было взято таким же, как при $N_c = 4$, а координаты следующих четырех точек задавались по формулам $(\pm\omega, 0)$, $(0, \pm\omega)$. Подставляя (8) в (7) и выписывая полученные соотношения в каждой точке коллокации с численными значениями ее координат, получим $2N_c$ линейных алгебраических уравнений:

$$\sum_{m=1}^{12} a_{\nu,m}^{(1)} \cdot b_m^{s+1} = f_\nu^s, \quad \nu = 1, \ldots, 2N_c\,. \tag{9}$$

В [19] было предложено в методе коллокаций и наименьших квадратов (КНК) дополнить систему уравнений коллокаций (9) линейными условиями согласования локального решения в каждой ячейке с локальными решениями, взятыми во всех соседних с ней ячейках. В работе [46] были введены параметры в условия согласования и было показано с помощью вычислительных экспериментов, что область значений параметров, при которых глобальная СЛАУ метода КНК хорошо обусловлена, пересекается в значительной степени с областью, где наблюдается наилучшая точность численного решения задачи.

Однако в [19, 46] не исследовалось влияние условий согласования на число обусловленности локальной СЛАУ. Это исследование выполняется ниже в разделе 2, где показано, что включение условий согласования в локальную СЛАУ позволяет существенно (на пять-шесть десятичных порядков) уменьшить число обусловленности локальных СЛАУ во внутренних ячейках сетки.

По аналогии с [19,36,46] дополним систему уравнений дискретной задачи в ячейке Ω_{ij} условиями согласования. Запишем эти условия в отдельных точках (называемых точками согласования) на сторонах ячейки Ω_{ij}, которые являются общими с соседними ячейками. Условия согласования берутся здесь в виде

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

$$h\frac{\partial(u^+)^\tau}{\partial n} + (u^+)^\tau = h\frac{\partial(u^-)^\tau}{\partial n} + (u^-)^\tau, \tag{11}$$

$$q^+ = q^-. \tag{12}$$

Здесь $h\frac{\partial}{\partial n} = h\left(n_1\frac{\partial}{\partial x_1} + n_2\frac{\partial}{\partial x_2}\right) = n_1\frac{\partial}{\partial y_1} + n_2\frac{\partial}{\partial y_2}$, $n = (n_1, n_2)$ — внешняя нормаль к стороне ячейки Ω_{ij}, $(\cdot)^n$, $(\cdot)^\tau$ — нормальная и касательная составляющие вектора скорости на рассматриваемой стороне ячейки, u^+ и u^- — пределы функции u при стремлении ее аргументов к точке согласования изнутри и снаружи ячейки $\Omega_{i,j}$.

Для единственности определения давления в решении задаем его значение в одной точке области либо аппроксимируем условие (3) по формуле

$$\frac{1}{h}\left(\iint_{\Omega_{i,j}} q\, dy_1 dy_2\right) = \frac{1}{h}\left(-I^* + \iint_{\Omega_{i,j}} q^* dy_1 dy_2\right). \tag{13}$$

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

Обозначим через N_m число точек согласования для составляющих вектора скорости на сторонах каждой ячейки. При $N_m = 4$ координаты этих точек согласования задаются формулами $(\pm1, 0)$, $(0, \pm1)$. При $N_m = 8$ координаты точек согласования таковы: $(\pm1, -\zeta)$, $(\pm1, \zeta)$, $(-\zeta, \pm1)$, $(\zeta, \pm1)$, где $0 < \zeta < 1$. В расчетах, результаты которых представлены ниже, использовалось значение $\zeta = 1/2$. Условия согласования для давления (12) задаются в четырех точках с координатами $(\pm1, 0)$, $(0, \pm1)$. Используя (8), подставим координаты этих точек в каждое из трех условий согласования (10)–(12). Из первых двух условий получим $2N_m$ линейных алгебраических уравнений для составляющих скорости. Подстановка представления (8) в (12) дает ещё четыре линейных алгебраических уравнения согласования.

В настоящей работе давление задавалось в вершине ячейки $\Omega_{1,1}$ или же использовалось условие (13). Если сторона ячейки совпадает с границей области Ω, то в соответствующих точках вместо условий согласования в локальной СЛАУ выписываются граничные условия: $u_m = g_m$, $m = 1, 2$.

Объединяя уравнения коллокаций, согласования и уравнения, полученные из краевых условий, если ячейка $\Omega_{i,j}$ граничная, в каждой ячейке получим СЛАУ вида

$$A_{i,j} \cdot \vec{X}_{i,j}^{s+1} = \vec{f}_{i,j}^{s,s+1}, \tag{14}$$

где $\vec{X}_{i,j}^{s+1} = (b_{i,j,1}^{s+1}, \ldots, b_{i,j,12}^{s+1})^T$. В методе КНН система (14) является переопределенной.

Для решения СЛАУ дискретной задачи применялся процесс, который условно можно назвать итерациями Гаусса–Зейделя. Одна глобальная $(s+1)$-ая итерация заключалась в том, что в расчетной области Ω последовательно перебирались все ячейки. При этом в каждой ячейке СЛАУ (14) решалась ортогональным методом (Гивенса или Хаусхолдера), в правой части уравнений (10), (12) в качестве u^-, q^- берутся либо значения решения на $(s+1)$-ой итерации, если они уже сосчитаны на этой итерации, либо их значения на предыдущей итерации.

2. Предобуславливатели для метода КНН

В каждой ячейке Ω_{ij} необходимо решать СЛАУ вида (14). Опустим в (14), для краткости, верхние и нижние индексы:

$$\mathrm{A}\vec{X} = \vec{f}. \tag{15}$$

Число обусловленности прямоугольной матрицы A вычисляется по формуле

$$\kappa(\mathrm{A}) = \sqrt{\| \mathrm{A}_1 \| \cdot \| \mathrm{A}_1^{-1} \|}, \tag{16}$$

где предполагается, что квадратная матрица $\mathrm{A}_1 = \mathrm{A}^T\mathrm{A}$ несингулярная.

Мы сначала испытали известный диагональный предобуславливатель (Якоби), описанный в [18], но он не обеспечил в нашем случае ожидаемое ускорение сходимости итераций. С другой стороны, хорошо известно, что введение параметров в предобуславливатель увеличивает его возможности для дальнейшего понижения числа обусловленности, так как эти параметры можно затем подбирать из требования минимизации числа обусловленности. В нашем случае мы построили предобуславливатель, зависящий от параметров ξ и η.

Параметр ξ вводится путем умножения на ξ обеих частей уравнений (7):

$$\xi[\Delta u_m^{s+1} - (\mathrm{Re}\cdot h)(u_1^s u_{m,y_1}^{s+1} + u_1^{s+1} u_{m,y_1}^s + u_2^s u_{m,y_2}^{s+1} + u_2^{s+1} u_{m,y_2}^s + q_{y_m}^{s+1})] = \xi F_m, \tag{17}$$

где $m = 1, 2$. Параметр η вводится в (10) следующим образом:

$$h\frac{\partial (u^+)^n}{\partial n} + \eta (u^+)^n = h\frac{\partial (u^-)^n}{\partial n} + \eta (u^-)^n. \tag{18}$$

Обозначим через $\mathrm{A}_{\mathrm{col}}$ матрицу размера $2N_c \times 12$, получаемую при подстановке в (17) координат точек коллокаций; ее элементами являются коэффициенты при 12 искомых коэффициентах в представлении решения (8). Заметим, что матрицу $\mathrm{A}_{\mathrm{col}}$ можно представить в виде $\mathrm{A}_{\mathrm{col}} = \bar{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}} \cdot \mathrm{D}$, где $\mathrm{D} = \mathrm{diag}(\xi, \ldots, \xi)$ — диагональная матрица размера 12×12, а матрица $\bar{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}}$ получается из уравнений (7). То есть матрицу D можно рассматривать как правый диагональный однопараметрический предобуславливатель матрицы $\bar{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}}$.

Давление входит в уравнение количества движения (17) только в виде производных $\partial q/\partial y_1$ и $\partial q/\partial y_2$, поэтому коэффициент при b_{10} в матрице $\mathrm{A}_{\mathrm{col}}$ равен нулю. Вследствие этого матрица $\mathrm{A}_{\mathrm{col}}$ неполного ранга. Чтобы потенциально с помощью этой матрицы можно было определить решение, необходимо включить в $\mathrm{A}_{\mathrm{col}}$ строку, соответствующую уравнению (13). Эта строка имеет следующий вид:

$\{0,0,0,0,0,0,0,0,0,h,0,0\}$. Обозначим такую дополненную матрицу через $\tilde{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}}$. Это изменение делает ненулевым десятый столбец, и при $N_c = 8$ $\tilde{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}}$ становится матрицей полного ранга. Из (17) видно, что элементы матрицы $\tilde{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}}$ зависят от решения на предыдущей итерации. Поэтому дальнейшее исследование свойств обусловленности осуществлялось на заданной сетке при решении конкретной задачи. В качестве такой задачи рассмотрим в этом разделе модельную задачу для двумерных уравнений Навье–Стокса (1), которая имеет следующее точное решение:

$$\begin{aligned} &u_1 = \cos(2\pi x_1)\sin(2\pi x_2),\ \ u_2 = -\sin(2\pi x_1)\cos(2\pi x_2),\\ &p = \tfrac{1}{2}\left[\cos\left(\tfrac{\pi x_1}{2}\right) + \cos\left(\tfrac{\pi x_2}{2}\right)\right] - \tfrac{2L\sin(\pi L/2)}{\pi}. \end{aligned} \tag{19}$$

Заметим, что функции $u_1(x_1,x_2)$ и $u_2(x_1,x_2)$ описывают поле скорости с нулевой дивергенцией. Выражения f_1 и f_2 в (1) находятся подстановкой (19) в (1).

