

На правах рукописи

Семисалов Борис Владимирович

**Моделирование течений вязкоупругих
полимерных сред и слаботурбулентных
процессов в бозе-газах на основе
дробно-рациональных приближений и
алгоритмов без насыщения**

Специальность 1.2.2 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Новосибирск – 2025

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Институт математики им. С.Л. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук», г. Новосибирск

Научный консультант:

Ткачёв Дмитрий Леонидович, доктор физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт математики им. С.Л. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук», г. Новосибирск, заведующий лабораторией.

Официальные оппоненты:

Булатов Михаил Валерьянович, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт динамики систем и теории управления Сибирского отделения Российской академии наук», г. Иркутск, главный научный сотрудник.

Дьяченко Александр Иванович, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук», г. Москва, ведущий научный сотрудник.

Пышнограй Григорий Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова», г. Барнаул, ведущий научный сотрудник.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук», г. Новосибирск.

Защита диссертации состоится 10 апреля 2025 г. в 11:00 на заседании диссертационного совета 24.1.237.01, созданного на базе ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, расположенного по адресу: 125047, г. Москва, Миусская пл., д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИПМ им. М.В. Келдыша РАН <http://keldysh.ru/council/3/D00202403/defence3.html>

Автореферат разослан « » _____ 2025 г.

Учёный секретарь диссертационного совета 24.1.237.01
кандидат физико-математических наук

Корнилина М.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Диссертация посвящена математическому моделированию и численному анализу двух гидродинамических процессов: 1) *пуазейлевских течений несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости (НВУПЖ)* и 2) *волновых взаимодействий* в физических системах, описываемых *нелинейным уравнением Шрёдингера (НУШ)*. Несмотря на значительные отличия физических законов, лежащих в основе этих процессов, проблемы, возникающие при их математическом анализе, являются общими: решения поставленных задач, обладая высокой гладкостью внутри области задачи, имеют особые точки в её малых окрестностях или на границе. Информация о положении этих точек и их типе является принципиально важной для изучения существования решений и их свойств, а также для создания быстрых и высокоточных алгоритмов их поиска.

Первое приложение работы состоит в моделировании течений растворов и расплавов полимеров и имеет прямое отношение к созданию новых материалов с заданными физико-химическими свойствами и к развитию технологий экструзии, печати и напыления с использованием таких материалов, что соответствует пункту а) положения 21 из ¹. Успешное применение указанных технологий связано с реализацией устойчивых течений в каналах принтеров и экструдеров, которыми можно управлять с помощью механических, температурных и других воздействий на жидкость. Переход к сложной динамике и турбулентным режимам течения крайне нежелателен, поэтому необходимо иметь критерии потери устойчивости течений. Получение таких критериев существенно затруднено, поскольку *процесс ламинарно-турбулентного перехода* сложным образом зависит как от реологии полимерной жидкости, так и от технологических условий (размеров канала, температуры, давления и т. п.). Ситуация осложняется ещё тем, что ламинарные течения вязкоупругих растворов и расплавов полимеров качественно отличаются от течений классических ньютоновских жидкостей. В частности, они могут терять устойчивость практически при сколь угодно малых значениях числа Рейнольдса (Re), что зачастую ассоциируют с упругими свойствами полимеров ². Механизм, запускающий ламинарно-турбулентные переходы в течениях НВУПЖ с прямыми линиями тока при малых и умеренных значениях Re , не установлен до сих пор. Для содержательного описания таких переходов требуется новый математический и вычислительный аппарат.

Отметим, что при реализации устойчивых ламинарных течений управление потоками полимерной жидкости также является нетривиальной задачей и требует разработки специальных моделей. Один из наиболее продвинутых

¹Стратегия НТР РФ (утверждена Указом Президента РФ от 28 февраля 2024 г. № 145 «О Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации»).

²Datta S.S., Ardekani A.M., Arratia P.E. et al. Perspectives on viscoelastic flow instabilities and elastic turbulence // Phys. Rev. Fluids. 2022. Vol. 7. No. 080701.

подходов, позволяющих учесть сложное вязкоупругое поведение полимеров, включающее эффекты анизотропии, релаксации и влияния микроструктуры на свойства течения, реализован в рамках *реологических мезоскопических моделей*³. Однако для учёта температурных и электромагнитных воздействий, имеющих место в *технологиях термоструйной и пьезоэлектрической печати*, требуется дальнейшее развитие и обобщение этих моделей.

Второе приложение диссертационного исследования связано с поиском решений одной из открытых проблем современной физики, а именно с выявлением механизмов возникновения и развития турбулентности в жидкостях, газах и плазме. Важную роль в этой проблеме играют волновые взаимодействия, запускающие процессы передачи энергии и других инвариантов между разномасштабными возмущениями. Такие процессы, называемые *каскадами*, возникают во многих нелинейных физических системах и характеризуются стационарными спектрами и постоянными потоками инвариантов в пространстве Фурье между масштабами, где задаются их *накачка и диссипация (НД)*. Каскадные процессы важны для понимания ранней эволюции Вселенной, причин аномального нагрева солнечной короны, зарождения «волн убийц» в Мировом океане и многих других явлений.