С помощью многосеточного алгоритма сначала получали хорошее приближение решения на сравнительно грубой сетке из 40×40 ячеек. Выполнялось в общей сложности 1000 итераций последовательно на сетках из 5×5, 10×10, 20×20 и 40×40 ячеек, из них 150 итераций — на сетке из 40×40 ячеек. Затем полученные численные значения решения использовали для вычисления элементов матрицы $\tilde{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}}$. Таким образом, элементы матрицы $\tilde{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}}$ зависят от параметров ξ и h. Для того, чтобы получить матрицу $\tilde{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}}$, состоящую только из числовых элементов, задавались числовые значения полушага сетки h по формуле $h = 0.5/(2M)$, $M = 20,\ 40,\ 60,\ 80,\ 160,\ 320$. Кроме того, параметр ξ варьировался в промежутке от 0.01 до 20. Далее для вычисления числа обусловленности согласно (16) использовалась встроенная функция системы *Mathematica* [47] `Norm[A1, 2]`, которая вычисляет евклидову норму квадратной матрицы. Было найдено, что число обусловленности $\kappa(\tilde{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}})$ не зависит от величины полушага сетки h. В промежутке $0.01 \le \xi \le 20$ число $\kappa(\tilde{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}})$ менялось в следующих пределах: $4.2255\cdot10^6 \le \kappa(\tilde{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}}) \le 4.2258\cdot10^6$ (здесь $N_c = 8$).

Обозначим через $\mathrm{A}_{\mathrm{mat}}$ матрицу, соответствующую условиям согласования (18), (11), (12). Тогда можно представить всю матрицу A в виде

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathrm{A}}_{\mathrm{col}} \\ \mathrm{A}_{\mathrm{mat}} \end{pmatrix}. \tag{20}$$

При заданном численном значении полушага h элементы матрицы A зависят от ξ и η. Пусть $G(\xi,\eta) = \kappa(\mathrm{A}(\xi,\eta))$. Обозначим через $\xi_{\mathrm{opt}}, \eta_{\mathrm{opt}}$ значения параметров ξ,η, при которых функция $G(\xi,\eta)$, то есть число обусловленности матрицы A (20), достигает своего минимума. Ниже описывается численный алгоритм для нахождения ξ_{opt}, η_{opt} по числовым данным в любой внутренней ячейке сетки.

Сначала задавалась в плоскости (ξ,η) некоторая прямоугольная область $D^{(1)}_{\xi,\eta}$, включающая в себя те значения параметров ξ,η, при которых расчеты по методу КНН с рассматриваемым предобуславливателем демонстрировали сходимость итерационного процесса получения решения. В области $D^{(1)}_{\xi,\eta}$ задавалась прямоугольная равномерная сетка размера 40×80 узлов, где 40 узлов брались вдоль оси ξ и 80 — вдоль оси η. Затем простым перебором по узлам (ξ_i,η_j) находился такой узел (ξ_{i_0},η_{j_0}), в котором значение функции $G(\xi,\eta)$ было минимальным. После этого строилась новая область $D^{(2)}_{\xi,\eta}$, размеры которой в каждом из координатных направлений ξ и η были в два раза меньше, чем в случае области $D^{(1)}_{\xi,\eta}$, но количество узлов

Таблица 2. Влияние числа точек коллокаций в ячейке на оптимальные значения ξ, η для предобуславливателя

N_c	$(\xi_{\text{opt}})_{\text{E}}$	$(\eta_{\text{opt}})_{\text{E}}$	κ_{E}	$(\xi_{\text{opt}})_{\text{F}}$	$(\eta_{\text{opt}})_{\text{F}}$	κ_{F}
4	0.213	1.738	3.83	0.264	1.871	6.74
8	0.156	1.747	3.84	0.189	1.873	6.71

сетки в $D^{(2)}_{\xi,\eta}$ было таким же, как и в $D^{(1)}_{\xi,\eta}$. Геометрический центр новой области $D^{(2)}_{\xi,\eta}$ находился в точке (ξ_{i_0}, η_{j_0}), найденной в области $D^{(1)}_{\xi,\eta}$. Этот процесс сжатия областей поиска оптимума продолжался до тех пор, пока значения $(\xi^{(\nu-1)}_{\text{opt}}, \eta^{(\nu-1)}_{\text{opt}})$ и $(\xi^{(\nu)}_{\text{opt}}, \eta^{(\nu)}_{\text{opt}})$, найденные в областях, соответственно, $D^{(\nu-1)}_{\xi,\eta}$ и $D^{(\nu)}_{\xi,\eta}$ $(\nu = 2, 3, \ldots)$, не совпадали в трех первых цифрах мантиссы числа с плавающей запятой. Весь этот процесс требовал не более трех минут работы настольного компьютера.

По вышеописанному алгоритму были проведены расчеты, имевшие целью выяснить влияние на значения ξ_{opt} и η_{opt} величины полушага сетки h, числа точек коллокаций N_c и выбора нормы. Оказалось, что полученные значения ξ_{opt} и η_{opt} не зависят от величины полушага сетки h. В табл. 2 приведены значения ξ_{opt}, η_{opt} и $\kappa(A(\xi_{\text{opt}}, \eta_{\text{opt}}))$ для двух различных значений числа точек коллокаций в ячейке и для двух различных норм — евклидовой $(\|\cdot\|_E)$ и нормы Фробениуса $(\|\cdot\|_F)$ для случая аналитического теста (19), рассматриваемого ниже в п. 5.1. Видно, что в результате включения в СЛАУ уравнений согласования число обусловленности уменьшилось на шесть десятичных порядков. При этом во втором случае, когда $N_c = 8$, результат аналогичен случаю $N_c = 4$, хотя в первом случае система переопределена, а во втором случае в матрице A_{col} число строк меньше числа столбцов. То есть, в методе КНН включение в локальную СЛАУ условий согласования существенно улучшает ее обусловленность. Характер результата не меняется и в случае, когда в локальную СЛАУ добавляются еще уравнения коллокации так, чтобы в матрице A_{col} число строк равнялось числу столбцов. Это указывает на причину, которая обеспечивает существенно лучшие вычислительные свойства метода КНН и превосходство его возможностей для численного решения PDE в сравнении с методом коллокации. Заметим, что добавление в локальную СЛАУ уравнения (12) (или значения давления в одной точке) как в методе коллокаций, так и в методе КНН необходимо для определения константы интегрирования для давления и следует постановке дифференциальной задачи (1)–(3).

Приведенные в табл. 2 данные являются практическим доказательством того, что при использовании переопределенной системы в дискретной задаче соответствующая СЛАУ дискретной задачи получается лучше обусловленной, чем когда СЛАУ при этом не является переопределенной.

Далее, из табл. 2 видно, что уменьшение величины N_c более заметно сказывается на значении ξ_{opt}, чем на значении η_{opt}. На рис. 1 показан вид поверхностей $\kappa(\text{A}(\xi, \eta))$.

Значения элементов матрицы (20) зависят от решения, поэтому желательно найти оптимальные значения ξ_{opt}, η_{opt} параметров ξ, η в каждой ячейке $\Omega_{i,j}$ пространственной расчетной сетки. Но это привело бы к многократному увеличению машинного времени решения задачи гидродинамики по методу КНН. В связи с этим в настоящей работе был реализован более простой алгоритм нахождения значений

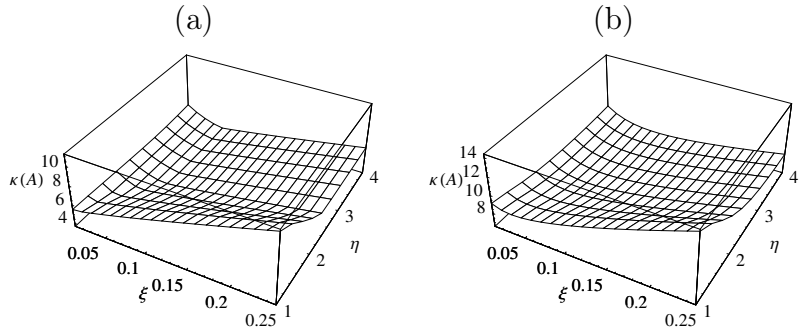

Рис. 1. Поверхности $\kappa(\mathrm{A}(\xi,\eta))$, полученные при использовании евклидовой нормы (a) и нормы Фробениуса (b), $N_c = 8$, $x_{10} = L/2$, $x_{20} = L/2$
Fig. 1. Surfaces $\kappa(\mathrm{A}(\xi,\eta))$ obtained at the use of the Euclidean norm (a) and the Frobenius norm (b), $N_c = 8$, $x_{10} = L/2$, $x_{20} = L/2$

ξ_{opt} и η_{opt} в любой точке $(x_1, x_2) \in \Omega$. Сначала перечислим шаги этого алгоритма и затем подробно опишем реализацию каждого шага.

Шаг 1. Вычисление значений ξ_{opt} и η_{opt} в узлах грубой сетки в области Ω.

Шаг 2. Получение аналитических (полиномиальных) аппроксимаций для ξ_{opt} и η_{opt} с помощью метода наименьших квадратов.

Грубая сетка генерировалась на первом шаге следующим образом. Пусть R — радиус окружности, в которую вписана квадратная область (4); очевидно, что $R = \frac{L}{\sqrt{2}}$. Далее задаем в Ω восемь точек со следующими координатами: $P_1(\frac{L}{2}, \frac{L}{2} - \delta R)$, $P_2(\frac{L}{2} + \delta R, \frac{L}{2})$, $P_3(\frac{L}{2}, \frac{L}{2} + \delta R)$, $P_4(\frac{L}{2} - \delta R, \frac{L}{2})$, $P_5(\delta R, \delta R)$, $P_6(L - \delta R, \delta R)$, $P_7(L - \delta R, L - \delta R)$, $P_8(\delta R, L - \delta R)$, где $\delta R = \frac{R}{3}$. После этого находим в каждой из указанных восьми точек оптимальные значения параметров ξ_{opt} и η_{opt} с помощью вышеописанного алгоритма. Результаты этих расчетов даны в табл. 3.

Таблица 3. Значения величин $(\xi_{\mathrm{opt}})_E$, $(\eta_{\mathrm{opt}})_E$ и $(\kappa_{\mathrm{opt}})_E$ в узлах грубой сетки, Re = 1000

Точка	(x_1, x_2)	$(\xi_{\mathrm{opt}})_E$	$(\eta_{\mathrm{opt}})_E$	$(\kappa_{\mathrm{opt}})_E$
P_1	(0.2562,0.1313)	0.196	1.759	3.920
P_2	(0.3688,0.2562)	0.223	1.797	3.992
P_3	(0.2562,0.3688)	0.209	1.722	3.837
P_4	(0.1313,0.2562)	0.223	1.722	3.853
P_5	(0.1187,0.1187)	0.250	1.722	3.841
P_6	(0.3812,0.1187)	0.223	1.797	4.076
P_7	(0.3812,0.3812)	0.223	1.759	3.874
P_8	(0.1187,0.3812)	0.197	1.722	3.880

На втором шаге нужно сначала задать аналитические выражения для функций $\xi_{\mathrm{opt}}(x_1, x_2)$ и $\eta_{\mathrm{opt}}(x_1, x_2)$. Как известно, многочлен второй степени от переменных x_1, x_2 зависит от шести коэффициентов. Табл. 3 показывает, что величины $\xi_{\mathrm{opt}}(x_1, x_2)$ и $\eta_{\mathrm{opt}}(x_1, x_2)$ изменяются незначительно в расчетной области (4) при $L = 0.5$. Поэтому мы ограничились аппроксимирующими многочленами первой степени:

$$\xi_{\mathrm{opt}} = A_0 + A_1 x_1 + A_2 x_2, \quad \eta_{\mathrm{opt}} = B_0 + B_1 x_1 + B_2 x_2. \tag{21}$$

С использованием данных табл. 3 были найдены методом наименьших квадратов следующие значения коэффициентов A_j и B_j в (21), $j = 0, 1, 2$: $A_0 = 0.233123$, $A_1 = -0.003297$, $A_2 = -0.056330$, $B_0 = 1.71317$, $B_1 = 0.24172$, $B_2 = -0.09530$. Обозначим через $(\xi_{\text{opt}})_{\text{am}}$ и $(\eta_{\text{opt}})_{\text{am}}$ значения ξ_{opt}, η_{opt}, вычисленные как средние арифметические значения восьми значений каждой из этих величин, представленных в табл. 3. Пусть $(\xi_{\text{opt}})_{\text{int}}$ и $(\eta_{\text{opt}})_{\text{int}}$ — интегральные средние значения величин ξ_{opt} и η_{opt}, то есть

$$(\xi_{\text{opt}})_{\text{int}} = \frac{1}{L^2}\int_0^L\int_0^L \xi_{\text{opt}}(x_1, x_2)dx_1dx_2, \quad (\eta_{\text{opt}})_{\text{int}} = \frac{1}{L^2}\int_0^L\int_0^L \eta_{\text{opt}}(x_1, x_2)dx_1dx_2.$$

Были получены следующие значения величин $(\xi_{\text{opt}})_{\text{am}}$, $(\xi_{\text{opt}})_{\text{int}}$, $(\eta_{\text{opt}})_{\text{am}}$, $(\eta_{\text{opt}})_{\text{int}}$: $(\xi_{\text{opt}})_{\text{am}} = 0.218125$, $(\xi_{\text{opt}})_{\text{int}} = 0.218217$, $(\eta_{\text{opt}})_{\text{am}} = 1.750000$, $(\eta_{\text{opt}})_{\text{int}} = 1.749775$.

Поскольку величины ξ_{opt} и η_{opt}, представленные в табл. 3, незначительно отличаются от их средних значений, тестовые расчеты, описанные в разделе 5.1., были выполнены при $\xi = \xi_{\text{opt}} = 0.218$ и $\eta = \eta_{\text{opt}} = 1.75$.

3. Вариант алгоритма Крылова с редукцией базиса подпространства

3.1. Основные формулы

Приведем кратко сведения о предложенном и более подробно описанном в [33] варианте алгоритма метода Крылова ускорения итерационного процесса решения СЛАУ. Пусть СЛАУ имеет вид

$$\vec{X} = \mathrm{T}\vec{X} + \vec{f}, \tag{22}$$

где вектор $\vec{X}$ — искомое решение, T — квадратная матрица, $\vec{f}$ — вектор-столбец. Пусть матрица T — матрица полного ранга, и пусть сходится итерационный процесс

$$\vec{X}^{n+1} = \mathrm{T}\vec{X}^n + \vec{f}, \qquad n = 0,\, 1,\, \ldots, \tag{23}$$

в котором $\vec{X}^n$ – приближение к решению на итерации с номером n. По определению, $\vec{r}^{\,n} = \mathrm{T}\vec{X}^{\,n} + \vec{f} - \vec{X}^{\,n} = \vec{X}^{\,n+1} - \vec{X}^{\,n}$ — невязка уравнений (22), а $\vec{Z}^{\,n} = \vec{X} - \vec{X}^n$ — погрешность решения на n-ой итерации. Нетрудно из выписанных формул вывести соотношение: $\vec{r}^{\,n+1} = \mathrm{T}\,\vec{r}^{\,n}$. Численное значение невязки на любой итерации в отличие от погрешности легко находится. Пусть от некоторого $\vec{X}^0$ — начального приближения к решению сделаны $k+1$ итераций, начиная с некоторого $\vec{X}^0$ — начального приближения, то есть вычислены величины $\vec{X}^1$,$\vec{X}^2$, …, $\vec{X}^{k+1}$ и $\vec{r}^{\,0}$, $\vec{r}^{\,1}$, …, $\vec{r}^{\,k}$, соответственно. В алгоритмах ускорения итерационных процессов по Крылову значение $\vec{X}^{k+1}$ уточняется до вычисления $\vec{X}^{k+2}$ по формуле (23), полагая $\vec{X}^{*k+1} = \vec{X}^{k+1} + \vec{Y}^{k+1}$. Поправка вида

$$\vec{Y}^{k+1} = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i\, \vec{r}^{\,i} \tag{24}$$

с неопределенными коэффициентами α_i ищется в подпространстве [4, 5, 36]

$$\mathcal{K}_k(\vec{r}^{\,1}, \mathrm{T}) = \mathrm{span}\{\vec{r}^{\,1}, \mathrm{T}\vec{r}^{\,1}, \ldots, \mathrm{T}^{k-1}\,\vec{r}^{\,1}\},$$

где $\mathrm{span}\{\vec{v}^1, \ldots, \vec{v}^k\}$ — линейная оболочка векторов $\vec{v}^1, \ldots, \vec{v}^k$. Коэффициенты $\alpha_1, \ldots,$ α_k находятся из условия минимизации функционала невязки $\Phi(\alpha_1, \ldots, \alpha_k) = \| \vec{X}^{*k+1} - \mathrm{T}\vec{X}^{*k+1} - \vec{f} \|_2^2$, которая возникает при подстановке $\vec{X}^{*k+1}$ в (22). Здесь $||\vec{u}||_2$ — евклидова норма вектора $\vec{u}$ размерности N: $||\vec{u}||_2^2 = \sum\limits_{i=1}^{N} u_i^2$, $\vec{u} = (u_1, \ldots, u_N)^T$. Можно показать [6], что для выполнения этого условия искомые коэффициенты α_i разложения поправки в базисе подпространства должны удовлетворять следующей СЛАУ:

$$\left(\vec{r}^{\,1} - \vec{r}^{\,0} \right) \alpha_1 + \ldots + \left(\vec{r}^{\,k} - \vec{r}^{\,k-1} \right) \alpha_k = -\vec{r}^{\,k}. \tag{25}$$

Построенное таким образом приближенное решение $\vec{X}^{*k+1}$ можно использовать как начальное приближение для следующих итераций (23).

В случае сходящегося итерационного процесса $\lim\limits_{n\to\infty} ||\vec{r}^{\,n}||_2 = 0$. В малой окрестности решения элементы матрицы системы (25) — разности близких между собой малых величин $\vec{r}^{\,i} - \vec{r}^{\,i-1}$, $i = 1, 2, \ldots, k$. Из-за ошибок округления на ЭВМ их вычисление приводят к относительно большой погрешности. В результате по мере достижения всё бóльшей точности решения СЛАУ поправки (24) вычисляются всё менее точно, рассматриваемый метод ускорения становится всё менее “устойчивым” и менее эффективным. Другая неприятность, снижающая эффективность поправки в области малых невязок, заключается в том, что в условиях ограниченной разрядности представления чисел на ЭВМ система (25) нередко может быть плохо обусловленной или вырожденной. У нее с точностью до небольшого числа, близкого к машинному нулю, могут быть нулевые или линейно зависимые между собой столбцы.