Большой интерес с точки зрения приложений представляет также эволюция спектров энергии и других инвариантов в пространстве Фурье. Попытки математического исследования такой эволюции в последние десятилетия привели к бурному развитию *теории волновой турбулентности*⁴ (ТВТ), центральным объектом которой является *кинетическое уравнение (КУ) с интегралом столкновений в правой части*, описывающее волновые взаимодействия в гамильтоновых физических системах. Важными результатами ТВТ являются точные стационарные решения КУ – *спектры Колмогорова–Захарова (КЗ)*, описывающие каскадные процессы. Однако на пути строгого анализа волновых взаимодействий в рамках ТВТ возникает ряд открытых вопросов об оценке отклонений решений КУ и спектров исходных динамических уравнений, о локальном и глобальном существовании решений КУ, об определении параметров стационарных и автомодельных спектров, об обосновании неограниченного роста (blow-up) решений КУ на конечных временных интервалах и другие.

Особую актуальность указанные вопросы приобретают при моделировании физических систем, описываемых НУШ, в оптике, космологии, физике сверхтекучих жидкостей и бозе-газов, поскольку в этих приложениях является возможность верификации и валидации результатов ТВТ. В дис-

³ РОКРОВСКИЙ В. N. The Mesoscopic Theory of Polymer Dynamics. 2nd ed. Berlin: Springer, 2010; АЛТУХОВ Ю. А., ГУСЕВ А. С., ПЫШНОГРАЙ Г. В., КОШЕЛЕВ К. Б. Введение в мезоскопическую теорию текучести полимерных систем. Барнаул: Изд-во АлтГПА, 2012.

⁴ ЗАКНАРОВ V. E., L'VOV V. S., FALKOVICH G. Kolmogorov Spectra of Turbulence I: Wave Turbulence. Germany: Springer, 1992; НАЗАРЕНКО S. V. Wave Turbulence. Heidelberg, Germany: Springer, 2012.

сертации мы сосредоточились на анализе волновой кинетики бозе-газа, так как, с тех пор как был впервые получен *конденсат Бозе–Эйнштейна, КБЭ* (Нобелевская премия по физике 2001 г.), для этого приложения наблюдается стремительный прогресс экспериментальных методов, формирующих базу для проверки существующих и разработки новых теорий.

Высокая сложность и нелинейность процессов из двух описанных приложений определяет актуальность разработки *адекватных вычислительных моделей* для поиска достоверного и высокоточного численного ответа на имеющиеся открытые вопросы. Под адекватностью мы понимаем учёт основных особенностей исследуемых процессов на этапах приближения решений уравнений, описывающих эти процессы, и конструирования алгоритмов их поиска на ЭВМ. Наиболее важные с этой точки зрения особенности являются общими для рассматриваемых моделей и состоят в следующем:

1. *Большие градиенты и фронты искомым решений, обусловленные наличием особых точек (полюсов, точек ветвления и т. п.) из аналитических продолжений в комплексную плоскость \mathbb{C} .* С течением времени или при изменении параметров моделей такие точки могут возникать и исчезать, двигаться в \mathbb{C} по сложным траекториям и выходить в область, где ищется решение задачи. Последнее зачастую означает, что классическое решение рассматриваемых уравнений разрушается.
2. *Разномасштабность* в моделях течения полимерной жидкости связана с необходимостью учёта микроскопической структуры жидкости на макроуровне; в моделях волновой турбулентности – с тем, что частоты накачки и диссипации инвариантов, как правило, отличаются на несколько (вплоть до шести–восьми) порядков.
3. *Наличие областей со сложной геометрией* (сечение канала, где течёт полимер; область, по которой рассчитывается интеграл столкновений в КУ) приводит к особенностям спектров дифференциальных операторов и решений рассмотренных задач и требует разработки специальных методов аппроксимации.
4. *Множество стационарных состояний либо режимов эволюции и переключение между ними при изменении параметров моделей.* Реализация требуемого режима в нелинейной модели связана с обоснованным выбором значений параметров модели и алгоритма и с определением начальных и/или краевых условий.

Наконец, отметим, что поскольку в рассмотренных приложениях проблемы баланса точности и скорости работы численных методов, а также верификации полученных решений проявляются особенно остро, значительное внимание в диссертации уделяется реализации быстрых вычислительных алгоритмов, позволяющих контролировать погрешность решений.

Цели работы.

I. Разработка математических и вычислительных моделей 1) пуазейлевских течений НВУПЖ, их установления и разрушения (потери устойчивости) и 2) слабонелинейных волновых взаимодействий в бозе-газе. Целенаправленный учёт особенностей 1–4, указанных выше, в рамках этих моделей.

II. Создание проблемно-ориентированных вычислительных алгоритмов для расчёта указанных гидродинамических процессов с малыми затратами памяти и машинного времени; построение апостериорных оценок погрешности; реализация алгоритмов на ЭВМ в виде комплексов программ, их отладка и тестирование.

III. Применение созданных моделей и алгоритмов для расчёта неизотермических магнитогидродинамических (МГД) течений НВУПЖ в каналах с сечениями прямоугольной, эллиптической и круглой форм при наличии тонких включений – нагревательных элементов; для поиска способов управления такими течениями с помощью механических, температурных и магнитных воздействий; для выявления нелинейных механизмов потери устойчивости осесимметричных течений; для анализа множества стационарных режимов течения и переключений между ними.