Сделаем предположение (CR): допустим, что матрица системы (25) является матрицей полного ранга (complete rank). Для достижения бóльшей устойчивости процесса вычисления коэффициентов поправки $\vec{Y}^{k+1}$ в области малых невязок здесь применяются несколько приемов. Первый прием — нормировка столбцов матрицы системы (25). Это позволяет уменьшить в процессе решения СЛАУ (25) количество арифметических действий с числами, близкими к машинному нулю. Нормировка уравнений в (25) производилась здесь при помощи замены неизвестных $\beta_i = \alpha_i ||\vec{r}^{\,i} - \vec{r}^{\,i-1}||_2$, $i = 1, \ldots, k$. В результате СЛАУ (25) принимает вид

$$B\vec{\beta} = \left(\vec{B}_1 \right) \beta_1 + \ldots + \left(\vec{B}_k \right) \beta_k = -\vec{r}^{\,k}, \tag{26}$$

где $\vec{B}_i = (\vec{r}^{\,i} - \vec{r}^{\,i-1})/||\vec{r}^{\,i} - \vec{r}^{\,i-1}||_2$, $i = 1, \ldots, k$ — столбцы матрицы B.

Вторым приемом является применение ортогонального метода для решения переопределенной СЛАУ (26). Здесь использовались методы либо Хаусхолдера, либо Гивенса с выбором главного элемента в i-ом столбце B_i, $i = 1, 2, \ldots, k$. То есть для прямоугольной матрицы B системы (26) строилось QR - разложение с ортогональной матрицей Q и прямоугольной матрицей R, у которой на главной диагонали ненулевые элементы, а под главной диагональю все элементы – нули. Так что в первых k строках матрицы R квадратная верхне-треугольная матрица. И решение переопределенной системы $B\vec{\beta} = \vec{r}^{\,k}$ (26) свелось к решению системы

$$R\vec{\beta} = -Q^T \vec{r}^{\,k}. \tag{27}$$

Решение СЛАУ, состоящей из первых k уравнений системы (27), принимается в качестве псевдорешения системы (26). Известно, что ортогональный метод сводит решение заданной системы к решению системы, обусловленность которой не хуже обусловленности исходной. Описанные первый и второй приемы содержатся в упомянутом методе GMRES.

При численном решении прикладных задач в начале итерационного процесса, когда невязки $\vec{r}^{\,i}$ $(i = 0, 1, \ldots)$ не маленькие, с большой вероятностью матрица B имеет полный ранг – предположение CR выполняется. Однако по мере сходимости итерационного процесса при небольших $\vec{r}^{\,i}$ с ненулевой вероятностью предположение CR может не выполниться. При этом попытка построить QR – разложение не дает в первых k строках матрицы R треугольную матрицу размера k. Если этот факт имеет место с точностью, близкой к машинному нулю, т.е. по крайней мере один из элементов на диагонали верхней треугольной матрицы R близок к машинному нулю, то поправка (24) будет найдена с непригодной точностью (или попытка решить систему (27) может дать в результате большое число, не представимое в арифметике с конкретной используемой разрядностью представления чисел в ЭВМ). Это может привести (или приведет) к автоматическому останову машины (авосту). Если даже система (27) будет решена, то это может быть сделано с плохой точностью. При этом поправки $\vec{Y}^{k+1}$ к $\vec{X}^{k+1}$ вычисляются неустойчиво. В вычислительном эксперименте в области малых невязок решения можно наблюдать осцилляции в графике погрешности решения.

3.2. Редукция базиса подпространства Крылова в области малых невязок

Третий существенный прием, примененный здесь, как и первые два, направлен на увеличение устойчивости вычисления поправок (устойчивого построения подпространства Крылова). Суть его заключается в редукции имеющегося базиса путем ограничения числа невязок $\vec{r}^{\,i}$, $i = 0, 1, \ldots, s < k$, используемых в редуцированном базисе, при вычислении поправок к приближенным значениям решения в области плохой обусловленности системы (25). Здесь применялся достаточно простой критерий (S – критерий) для выбора числа невязок, пригодных с точки зрения устойчивого построения подпространства Крылова. В [36] был реализован некоторый его вариант.

Пусть в процессе QR-разложения на диагонали матрицы R в $(s+1)$-ой строке появился элемент по модулю меньше некоторого числа δ, близкого к машинному нулю, и все элементы под диагональю равны нулю. Тогда для построения поправки используются только первые $s+1$ невязки r^i $(i = 0, 1, \ldots, s)$. В системе (26) оставляются первые s столбцов, а в правой части соответственно редуцированной определяющей системы вместо вектора $-\vec{r}^{\,k}$ берется вектор $-\vec{r}^{\,s}$.

Как показали результаты большого количества итерационного решения тестовых примеров, применение S-критерия позволяет избежать некоторого количества авостов при приближении величин невязок к машинному нулю и получить более точные решения СЛАУ, чем без применения критерия.

Очевидно, что программа с автоматическим применением S-критерия позволя-

ет применять метод Крылова также в случае, когда матрица B системы (26) не является матрицей полного ранга.

4. Ускорение сходимости итераций применением многосеточного алгоритма

Основная идея многосеточных алгоритмов состоит в селективном демпфировании гармоник ошибки [7,48]. В методе КНН, как и в других методах, количество итераций, необходимых для достижения заданной точности приближения к предельному решению, зависит от начального приближения. Мы применили операции продолжения вдоль восходящей ветви V-цикла — расчеты на последовательности измельчающихся сеток — в качестве способа получения хорошего начального приближения для итераций на самой мелкой сетке среди сеток, используемых в многосеточном комплексе. Переход от грубой сетки к более мелкой делается с помощью операторов продолжения. Проиллюстрируем алгоритм операции продолжения на примере составляющей скорости $u_1(y_1, y_2, b_1, \ldots, b_{12})$. Пусть $h_1 = h$, где h — полушаг грубой сетки, и пусть $h_2 = h_1/2$ — полушаг мелкой сетки, на которой нужно найти разложение функции u_1 по базису.

Шаг 1. Пусть $X_1,\ X_2$ — глобальные координаты центра ячейки грубой сетки. Сделаем следующие подстановки в полиномиальное выражение для u_1:

$$y_l = (x_l - X_l)/h_1, \quad l = 1, 2. \tag{28}$$

В результате получаем многочлен

$$U_1(x_1, x_2, b_1, \ldots, b_{12}) = u_1\left(\tfrac{x_1 - X_1}{h_1}, \tfrac{x_2 - X_2}{h_1}, b_1, \ldots, b_{12}\right). \tag{29}$$

Шаг 2. Пусть $(\tilde{X}_1, \tilde{X}_2)$ — глобальные координаты центра любой из четырех ячеек мелкой сетки, содержащихся в ячейке грубой сетки. Сделаем в (29) замену $x_l = \tilde{X}_l + \tilde{y}_l \cdot h_2$, $l = 1, 2$. В результате получим многочлен второй степени $\tilde{U}_1 = P(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \tilde{b}_1, \ldots, \tilde{b}_{12})$ от переменных $\tilde{y}_1, \tilde{y}_2$ с коэффициентами $\tilde{b}_1, \ldots, \tilde{b}_{12}$. После приведения подобных оказывается, что координаты X_1, X_2 и $\tilde{X}_1, \tilde{X}_2$ входят в $\tilde{b}_l$ $(l = 1, \ldots, 12)$ только в виде комбинаций $\delta x_l = (X_l - \tilde{X}_l)/h_1$. Согласно (28), величина $-\delta x_l = (\tilde{X}_l - X_l)/h_1$ является локальной координатой в ячейке грубой сетки центра ячейки мелкой сетки.

Приведем выражения для коэффициентов $\tilde{b}_j$ $(j = 1, \ldots, 12)$ представления решения в ячейке мелкой сетки с полушагом h_2 в терминах коэффициентов $b_1, \ldots, b_{12}$ представления решения в ячейке с полушагом $h_1 = 2h_2$ и величин $\sigma_1 = h_2/h_1$, $\sigma_2 = \sigma_1^2$:

$$\begin{aligned}
\tilde{b}_1 &= b_1 - b_2\delta x_1 + b_4\delta x_1^2 - (b_3 + 2b_5\delta x_1)\delta x_2 + b_6\delta x_2^2;\\
\tilde{b}_2 &= \sigma_1(b_2 - 2b_4\delta x_1 + 2b_5\delta x_2);\ \tilde{b}_3 = \sigma_1[b_3 + 2(b_5\delta x_1 - b_6\delta x_2)];\\
\tilde{b}_4 &= \sigma_2 b_4; \quad \tilde{b}_5 = \sigma_2 b_5; \quad \tilde{b}_6 = \sigma_2 b_6;\\
\tilde{b}_7 &= b_7 - b_8\delta x_1 + b_9\delta x_1^2 + \delta x_2(b_2 - 2b_4\delta x_1 + b_5\delta x_2);\\
\tilde{b}_8 &= \sigma_1(b_8 - 2b_9\delta x_1 + 2b_4\delta x_2);\\
\tilde{b}_9 &= \sigma_2 b_9; \quad \tilde{b}_{10} = b_{10} - b_{11}\delta x_1 - b_{12}\delta x_2; \quad \tilde{b}_{11} = \sigma_1 b_{11}; \quad \tilde{b}_{12} = \sigma_1 b_{12}.
\end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что можно выписать аналогичные формулы перехода от грубой сетки к мелкой в случае любой целой величины отношения длин сторон их ячеек.