IV. Применение созданных моделей и алгоритмов для верификации ТВТ в задаче о течении бозе-газа (для анализа отклонений спектров НУШ от решений соответствующего КУ); для вывода и верификации новых точных стационарных решений КУ типа спектров КЗ, описывающих прямой каскад энергии и обратный каскад частиц бозе-газа; для поиска параметров автомоделных режимов эволюции турбулентных спектров; для исследования неклассического степенного решения КУ и его разрушения (blow-up) в конечный момент времени, означающего начало процесса конденсации.

Объекты исследования.

1. Задача о пуазейлевском течении несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости, а также об установлении и разрушении такого течения.

2. Задача о взаимодействии волн в физических системах, описываемых уравнением Шрёдингера с кубической нелинейностью.

3. Методы аппроксимации и алгоритмы, учитывающие информацию о гладкости и особенностях решений указанных задач.

Методы исследования. Для приближения функций, их производных и интегралов, а также для вывода оценок погрешности в работе использованы *методы без насыщения*⁵; прямые и обратные теоремы теории приближений; квадратуры Гаусса–Якоби, Clenshaw–Curtis, Такахаша–Мори; ряды Фурье и Фурье–Чебышёва; интерполяционные полиномы с узлами Чебышёва и *дробно-рациональные барицентрические интерполяции*⁶ (ДРБИ);

⁵Бабенко К. И. О явлении насыщения в численном анализе // Докл. АН СССР. 1978. Т. 241, №3. С. 505–508.

⁶SCHNEIDER C., WERNER W. Some new aspects of rational interpolation // Math. Comp. 1986. Vol. 47. P. 285–299.

тензорные произведения приближений; приближения Чебышёва–Паде.

Для разработки и реализации вычислительных алгоритмов и апостериорного анализа погрешности использованы метод коллокаций, метод установления, нестационарные регуляризации с операторами параболического и соболевского типов; спектральные разложения матриц, интервальные методы; конечно-разностные аппроксимации, методы Рунге–Кутты; методы объектно-ориентированного анализа проектирования и программирования.

Для анализа моделей течения НВУПЖ и слаботурбулентных процессов в бозе-газах применяются методы решения линейных и нелинейных алгебраических и дифференциальных уравнений, а также их систем, метод линеаризации Ньютона; законы сохранения плотности частиц и энергии, преобразование Захарова, аргумент Эйнштейна о конденсации, автомодельные замены переменных. Значительная часть результатов по моделированию получена на основе вычислительного эксперимента.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Разработаны методы приближения функций, основанные на новых вариантах полиномиальных и дробно-рациональных барицентрических интерполяций. С применением этих методов получены матрицы, аппроксимирующие операторы дифференцирования в краевых и начальных задачах для дифференциальных уравнений. Рассчитаны числа обусловленности, нормы и спектральные разложения этих матриц. Предложены быстросходящиеся методы интегрирования функций с большими градиентами и разрывами производных у границы области интегрирования, даны оценки их погрешности.

2. Разработан метод численного решения краевых и начально-краевых задач для нелинейных ОДУ и УЧП эллиптического и параболического типов в приложениях произвольной размерности, а также задач Коши для кинетических уравнений. Доказана теорема об устойчивости метода при решении уравнения Пуассона. Получены оценки объёмов памяти и числа операций метода. Предложен подход к апостериорному анализу погрешности. Разработаны обобщения метода для решения задач в областях сложной геометрии.

3. Предложен новый вариант реологической мезоскопической модели для описания неизотермических магнитогидродинамических течений несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости. Даны постановки задач о течениях пуазейлевского типа в каналах, показана неединственность их стационарных решений. Рассчитаны стационарные течения и процессы их установления.

4. Найдены точные стационарные решения задачи об осесимметричном пуазейлевском течении полимерной жидкости. С учётом критериев существования найденных решений сформулированы условия потери устойчивости указанного течения. Проведены верификация и валидация этих условий.

5. Разработана вычислительная модель однородного изотропного взаи-

действия волн в физических системах, описываемых нелинейным уравнением Шрёдингера. Решена проблема верификации теории волновой турбулентности на больших интервалах по времени: показано, что спектр волнового действия уравнения Шрёдингера и решение соответствующего кинетического уравнения совпадают с высокой точностью на интервалах порядка удвоенного характерного времени эволюции спектра.

6. Найдены точные стационарные решения кинетического уравнения, описывающие прямой каскад энергии и обратный каскад частиц бозе-газа. На основе этих решений дано объяснение отклонений экспериментальных данных от результатов теории локальной турбулентности в задаче о прямом каскаде энергии. С контролем погрешности рассчитаны автомодельные решения кинетического уравнения.

7. Методы решения задач, указанных выше, реализованы в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для ЭВМ. С их помощью проведён ряд тестовых расчётов, результаты которых подтверждают отсутствие насыщения разработанных методов, демонстрируют высокую точность и скорость сходимости методов и верифицируют полученные решения.

Обоснованность и достоверность результатов, полученных в диссертации, обеспечивается: применением при разработке математических моделей фундаментальных физических законов и принципов; учётом основных свойств и особенностей исследуемых процессов и постановок задач на этапе разработки вычислительной модели; оценками погрешности созданных методов приближения и алгоритмов решения КУ, ОДУ и УЧП; высокой точностью и скоростью сходимости, достигнутыми при численном анализе тестовых задач с известными точными решениями; высокоточным соответствием решений, полученных разработанными методами и найденных другими численными и аналитическими методами в рассмотренных прикладных задачах; соответствием результатов моделирования экспериментальным данным в этих задачах. В частности, условия потери устойчивости течений полимерной жидкости, полученные в диссертации, соответствуют данным из ⁷, а приведённые стационарные и автомодельные спектры, описывающие кинетику волн в бозе-газе, – результатам измерений из ⁸.

Научная новизна, теоретическая и практическая значимость.

В работе предложены новые подходы к решению важных проблем из двух рассмотренных областей гидродинамики, среди них: новый способ математического описания потери устойчивости течений растворов и распла-

⁷KHALID M., SHANKAR V., SUBRAMANIAN G. A continuous pathway between the elastoinertial and elastic turbulent states in viscoelastic channel flow // Phys. Rev. Lett. 2021. Vol. 127. No. 134502; CHANDRA B., SHANKAR V., DAS D. Onset of transition in the flow of polymer solutions through microtubes // J. Fluid Mech. 2018. Vol. 844. P. 1052–1083.

⁸NAVON N., GAUNT A.L., SMITH R.P., HADZIBAVIC Z. Emergence of a turbulent cascade in a quantum gas // Nature. 2016. Vol. 539. P. 72–75; GLIDDEN J.A.P., EIGEN CH., DOGRA L. H. ET AL. Bidirectional dynamic scaling in an isolated Bose gas far from equilibrium // Nature Physics. 2021. Vol. 17. No. 4. P. 457–461.

вов полимерных материалов; комплексный подход к управлению течениями в каналах с учётом реологии и микроструктуры полимера при воздействии температурных и магнитных полей; поиск новых стационарных и автомодельных волновых спектров в физических системах, описываемых НУШ, и их применение для интерпретации экспериментальных данных; верификация и валидация ТВТ при анализе слабонелинейных взаимодействий волн.

В диссертации сделан важный шаг на пути к адекватному численному моделированию сложных нелинейных процессов и систем: созданы новые алгоритмы на основе полиномиальных и дробно-рациональных интерполяций, работающие в областях с достаточно сложной геометрией, позволяющие существенно уменьшить объём используемой памяти и число операций, а также контролировать погрешность полученных решений за счёт учёта информации о свойствах искомым функций и благодаря оригинальным схемам формирования и решения задач линейной алгебры, соответствующих исходным дифференциальным моделям. Соискатель считает, что созданные алгоритмы позволят значительно продвинуться в решении многих нелинейных проблем, лежащих за рамками тематики диссертации.

Апробация работы. Основные результаты диссертации были представлены на ведущих Всероссийских и Международных конференциях, среди которых: VIII Междунар. конф. «Математика, её приложения и математическое образование», г. Улан-Удэ, 2023; конференция «Dynamics in Siberia», Novosibirsk, Russia, 2023; воркшоп «Wavecomplexity International Networking Event», Nice, France, 2021; Междунар. конф. «Марчуковские научные чтения», г. Новосибирск, 2021; XIII Междунар. конф. «Сеточные методы для краевых задач и приложения – 2020», г. Казань, 2020; Междунар. конф. «Аналитические и численные методы решения задач гидродинамики, математической физики и биологии», посвящ. 100-летию К.И. Бабенко, Московская обл., г. Пущино, 2019; Междунар. конф. в честь 90-летия С.К. Годунова «Математика в приложениях», г. Новосибирск, 2019; Всерос. конф. с междунар. участием, посвящ. 60-летию Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН «Современные проблемы механики сплошных сред и физики взрыва», г. Новосибирск, 2017; Междунар. конф. «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики», посвящ. 90-летию со дня рожд. акад. Г. И. Марчука, г. Новосибирск, 2015; VIII Междунар. конф. «Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике», посвящ. 115-летию со дня рожд. акад. М.А. Лаврентьева, г. Новосибирск, 2015; II Междунар. конф. «Высокопроизводительные вычисления – математические модели и алгоритмы», посвящ. Карлу Якоби, г. Калининград, 2013.

Основные результаты работы обсуждались на следующих семинарах: «Теоретические и вычислительные проблемы задач математической физики» в ИМ СО РАН, 2020, 2021, 2022 гг. (рук. докторá физ.-мат. наук А.М. Блохин и Д.Л. Ткачёв); «Общественный математический семинар» в ИМ СО РАН, 2021 г.; «Математический коллоквиум» в ИМ СО РАН, 2023 г.