5. Результаты численных экспериментов

5.1. Тестирование

С целью изучения свойств сходимости и точности изложенного выше метода КНН были выполнены многочисленные вычислительные эксперименты с использованием аналитического решения (19). Среднеквадратичные погрешности решения вычислялись по формулам

$$\delta\mathbf{u}(h)=\Big[\frac{1}{2M^2}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}\sum_{\nu=1}^{2}(u_{\nu,i,j}-u^{ex}_{\nu,i,j})^2\Big]^{\frac{1}{2}},\ \delta p(h)=\Big[\frac{1}{M^2}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}(p_{i,j}-p^{ex}_{i,j})^2\Big]^{\frac{1}{2}},$$

где M – количество ячеек вдоль каждого координатного направления, $\mathbf{u}^{ex}_{i,j}$ и $p^{ex}_{i,j}$ – вектор скорости и давление, вычисленные из точного решения (19). Величины $\mathbf{u}_{i,j}$ и $p_{i,j}$ обозначают численное решение, полученное по методу КНН, описанному выше, и вычисленное в центре ячейки Ω_{ij}. Порядки сходимости ν_u и ν_p вычислялись по известным формулам [32, 34]. Пусть $b^s_{i,j,l}$, $s = 0, 1, \ldots$ — значения коэффициентов $b_{i,j,l}$ в (8) на s-ой итерации. Использовалось следующее условие для окончания итераций по нелинейности: $\delta b^{s+1} < \varepsilon$, где $\delta b^{s+1} = \max_{i,j}(\max_{1\le l\le 12}|b^{s+1}_{i,j,l} - b^s_{i,j,l}|)$, а $\varepsilon < h^2$ – малая положительная величина. В дальнейшем будем называть величину δb^{s+1} псевдопогрешностью приближенного решения.

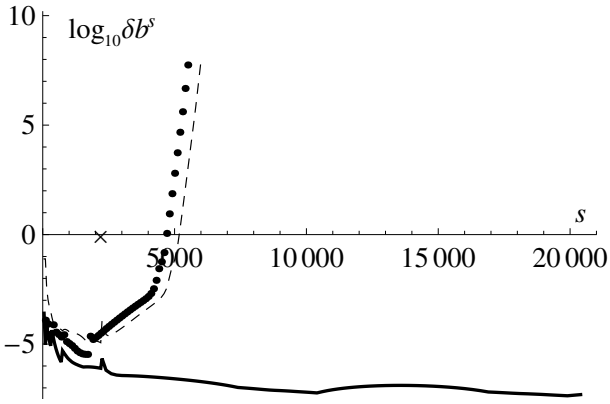

Рис. 2. Погрешность δb^s при использовании различных предобуславливателей: (——) $\xi = \xi_{\text{opt}}$, $\eta = \eta_{\text{opt}}$; (– – –) $\xi = \eta = 1$; (· · · · · ·) — диагональный предобуславливатель
Fig. 2. Error δb^s at the use of different preconditioners: (——) $\xi = \xi_{\text{opt}}$, $\eta = \eta_{\text{opt}}$; (– – –) $\xi = \eta = 1$; (· · · · · ·) the diagonal preconditioner

Была проведена серия расчетов с целью изучения влияния конкретного вида предобуславливателя на сходимость итераций по методу КНН. В этой серии расчетов критерием останова счета было выполнение неравенства $\delta b^s < 10^{-9}$. Результаты представлены на рис. 2. Крестиком на оси s показан тот номер итерации s, начиная с которого расчет в рамках многосеточного алгоритма осуществляется на сетке из 80×80 ячеек. Видно, что при отсутствии предобуславливателя, когда $\xi = 1$ в (17) и $\eta = 1$ в (18), псевдопогрешность δb^{s+1} начинает расти сразу после перехода к расчету на сетке из 80×80 ячеек.

Аналогичное поведение демонстрирует также диагональный предобуславливатель из [18]. В то же время предобуславливатель, использующий (17), (18) с $\xi =$

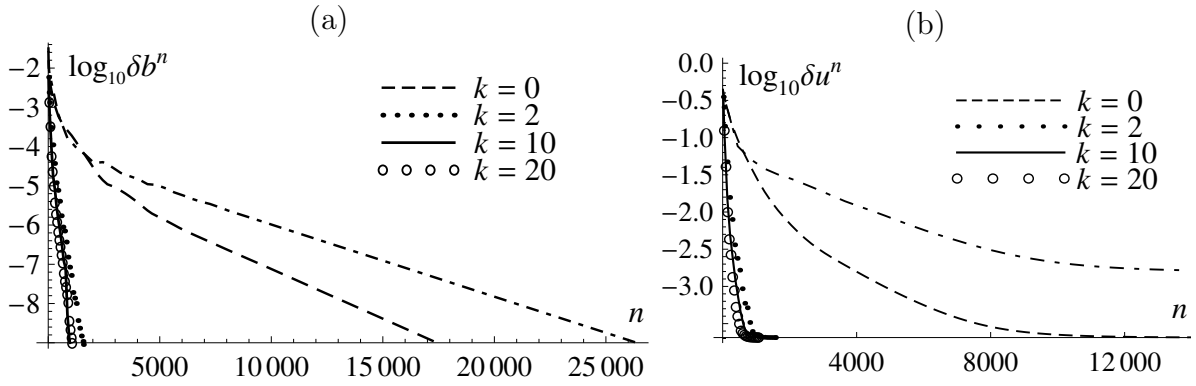

Рис. 3. Влияние значения k в (25) на скорость сходимости величин $\log_{10}\delta b^n$ (a) и $\log_{10}\delta u$ (b), где n — число итераций
Fig. 3. Influence of the number of the value of k in (25) on the convergence rate of quantities $\log_{10}\delta b^n$ (a) and $\log_{10}\delta u$ (b), where n is the number of iterations

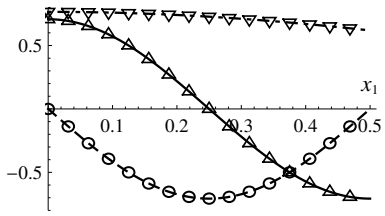

Рис. 4. Сравнение профилей приближенного и точного решений при $x_2 = L/4$
Fig. 4. Comparison of the approximate and exact solution profiles at $x_2 = L/4$

$\xi_{\text{opt}} = 0.218$, $\eta = \eta_{\text{opt}} = 1.75$, обеспечивает достижение неравенства $\delta b^s < 10^{-9}$. Поэтому все расчеты, описываемые ниже в данном разделе, были проведены с применением предобуславливателя, описанного в п. 2, с $\xi = \xi_{\text{opt}}$, $\eta = \eta_{\text{opt}}$.

На рис. 3, 4 и в табл. 4 приводятся результаты численных экспериментов, имевших целью выяснить влияние на ускорение сходимости итерационного процесса решения двумерных уравнений Навье–Стокса по методу КНН только при использовании двухпараметрического предобуславливателя и метода подпространств Крылова. Число Рейнольдса $\text{Re} = 1000$, $X = 0.5$ в (4). Эти расчеты были выполнены на сетке из 40×40 ячеек, $N_c = 4$. Поэтому, в соответствии с табл. 2, использовались следующие значения величин ξ, η: $\xi = \xi_{\text{opt}} = 0.213$, $\eta = \eta_{\text{opt}} = 1.738$. Критерием останова счета было выполнение неравенства $\delta b^n < 10^{-9}$. Расчету без применения алгоритма Крылова соответствует случай $k = 0$. В этой серии расчетов в переопределенную СЛАУ (14) было включено уравнение (13). В процессе итераций по методу КНН абсолютная величина интеграла (3) падала со значения порядка 10^{-3} до величины порядка $10^{-12} - 10^{-13}$, то есть до величины порядка машинных ошибок округления при расчетах по Фортран-программе с двойной точностью. Это может служить одним из критериев правильности программной реализации представленного выше метода КНН. Из рис. 3 видно, что с увеличением числа невязок k, используемых в методе Крылова, скорость сходимости численного решения по методу КНН растет. Количество итераций N_{it}, необходимых для обеспечения выполнения неравенства $\delta b^n < 10^{-9}$, составляло 17429, 1577, 969 и 1072 соответственно при $k = 0$, 2, 10 и 20. Таким образом, применение алгоритма Крылова при $\text{Re} = 1000$ с $k = 10$ позволило уменьшить количество итераций, требуемых для сходимости приближенного решения, в 18 раз по сравнению со случаем $k = 0$.