(видеозапись доступна на сайте sobolevmath.tilda.ws); «Прикладная гидродинамика» в ИГиЛ СО РАН, 2019, 2021, 2023, 2024 гг. (рук. чл.-корр. РАН В.В. Пухначёв, д-р физ.-мат. наук Е.В. Ерманык); «Zakharov seminar on nonlinear waves», 2024 г. (рук. акад. Е.А. Кузнецов, канд. физ.-мат. наук Д.С. Агафонцев, канд. физ.-мат. наук А.А. Гелаш); «Семинар на ученом совете Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау» в ИТФ, 2024 г.; «Computational Mechanics Seminar» Skolkovo Institute of Science and Technology, 2024 г. (рук. Dr. Aslan Kasimov); «Общественный научный семинар ИВМиМГ СО РАН», 2024 г. (рук. чл.-корр. РАН Г.А. Михайлов, чл.-корр. РАН С.И. Кабанихин, д-р физ.-мат. наук М.А. Марченко); «Информационно-вычислительные технологии» в ФИЦ ИВТ, 2015, 2019, 2022, 2024 гг. (рук. акад. Ю.И. Шокин, д-р физ.-мат. наук В.М. Ковеня, д-р техн. наук В.Б. Барахнин); «Математическое моделирование в механике» в ИВМ СО РАН, 2024 г. (рук. докторá физ.-мат. наук В.К. Андреев, В.Б. Бекежанова); «Математические методы экономики и естественных наук» на каф. диф. уравнений МГУ, 2023 г. (рук. докторá физ.-мат. наук А.С. Шамаев и О.С. Розанова); объединённый семинар ИМ СО РАН, ИВМиМГ СО РАН, каф. мат. методов геофизики НГУ, МЦА «Математические проблемы геофизики», 2023 г. (рук. чл.-корр. РАН С.И. Кабанихин, д-р физ.-мат. наук М.А. Шишленин); «Совместный семинар Отдела технологий каталитических процессов и Отдела тонкого органического синтеза» в Институте катализа СО РАН, 2024 г. (рук. чл.-корр. РАН А.С. Носков); семинар лаборатории «Laboratoire de Mathématiques et de leurs Applications de Pau» UPPA, France, 2018 г. (рук. prof. Gilles CARBOU); семинар отдела «Non-linear Physics group, Laboratoire de Physique de l'École Normale Supérieure (LPENS)» École Normale, France, 2021 г. (рук. prof. Alexandros Alexakis).

Публикации. По результатам диссертационного исследования опубликованы 19 статей в рецензируемых журналах [1] – [19]. Все статьи индексируются базой данных РИНЦ, 15 статей – базой данных Scopus, 13 статей – Web of Science (из них 5 опубликованы в журналах из квартала Q1); разработаны, реализованы и зарегистрированы в ФИПС 3 комплекса программ для ЭВМ [20] – [22].

Личный вклад автора. Все результаты диссертации получены лично соискателем или при его непосредственном участии. Работы [2, 3, 5, 9, 11, 13, 14], всего 7 работ, являются сольными (по ним соискатель не имеет соавторов). В статьях [1, 15, 17–19] соискателю принадлежат разработка, обоснование и тестирование алгоритмов решения КУ, дополнительно в [17–19] соискатель работал над выводом КУ, описывающего однородное изотропное взаимодействие волн бозе-газа, над получением точных стационарных решений КУ, над постановкой задач для автомодельных переменных, над сравнением результатов решения НУШ и КУ. В работах [4, 6–8] соискателю принадлежат вывод разрешающих соотношений, описывающих пуазейлевские течения НВУПЖ, разработка и реализация численных методов, вывод

оценок погрешностей, дополнительно в [4, 6] – идентификация параметров моделей, проведение расчётов и анализ их результатов; в работах [10, 12] – разработка и реализация численных методов, проведение расчётов. Программы [20, 22] разработаны и реализованы лично соискателем, в реализации программы [21] принимала участие ученица соискателя, Е.А. Круглова.

Отметим, что в диссертации реализован комплексный подход к численному анализу задачи о стационарном неизотермическом течении НВУПЖ в канале с сечением между двумя софокусными эллипсами. Для решения задачи использованы: метод, созданный в диссертации, метод конечных элементов и метод коллокаций и наименьших квадратов. Решение задачи методом конечных элементов получено А.Г. Горыниным. Метод коллокаций и наименьших квадратов реализован В.А. Беляевым, Л.С. Брындиным под рук. проф. В.П. Шапеева. Сравнение результатов работы методов проведено в [16]. Решения, полученные этими методами в разных конечномерных функциональных пространствах, совпадают с точностью до 3–5 знаков при изменении параметров задачи в широких диапазонах.

Реализованы комплексные исследования для верификации ТВТ в моделях динамики бозе-газа. В режиме слабонелинейного однородного изотропного взаимодействия волн проведены сравнения: 1) спектров волнового действия; 2) функций плотности вероятности для интенсивностей волн и 3) кумулянтов, полученных при численном решении НУШ и соответствующего КУ. Разработка и реализация псевдоспектрального метода решения трёхмерного НУШ с периодическими граничными условиями выполнены коллегами соискателя Ying Zhu и Giorgio Krstulovic в рамках [17–19].

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы и четырёх приложений. Работа содержит 364 страницы, 84 рисунка, 36 таблиц и 321 ссылку на литературу.

Благодарности. Соискатель выражает глубокую признательность своему учителю д-ру физ.-мат. наук, проф. А.М. Блохину, научному консультанту в области устойчивости течений полимерной жидкости д-ру физ.-мат. наук, доц. Д.Л. Ткачёву, научному консультанту в области волновой турбулентности проф. С.В. Назаренко. Соискатель благодарит своих коллег и соавторов за плодотворное сотрудничество и научные дискуссии, в их числе акад. М.П. Федорук; чл.-корр. Ю.Л. Трахинин; доктора физ.-мат. наук С.К. Голушко, В.Н. Гребенёв, С.Б. Медведев, Г.Г. Черных, В.П. Шапеев; проф. А. Guessab; исследователи G. Krstulovic и Y. Zhu; кандидаты физ.-мат. наук В.А. Беляев, Э.А. Бибердорф, И.А. Васева, С.В. Идимешев, Р.Е. Семенко; м. н. с. НГУ Л.С. Брындин, А.Г. Горынин; ученики соискателя: Е.А. Круглова, Г.А. Кузьмин, В.Р. Баранчиков, И.А. Бугоец, Л.И. Куткин.

В 2017–2024 гг. научная работа соискателя по теме диссертации поддерживалась грантами РФ (соглашения № 17-71-10135, 20-71-00071, 20-11-20036, 22-11-00287) и грантом Математического Центра в Академгородке (соглашение с Минобрнауки России № 075-15-2022-281).

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение включает 4 параграфа и содержит описание проблематики и формулировку методологии работы, обзор принципов моделирования и разработки численных методов в рамках описанной методологии со ссылками на источники литературы, перечень результатов диссертационного исследования, выносимых на защиту. Отметим сразу, что все понятия и классические результаты, на которые опирается работа, описаны в приложении I.

Более конкретно, в § 0.1 изложены проблемы и перспективы, связанные с решением задач из двух прикладных областей: 1) моделирование пуазейлевских течений растворов и расплавов полимерных материалов, их установления и разрушения; 2) описание волновых взаимодействий в нелинейных системах гидродинамического типа. Для моделирования течений полимерной жидкости показана эффективность мезоскопического подхода и описан способ вывода реологического соотношения для компонент симметричного тензора, описывающего анизотропию среды ⁹.

Для анализа волновых взаимодействий в физических системах, описываемых НУШ, изложены основные принципы ТВТ и шаги, необходимые для вывода интегродифференциального КУ для спектра волнового действия $n_\omega(t) = n(\omega, t)$ в случае однородного, изотропного взаимодействия волн [17]. Здесь ω – частота, t – время. Указанное КУ имеет вид

$$\frac{dn_\omega}{dt} = St_\omega(n) = \int_{\Delta_\omega} \mathcal{P}_{\omega 23} [n_c n_2 n_3 + n_\omega (n_2 n_3 - n_c n_3 - n_c n_2)] d\omega_2 d\omega_3, \quad (1)$$

$$\mathcal{P}_{\omega 23} = \mathcal{P}(\omega, \omega_2, \omega_3) = \frac{4\pi^3}{\sqrt{\omega}} \min(\sqrt{\omega}, \sqrt{\omega_2 + \omega_3 - \omega}, \sqrt{\omega_2}, \sqrt{\omega_3}),$$

где $n_i = n(\omega_i, t)$, $n_c = n(\omega_c, t)$, $\omega_c = \omega_2 + \omega_3 - \omega$, множество $\Delta_\omega = \{(\omega_2, \omega_3) : \omega_2, \omega_3, \omega_c > 0\}$ при $\omega \in [0, \infty)$ является неограниченной двумерной областью, рис. 1. Ядро $\mathcal{P}_{\omega 23}$ интеграла столкновений $St_\omega(n)$ содержит особенности: изломы вдоль линий $\omega_2 = \omega$, $\omega_3 = \omega$ и неограниченный рост производных в окрестности границы Δ_ω : $\omega_2 = 0$, $\omega_3 = 0$ и $\omega_c = 0$, что осложняет расчёты.

В § 0.1 подчёркнуто, что, несмотря на значительное отличие физики исследуемых процессов, проблемы, возникающие при их математическом моделировании, являются общими и состоят в специфических особенностях рассматриваемых задач. Развёрнутый анализ этих общих проблем и особенностей дан в § 0.2 (см. пункты 1–4 выше, в разделе «Актуальность работы»).

В § 0.3 сформулированы критерии эффективности вычислительных алгоритмов, связанные с учётом априорной информации о гладкости и особенностях искомых решений. С указанием ссылок на результаты теории при-

⁹ POKROVSKI V.N., ALTUKHOV YU.A., PУSHNOGRAI G.V. The mesoscopic approach to the dynamics of polymer melts: consequences for the constitutive equation // J. Non-Newton Fluid Mech. 1998. Vol. 76. No. 1–3. P. 153–181.

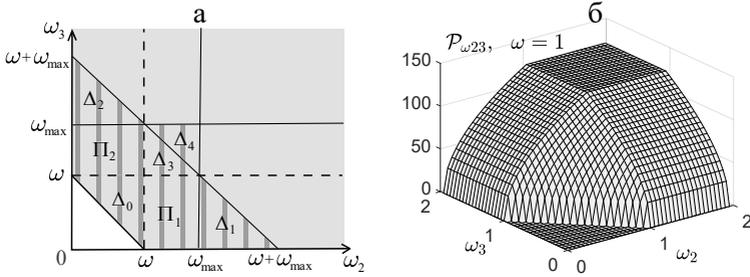


Рис. 1: Область интегрирования Δ_ω : неограниченная серая область при $\omega \in [0, \infty)$, ограниченная заштрихованная область при $\omega \in [0, \omega_{\max}]$ (а); график ядра интеграла столкновений (б)

ближений, теории поперечников, теории табулирования проведён анализ эффективности подходов на основе рядов Фурье и интерполяционных многочленов с узлами Чебышёва. Дан обзор результатов, касающихся применения дробно-рациональных приближений для аппроксимации функций с особыми точками, а также для локализации особых точек. Указан способ применения полиномиальных и дробно-рациональных интерполяций для решения задач произвольной размерности, основанный на записи прямых (тензорных) произведений. Описан метод аппроксимации дифференциальных и интегральных операторов, изложены идеи о сочетании метода коллокаций и метода установления для формирования и решения задач линейной алгебры, соответствующих исходным нелинейным дифференциальным постановкам.