Таблица 4. Погрешности $\delta\mathbf{u}$, δp и их порядки сходимости ν_u, ν_p на последовательности сеток, Re =1000, $L = 0.5$, $N_c = 8$

M	$\delta\mathbf{u}$	δp	ν_u	ν_p
10	2.204E−03	3.087E−03		
20	7.174E−04	9.021E−04	1.62	1.77
40	1.801E−04	2.521E−04	1.99	1.84
80	4.070E−05	9.547E−05	2.15	1.40

Таблица 5. Влияние предобуславливателя и комбинации методов Крылова и Федоренко на последовательности сеток размеров $5 \cdot 2^m \times 5 \cdot 2^m$, $m = 0, \ldots, 4$ на скорость сходимости метода КНН при Re = 1000

Метод	N_{it}	Время счета, с	AF	$\delta\mathbf{u}$	δp
$K_{mgr} = 1, k = 0$	851119	464718	1.0	3.587E−05	7.065E−04
$K_{mgr} = 5, k = 0$	1282529	843849	0.55	2.108E−05	4.570E−04
$K_{mgr} = 1, k = 9$	39521	21944	21.18	3.587E−05	7.060E−04
$K_{mgr} = 1, k = 10$	40154	22375	20.77	3.587E−05	7.063E−04
$K_{mgr} = 5, k = 5$	6185	2119	219.31	3.570E−05	6.713E−05
$K_{mgr} = 5, k = 8$	6283	2172	213.96	3.571E−05	6.392E−05
$K_{mgr} = 5, k = 9$	5832	2018	230.29	3.571E−05	5.787E−05
$K_{mgr} = 5, k = 10$	6090	2186	212.59	3.571E−05	5.628E−05

Был также проведен расчет при отсутствии предобуславливателя, то есть когда $\xi = \eta = 1$, см. штрих-пунктирные линии на рис. 3. В этом случае понадобилось 26384 итераций по методу КНН при $k = 0$ для достижения неравенства $\delta b^n < 10^{-9}$, то есть примерно в полтора раза больше, чем при использовании значений ξ_{opt}, η_{opt} в предобуславливателе. Из рис. 3 (b) видно, что погрешность δu^n сошедшегося решения выше в $10^{0.884}$ раз, чем при использовании значений ξ_{opt}, η_{opt} в предобуславливателе. Из табл. 4 видно, что при Re = 1000 порядок сходимости ν_u близок к 2, а $\nu_p < \nu_u$ при $M \geq 40$.

На рис. 4 дано сравнение профилей компонент полученного методом КНН и точного решения. Компоненты v_1, v_2 и p приближенного решения нарисованы символами $\triangle$, $\circ$ и ∇, те же компоненты точного решения — сплошными, штриховыми и штрих-пунктирными линиями соответственно. Здесь видно хорошее согласие между численными результатами и аналитическим решением.

Были проведены расчеты с применением восходящей ветви V-цикла с целью выяснить, как влияет применение только многосеточного алгоритма на ускорение сходимости метода КНН. Были также проведены расчеты, в которых движение по восходящей ветви многосеточного V-цикла применялось совместно с алгоритмом ускорения, основанным на подпространствах Крылова. Результаты этих расчетов представлены в табл. 5. В ней K_{mgr} – количество последовательно используемых сеток в многосеточном комплексе. Если $K_{mgr} = 1$, то это означает, что в расчете используется только одна сетка, и это самая мелкая сетка с числом ячеек 80×80. Далее, N_{it} – суммарное количество итераций, выполненных на всех сетках комплекса. Фактор ускорения итерационного процесса AF в результате применения того или иного способа его ускорения вычисляется как отношение времени счета при $K_{mgr} = 1$, $k = 0$ ко времени счета при применении последовательности из

нескольких сеток ($K_{mgr} > 1$, $k = 0$) или же последовательности сеток в сочетании с применением алгоритма Крылова на каждой сетке ($K_{mgr} > 1$, $k > 1$). Во всех расчетах, показанных в табл. 5, использовались оптимальные значения $\xi_{\text{opt}} = 0.218$, $\eta_{\text{opt}} = 1.75$ в двухпараметрическом предобуславливателе. Из табл. 5 видно, что наибольшее ускорение скорости сходимости — до 230 раз по сравнению с расчетом только на самой мелкой сетке — имеет место при применении пяти сеток в многосеточном алгоритме и 9 невязок в методе Крылова.

5.2. Использование высокоточных решений эталонной задачи для верификации метода КНН

Для контроля и верификации результатов численных экспериментов здесь, кроме их сравнения с точными решениями тестовых задач, проведено сравнение характерных величин, полученных в численных экспериментах по решению эталонной задачи о течении вязкой жидкости в каверне. В этой задаче расчетная область каверна — квадрат (4) со стороной $L = 1$, начало координат находится в ее левом нижнем углу. Верхняя крышка каверны движется в безразмерных величинах с единичной скоростью в положительном направлении оси Ox_1. Остальные стороны каверны (4) покоятся. На всех сторонах заданы условия прилипания: $v_1 = 1$, $v_2 = 0$ при $x_2 = X$ и $v_m = 0$, $m = 1, 2$, на остальных сторонах.

Течение в каверне с движущейся крышкой имеет сингулярности в верхних углах области. Их влияние на точность численного решения усиливается с увеличением числа Рейнольдса. Поэтому при больших числах Рейнольдса для получения более точного решения необходимо применять адаптивные сетки с более мелкими ячейками в окрестности сингулярностей [36, 38]. Здесь использовали только равномерные сетки, размер которых не превосходил 320×320 ячеек.

Таблица 6. Результаты по ускорению решения методом КНН эталонной задачи путем применения комбинации методов Крылова и Федоренко на последовательности сеток размеров $5 \cdot 2^m \times 5 \cdot 2^m$, $m = 0, 1, 2, 3$ при Re = 100

Метод	N_{it}	Время счета, с.	AF
$K_{mgr} = 1, k = 0$	360104	31640.44	1.0
$K_{mgr} = 4, k = 0$	152172	13147.12	2.41
$K_{mgr} = 1, k = 10$	13608	1242.36	25.47
$K_{mgr} = 4, k = 8$	3623	197.75	160.0
$K_{mgr} = 4, k = 9$	3591	194.97	162.28
$K_{mgr} = 4, k = 10$	3632	199.48	158.61

Таблица 6 иллюстрирует эффективность совместного применения двухпараметрического предобуславливателя и алгоритмов Крылова и Федоренко. Перед выполнением расчетов, результаты которых приведены в этой таблице, была найдена область оптимальных значений параметров ξ, η для двухпараметрического предобуславливателя с помощью алгоритма, описанного в разделе 2. В этой области были взяты значения $\xi_{\text{opt}} = 2.0$ и $\eta_{\text{opt}} = 3.5$, которые использовались во всех вариантах расчетов, представленных в табл. 6. Видно, что ускорение сходимости весьма значительное: при $K_{mgr} = 4$, $k = 9$ соответствующий фактор ускорения AF = 162.28. Из

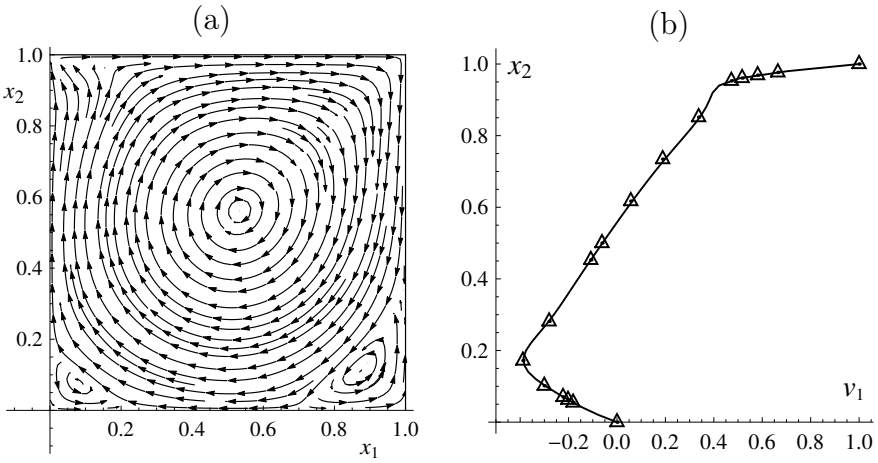

Рис. 5. Картина линий тока (a) и профиль составляющей скорости v_1 вдоль линии $x_1 = 0.5$ (b) в решении эталонной задачи при Re = 1000 (значки △ — результаты работы [37])
Fig. 5. Pattern of streamlines (a) and the profile of the velocity component v_1 along the line $x_1 = 0.5$ (b) in the benchmark problem solution at Re = 1000

этой таблицы также следует, что в рассматриваемой задаче наилучшим для ускорения сходимости итерационного процесса при решении уравнений Навье–Стокса с умеренными числами Рейнольдса является число невязок $k = 9$ в описанном выше варианте алгоритма Крылова. Заметим, что это же значение k оказалось наилучшим и при тестировании совместного применения алгоритмов Крылова и Федоренко на решении (19), см. табл. 5.

Для полноты исследования были также выполнены некоторые другие вычислительные эксперименты, например, на сетке из 40×40 ячеек с неоптимальными значениями параметров $\xi = 0.8$ и $\eta = 3.5$; примененные способы ускорения были теми же, что и в табл. 6. В этом случае машинные времена счета увеличились в среднем в 2.9 раза по сравнению с табл. 6. Это вновь подтверждает важность оптимизации итерационных процессов.

На рис. 5 представлены некоторые результаты численных расчетов течения вязкой несжимаемой жидкости в квадратной каверне для числа Рейнольдса Re = 1000. Расчеты выполнены на равномерной сетке 320×320 ячеек. Стрелки на рис. 5 (a) указывают локальные направления движения частиц жидкости. Сплошная линия на рис. 5 (b) – результат расчета по вышеописанному методу КНН. Полученные результаты сравнивались с наиболее точными результатами других исследователей, полученными при Re = 1000. Результаты по методу КНН совпадали с результатами [36–38] с точностью $\approx 10^{-3}$.