В § 0.4 представлен перечень основных положений диссертации, выносимых на защиту; приведена структура работы; описаны новизна и значимость, обоснованность и достоверность полученных результатов; дана информация о личном вкладе соискателя и об апробации работы.

Первая глава состоит из четырёх параграфов. В ней изложены новые методы приближения функций, их производных и интегралов, позволяющие учесть запас гладкости и наличие особенностей решений нелинейных краевых, начальных и начально-краевых задач для ОДУ, УЧП и КУ; получены оценки погрешности новых методов; описаны их обобщения для приближения решений двумерных и трёхмерных задач в областях различных форм.

В § 1.1 для приближения гладких функций предложены модификации интерполяционных полиномов с узлами Чебышёва вида

$$\tilde{p}_N(u, x) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j(x) \frac{\omega_j T_N(x)}{x - x_j^{\text{ch}}} u(x_j^{\text{ch}}) + \sigma_{-1}(x) u(-1) + \sigma_{+1}(x) u(1), \quad (2)$$

где N – число узлов интерполяции, x_j^{ch} и $\omega_j = N/T'_N(x_j^{\text{ch}})$ являются узлами

и весами интерполяции соответственно:

$$x_j^{\text{ch}} = \cos\left(\frac{2j-1}{2N}\pi\right), \quad \omega_j = (-1)^{j-1} \sin\left(\frac{2j-1}{2N}\pi\right), \quad j = \overline{1, N}, \quad (3)$$

$T_N(x)$ – многочлен Чебышёва первого рода степени N ; функции $\sigma_j(x)$, $\sigma_{\pm 1}(x)$ обеспечивают автоматическую реализацию однородных условий на границах $x = -1$ и $x = 1$. Для реализации неоднородных условий при поиске решения $u(x)$ краевой задачи и задачи Коши использовано представление:

$$u(x) = u(x) + v(x) \approx \tilde{p}_N(u, x) + v(x), \quad (4)$$

где $u(x)$ удовлетворяет однородным условиям, а $v(x)$ – заданным условиям в точках $x = -1$, $x = 1$ (подходы к расчёту $v(x)$ и их обобщения на случай нескольких переменных обсуждаются в § 1.1 и 1.3). Далее описаны шесть вариантов задания функций $\sigma_j(x)$, $\sigma_{\pm 1}(x)$, соответствующих шести типам условий на границах отрезка $[-1, 1]$: условия Дирихле, условия Неймана, смешанные условия, условия Дирихле в точке $x = -1$ ($x = 1$) со смешанными условиями в точке $x = 1$ ($x = -1$), условия Коши в точке $x = -1$.

Необходимость построения модифицированных полиномов (2), (3) при решении краевых задач связана с тем, что применение классических приближений ($\sigma_j(x) \equiv 1$ и $\sigma_{\pm 1}(x) \equiv 0$) в совокупности с методом коллокации приводит к задачам линейной алгебры с вырожденными матрицами. Использование (2), (3), напротив, ведёт к хорошо обусловленным задачам (детальный анализ этого аспекта дан в § 1.3).

Далее в § 1.1 приведены интерполяции 2π -периодических функций на основе полиномов с ядром Дирихле и более специфические приближения, учитывающие чётность либо нечётность приближаемой функции. На основе прямых (тензорных) произведений разных комбинаций разработанных приближений и метода замены переменной построены интерполяции функций двух переменных в областях различных форм, среди них прямоугольник, кольцо, область между софокусными эллипсами, область между окружностями со смещёнными центрами, круг, треугольник (узлы этих интерполяций показаны на рис. 2). По аналогии построены интерполяции функций на сфере, на цилиндрической поверхности и на торе, а также функций трёх переменных в параллелепипеде, цилиндрическом и сферическом слоях. Описанные приближения позволяют удовлетворить любым комбинациям шести рассмотренных типов граничных условий.

В § 1.2 построены модификации дробно-рациональных барицентрических интерполяций (ДРБИ) для приближения функции $u(x)$:

$$\tilde{r}_N(u, x) = \frac{1}{\mathfrak{D}_N(x)} \sum_{j=1}^N \zeta_j^*(x) J_j(x) u(x_j) + \zeta_{-1}(x) u(-1) + \zeta_1(x) u(1), \quad (5)$$

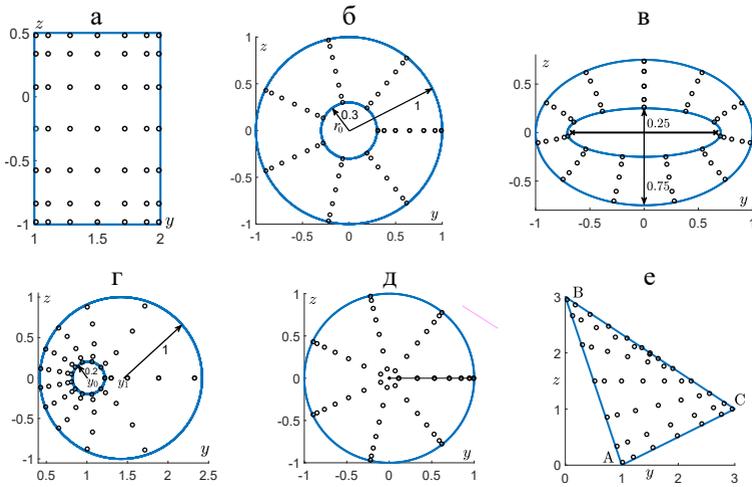


Рис. 2: Области на плоскости (y, z) и узлы интерполяции: а – прямоугольник; б – кольцо; в – область между софокусными эллипсами; г – область между двумя окружностями со смещёнными центрами; д – круг радиуса 1, е – треугольник