Все вычисления, результаты которых приведены в данной статье, были получены на PC с процессором Intel с тактовой частотой 2,83 Ггц.

Заключение

В данной работе были скомбинированы в методе КНН три способа ускорения сходимости итераций при решении СЛАУ. Каждый способ, входящий в комбинацию, дает свой вклад в суммарную характеристику ускорения сходимости итераций. Одним из

позитивных факторов, вносящих вклад в быструю сходимость итераций при использовании многосеточного комплекса в методе КНН, является возможность перехода с одной сетки на другую без применения таких процедур, как, например, интерполяция или осреднение, которые вводят собственную ошибку в промежуточное численное решение. Сравнение результатов по ускорению итераций при использовании одновременно всех трех способов со случаем, когда применяется только предобуславливатель, привело к ускорению до 230 раз. Как было показано выше, построение переопределенной СЛАУ для нахождения приближенного решения уравнений с частными производными по методу КНН позволяет значительно снизить ее число обусловленности по сравнению с числом обусловленности, полученным в методе коллокаций. Этот факт также оказывает положительное влияние на скорость сходимости итераций в методе КНН. Кроме того, минимизация функционала невязки в методе КНН на каждой итерации подавляет различные ошибки гармоник возмущения решения, которые возникают в промежуточных итерациях. Поэтому комбинация различных способов ускорения итераций позволяет получать на этой основе ускорение в сотни раз. Оказалось, что для значительного ускорения сходимости итераций при использовании метода Федоренко в методе КНН достаточно ограничиваться только операцией продолжения решения на многосеточном комплексе.

Эффективность совместного применения методов Крылова и Федоренко в сочетании с предложенным предобуславливателем позволила выполнить на персональных компьютерах достаточно много вычислительных экспериментов, включая решение уравнений Навье–Стокса. Часть результатов представлена в этой статье. Такая комбинация способов ускорения итерационных процессов может быть реализована и при применении других численных итерационных методов решения PDE.

Список литературы / References

[1] Edwards W. S., Tuckerman L. S., Friesner R. A., Sorensen D. C., “Krylov methods for the incompressible Navier–Stokes equations”, *J. Comput. Phys.*, **110** (1994), 82–102.

[2] Knoll D. A., Keyes D. E., “Jacobian-free Newton–Krylov methods: a survey of approaches and applications”, *J. Comput. Phys.*, **193**:2 (2004), 357–397.

[3] Griffith B. E., “An accurate and efficient method for the incompressible Navier–Stokes equations using the projection method as a preconditioner”, *J. Comput. Phys.*, **228**:20 (2009), 7565–7595.

[4] Saad Y., *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*, Manchester University Press, Manchester, 1991.

[5] Крылов А. Н., “О численном решении уравнения, которым в технических вопросах определяются частоты малых колебаний материальных систем”, *Изв. АН СССР, Отд. матем. и естеств. наук*, 1931, №4, 491–539; [Krylov A. N., “O chislennom reshenii uravneniya, kotorym v tekhnicheskikh voprosakh opredelyayutsya chastoty malykh kolebaniy materialnykh sistem”, *Izv. AN SSSR, Otd. matem. i estestv. nauk*, 1931, №4, 491–539, (in Russian).]

[6] Слепцов А. Г., “Об ускорении сходимости линейных итераций II”, *Моделирование в механике*, **3(20)**:5 (1989), 118–125; [Sleptsov A. G., “Ob uskorenii skhodimosti lineinykh iteratsiy II”, *Modelirovanie v mekhanike*, **3(20)**:5 (1989), 118–125, (in Russian).]

[7] Федоренко Р. П.“О скорости сходимости одного итерационного процесса”, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, **4**:3 (1964), 559–564; English transl.: Fedorenko R. P., “The speed of convergence of one iterative process”, *USSR Comput. Math. and Math. Phys.*, **4**:3 (1964), 227–235.

[8] Piquet J., Vasseur X., "A nonstandard multigrid method with flexible multiple semicoarsening for the numerical solution of the pressure equation in a Navier–Stokes solver", *Num. Algorithms*, **24**:4 (2000), 333–355.

[9] Jothiprasad G., Mavriplis D. J., Caughey D. A., "Higher-order time integration schemes for the unsteady Navier–Stokes equations on unstructured meshes", *J. Comput. Phys.*, **191**:2 (2003), 542–566.

[10] Ge L., Sotiropoulos F., "A numerical method for solving the 3D unsteady incompressible Navier–Stokes equations in curvilinear domains with complex immersed boundaries", *J. Comput. Phys.*, **225**:2 (2007), 1782–1809.

[11] Lucas P., van Zuijlen A. H., Bijl H., "Fast unsteady flow computations with a Jacobian-free Newton–Krylov algorithm", *J. Comput. Phys.*, **229**:2 (2010), 9201–9215.

[12] Nasr-Azadani M. M., Meiburg E., "TURBINS: An immersed boundary, Navier–Stokes code for the simulation of gravity and turbidity currents interacting with complex topographies", *Comp. & Fluids*, **45**:1 (2011), 14–28.

[13] Wang M., Chen L., "Multigrid methods for the stokes equations using distributive gauss-seidel relaxations based on the least squares commutator", *J. Sci. Comput.*, **56**:2 (2013), 409–431.

[14] Nickaeen M., Ouazzi A., Turek S., "Newton multigrid least-squares FEM for the V-V-P formulation of the Navier–Stokes equations", *J. Comput. Phys.*, **256** (2014), 416–427.

[15] Fairag F. A., Wathen A. J., "A block preconditioning technique for the streamfunction-vorticity formulation of the Navier–Stokes equations", *Num. Methods Partial Differential Equations*, **28**:3 (2012), 888–898.

[16] Benzi M., Wang Z., "Analysis of augmented lagrangian-based preconditioners for the steady incompressible navier-stokes equations", *SIAM J. Sci. Comput.*, **33**:5 (2011), 2761–2784.

[17] Jiang B. N., Lin T. L., Povinelli L. A., "Large-scale computation of incompressible viscous flow by least-squares finite element method", *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng.*, **114**:3–4 (1994), 213–231.

[18] Ramšak M., Škerget L., "A subdomain boundary element method for high-Reynolds laminar flow using stream function–vorticity formulation", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **46** (2004), 815–847.

[19] Плясунова А. В., Слепцов А. Г., "Коллокационно-сеточный метод решения нелинейных параболических уравнений на подвижных сетках", *Моделирование в механике*, **18**:4 (1987), 116–137; [Plyasunova A. V., Sleptsov A. G., "Kollokatsionno-setochnyi metod resheniya nelineinykh parabolicheskikh uravneniy na podvizhnykh setkakh", *Modelirovanie v mekhanike*, **18**:4 (1987), 116–137, (in Russian).]

[20] Carey G. F., Jiang B. N., "Least-squares finite element method and preconditioned conjugate gradient solution", *Int. J. Numer. Methods in Engng.*, **24**:7 (1987), 1283–1296.

[21] Jiang B. N., *The Least-Squares Finite Element Method: Theory and Applications in Computational Fluid Dynamics and Electromagnetics*, Springer, Berlin, 1998.

[22] Bochev P. B., Gunzburger M. D., "Finite element methods of least-squares type", *SIAM Rev.*, **40**:4 (1998), 789–837.

[23] Soares B. F., Garcia R. V., Pinto P. C., Romao E. C., "Interval study of convergence in the solution of 1D Burgers by least squares finite element method (LSFEM) + Newton linearization", *Scientific Research and Essays*, **10**:16 (2015), 522–530.

[24] Семин Л. Г., Слепцов А. Г. Шапеев В. П.,, "Метод коллокаций-наименьших квадратов для уравнений Стокса", *Вычисл. технологии*, **1**:2 (1996), 90–98; [Semin L. G., Sleptsov A. G., Shapeev V. P., "Metod kollokatsiy-naimenshikh kvadratov dlya uravneniy Stoksa", *Vychislitelnye tekhnologii*, **1**:2 (1996), 90–98, (in Russian).]

[25] Semin L., Shapeev V., "Constructing the numerical method for Navier–Stokes equations using computer algebra system", *LNCS*, **3718**, Springer, Heidelberg, 2005, 367–378.

[26] Исаев В. И., Шапеев В. П., “Развитие метода коллокаций и наименьших квадратов”, *Труды ИММ УрО РАН*, **14**:1 (2008), 41–60; Eglish transl.: Isaev V. I., Shapeev V. P., “Development of the collocations and least squares method”, *Proc. Inst. Math. Mech.*, **261** (2008), 87–106.

[27] Исаев В. И., Шапеев В. П., Черепанов А. Н., “Численное моделирование лазерной сварки тонких металлических пластин с учетом конвекции в сварочной ванне”, **13**:3 (2010), 451–466; Eglish transl.: Isaev V.I., Shapeev V. P., Cherepanov A. N., “Numerical simulation of laser welding of thin metallic plates taking into account convection in the welding pool”, *Thermophysics and Aeromechanics*, **13**:3 (2010), 419–434.

[28] Исаев В. И., Шапеев В. П., “Метод коллокаций и наименьших квадратов повышенной точности для решения уравнений Навье–Стокса”, *Докл. Академии наук*, **442**:4 (2012), 442–445; Eglish transl.: Isaev V. I., Shapeev V. P. “High-order accurate collocations and least squares method for solving the Navier–Stokes equations”, *Dokl. Math.*, **85** (2012), 71–74.

[29] Слепцов А. Г., Шокин Ю. И., “Адаптивный проекционно-сеточный метод для эллиптических задач”, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, **37**:5 (1997), 572–586; Eglish transl.: Sleptsov A. G., Shokin Yu. I., “An adaptive grid-projection method for elliptic problems”, *Comput. Math. Math. Phys.*, **37** (1997), 558–571.

[30] Беляев В. В., Шапеев В. П., “Метод коллокаций и наименьших квадратов на адаптивных сетках в области с криволинейной границей”, *Вычислительные технологии*, **5**:4 (2000), 12–21; [Belyaev V. V., Shapeev V. P., “Metod kollokaziy i naimen’shikh kvadratov na adaptivnykh setkakh v oblasti s krivolineinoi granitsei”, *Vychislitelnye tekhnologii*, **5**:4 (2000), 12–21, (in Russian).]

[31] Shapeev V. P., Isaev V. I., Idimeshev S. V., “The collocations and least squares method: application to numerical solution of the Navier–Stokes equations”, *CD-ROM Proc. 6th ECCOMAS, Sept. 2012*, Vienna Univ. of Tech. ISBN: 978-3-9502481-9-7, 2012.

[32] Shapeev V. P., Vorozhtsov E. V., “Symbolic-numeric implementation of the method of collocations and least squares for 3D Navier–Stokes equations”, *LNCS*, **7442**, Springer, Heidelberg, 2012, 321–333.

[33] Шапеев В. П., Ворожцов Е. В., Исаев В. И., Идимешев С. В., “Метод коллокаций и наименьших невязок для трехмерных уравнений Навье–Стокса”, *Вычислит. методы и программирование*, **14** (2013), 306–322; [Shapeev V. P., Vorozhtsov E. V., Isaev V. I., Idimeshev S. V., “Metod kollokatsiy i naimenshikh nevyazok dlya trekhmernykh uravneniy Navie–Stoksa”, *Vychislitelnye metody i programmirovanie*, **14** (2013), 306–322, (in Russian).]

[34] Shapeev V. P., Vorozhtsov E.V., “CAS application to the construction of the collocations and least residuals method for the solution of 3D Navier–Stokes equations”, *LNCS*, **8136**, Springer, Heidelberg, 2013, 381–392.

[35] Shapeev V., “Collocation and least residuals method and its applications”, *EPJ Web of Conferences*, **108**:01009 (2016).

[36] Исаев В. И., Шапеев В. П., “Варианты метода коллокаций и наименьших квадратов повышенной точности для численного решения уравнений Навье–Стокса”, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, **50**:10 (2010), 1758–1770; Eglish transl.: Isaev V. I., Shapeev V. P., “High-accuracy versions of the collocations and least squares method for the numerical solution of the Navier–Stokes equations”, *Comput. Math. and Math. Phys.*, **50** (2010), 1670–1681.

[37] Botella O., Peyret R., “Benchmark spectral results on the lid-driven cavity flow”, *Comput. Fluids*, **27** (1998), 421–433.

[38] Shapeev A. V., Lin P., “An asymptotic fitting finite element method with exponential mesh refinement for accurate computation of corner eddies in viscous flows”, *SIAM J. Sci. Comput.*, **31** (2009), 1874–1900.

[39] Голушко С. К., Идимешев С. В., Шапеев В. П., “Метод коллокаций и наименьших невязок в приложении к задачам механики изотропных пластин”, *Вычислительные технологии*, **18**:6 (2013), 31–43; [Golushko S. K., Idimeshev S. V., Shapeev V. P., “Metod kollokatsiy i naimenshikh nevyazok v prilozhenii k zadacham mekhaniki izotropnykh plastin”, *Vychislitelnye tekhnologii*, **18**:6 (2013), 31–43, (in Russian).]

[40] Голушко С. К., Идимешев С. В., Шапеев В. П., “Разработка и применение метода коллокаций и наименьших невязок к задачам механики анизотропных слоистых пластин”, *Вычислительные технологии*, **19**:5 (2014), 24–36; [Golushko S. K., Idimeshev S. V., Shapeev V. P., “Razrabotka i primenenie metoda kollokatsiy i naimenshikh nevyazok k zadacham mekhaniki anizotropnykh sloistykh plastin”, *Vychislitelnye tekhnologii*, **19**:5 (2014), 24–36, (in Russian).]

[41] Kharenko D., Padovani C., Pagni A., Pasquinelli G., Semin L., “Free longitudinal vibrations of bimodular beams: a comparative study”, *Int. J. Structural Stability and Dynamics*, **11**:1 (2011), 23–56.

[42] Shapeev V. P., Vorozhtsov E. V., “CAS application to the construction of the collocations and least residuals method for the solution of the Burgers and Korteweg–de Vries–Burgers equations”, *LNCS*, **8660**, Springer, Heidelberg, 2014, 432–446.

[43] Isaev V., Cherepanov A., Shapeev V., “Numerical study of heat modes of laser welding of dissimilar metals with an intermediate insert”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **99** (2016), 711–720.

[44] Ворожцов Е. В., Шапеев В. П., “Об ускорении итерационных процессов решения краевых задач комбинированием методов Крылова и Федоренко”, *Символ науки*, 2015, № 10(2), 24–43; [Vorozhtsov E. V., Shapeev V. P., “Ob uskorenii iteratsionnykh protsessov resheniya kraevykh zadach kombinirovaniem metodov Krylova i Fedorenko”, *Simvol nauki*, 2015, № 10(2), 24–43, (in Russian).]

[45] Temam R., *Navier–Stokes Equations: Theory and Numerical Analysis*, AMS Chelsea Publishing, Providence, Rhode Island, 2001.

[46] Исаев В. И., Шапеев В. П., Еремин С. А., “Исследование свойств метода коллокации и наименьших квадратов решения краевых задач для уравнения Пуассона и уравнений Навье–Стокса”, *Вычислительные технологии*, **12**:3 (2007), 1–19; [Isaev V. I., Shapeev V. P., Eremin S. A., “Issledovanie svoistv metoda kollokatsii i naimenshikh kvadratov resheniya kraevykh zadach dlya uravneniya Puassona i uravneniy Navie–Stoksa”, *Vychislitelnye tekhnologii*, **12**:3 (2007), 1–19, (in Russian).]

[47] Wolfram S., *The Mathematica Book, 5th edn.*, Wolfram Media, Inc., Champaign, IL., 2003.

[48] Wesseling P., *An Introduction to Multigrid Methods*, John Wiley & Sons, Chichester, 1992.

Shapeev V. P., Vorozhtsov E.V., "On Combining Different Acceleration Techniques at the Iterative Solution of PDEs by the Method of Collocations and Least Residuals", *Modeling and Analysis of Information Systems*, **24**:1 (2017), 39–63.

DOI: 10.18255/1818-1015-2017-1-39-63

Abstract. In the work, we consider the problem of accelerating the iteration process of the numerical solution of boundary-value problems for partial differential equations (PDE) by the method of collocations and least residuals (CLR). To solve this problem, it is proposed to combine simultaneously three techniques of the iteration process acceleration: the preconditioner, the multigrid algorithm, and the correction of the PDE solution at the intermediate iterations in the Krylov subspace. The influence of all three techniques of the iteration acceleration was investigated both individually for each technique and at their combination. Each of the above techniques is shown to make its contribution to the quantitative figure of iteration process speed-up. The algorithm which employs the Krylov subspaces makes the most significant contribution. The joint simultaneous application of all three techniques for accelerating the iterative solution of specific boundary-value problems enabled a reduction of the CPU time of their solution on computer by a factor of up to 230 in comparison with the case when no acceleration techniques were applied. A two-parameter preconditioner was investigated. It is proposed to find the optimal values of its parameters by the numerical solution of a computationally inexpensive problem of minimizing the condition number of the system of linear algebraic equations. The problem is solved by the CLR method and it is modified by the preconditioner. It is shown that it is sufficient to restrict oneself in the multigrid version of the CLR method only to a simple solution prolongation operation on the multigrid complex to reduce substantially the CPU time of the boundary-value problem solution.

Numerous computational examples are presented, which demonstrate the efficiency of the approaches proposed for accelerating the iterative processes of the numerical solution of the boundary-value problems for the two-dimensional Navier–Stokes equations. It is pointed out that the proposed combination of the techniques for accelerating the iteration processes may be also implemented within the framework of other numerical techniques for the solution of PDEs.

Keywords: preconditioning, Krylov subspaces, multigrid, Gauss–Seidel iterations, Navier–Stokes equations, the method of collocations and least residuals

On the authors:
Vasily P. Shapeev, orcid.org/0000-0001-6761-7273, Doctor of physical and mathematical sciences, professor,
Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences,
4/1 Institutskaya str., Novosibirsk 630090, Russia,
Novosibirsk National Research University, 2, Pirogov str., Novosibirsk 630090, Russia,
e-mail: vshapeev@ngs.ru

Evgenii V. Vorozhtsov, orcid.org/0000-0003-2753-8399, Doctor of physical and mathematical sciences, professor,
Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences,
4/1 Institutskaya str., Novosibirsk 630090, Russia,
e-mail: vorozh@itam.nsc.ru