где $J_j(x) = \frac{\omega_j}{x - x_j}$, $\mathfrak{D}_N(x) = \sum_{j=1}^N J_j(x)$, $x_j = g(x_j^{\text{ch}})$, g – аналитическое отображение, биекция отрезка $[-1, 1]$ в себя, позволяющее адаптировать приближение к особенностям $u(x)$; функции $\zeta_j^*(x)$, $\zeta_{\pm 1}(x)$ задаются так, чтобы приближение $\tilde{r}_N(u, x)$ автоматически удовлетворяло однородным условиям на границах определённого типа (рассмотрены те же типы условий, что в § 1.1). В § 1.3 показано, что применение (5) вместе с методом коллокаций при решении краевых и начально-краевых задач для ОДУ и УЧП обеспечивает невырожденность и хорошую обусловленность систем линейных уравнений.

В рамках диссертации использован следующий вид отображения $g(x)$ ¹⁰:

$$g(x) = \delta + \varepsilon \sinh \left\{ (a^- + a^+) \frac{x - 1}{2} + a^- \right\}, \quad a^\pm = \sinh^{-1} \frac{1 \pm \delta}{\varepsilon}, \quad (6)$$

где выражение « \sinh^{-1} » обозначает обратную функцию к гиперболическому синусу. Такой выбор функции g обусловлен возможностью явного задания координат $(\delta, \varepsilon) \in \mathbb{C}$ особой точки решения для адаптации к ней узлов интерполяции. Кроме того, отображение (6) допускает обобщение для учёта произвольного количества особых точек¹¹ и может быть использовано при

¹⁰Тее Т.-W., ТРЕФЕТЕН L. N. A rational spectral collocation method with adaptively transformed Chebyshev grid points // SIAM J. Sci. Comp. 2006. Vol. 28. No. 5. P. 1798–1811.

¹¹ИДИМЕШЕВ С. В. Дробно-рациональная аппроксимация в начально-краевых задачах с фронтами // Выч. технологии. 2020. Т. 25, № 2. С. 63–79.

наличии у $u(x)$ разрыва производной или экспоненциально растущего градиента в точке $x = x_d \in [-1, 1]$ (при этом нужно задать $\delta = x_d$, $\varepsilon \ll 1$).

На рис. 3 приведены погрешности приближения трёх функций: $f_T^1(x) = (1 + (\tilde{\beta}x)^2)^{-1} - (1 + \tilde{\beta}^2)^{-1}$, $f_T^2(x) = |x|^{\tilde{\alpha}} - 1$, $f_T^3(x) = \exp(-\tilde{\gamma}x^2) - \exp(-\tilde{\gamma})$, $\tilde{\gamma} \gg 1$ с условиями Дирихле при $x = \pm 1$ полиномом (2) и ДРБИ (5), (6). Эти погрешности обозначены $\varepsilon_{\tilde{p}}^{\text{ch}}$ и $\varepsilon_{\tilde{p}}^r$ соответственно. На рис. 3, б точками показана асимптотика наилучшего дробно-рационального приближения¹² (НДРП) функции $f_T^2(x)$ при $\tilde{\alpha} = 1.5$. Видно, что применение ДРБИ даёт кардинальное ускорение сходимости, а асимптотики ДРБИ и НДРП совпадают.

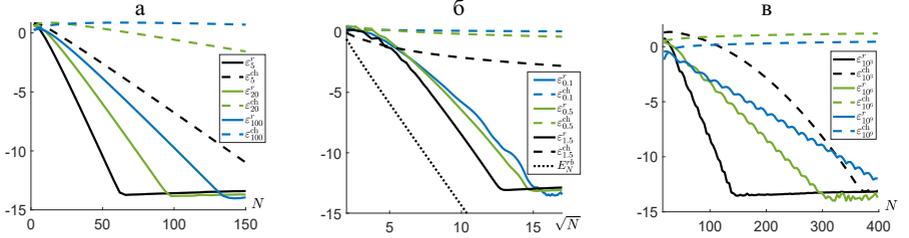


Рис. 3: Десятичные логарифмы погрешностей (2) ($\varepsilon_{\tilde{p}}^{\text{ch}}$, пунктир) и (5) ($\varepsilon_{\tilde{p}}^r$, сплошные линии) с условиями 1-го типа: для функции $f_T^1(x)$ при $\tilde{p} = \tilde{\beta} = 5, 20, 100$ (а); для $f_T^2(x)$ при $\tilde{p} = \tilde{\alpha} = 0.1, 0.5, 1.5$, пунктиром показана асимптотика НДРП (б); для $f_T^3(x)$ при $\tilde{p} = \tilde{\gamma} = 10^3, 10^6, 10^9$ (в)

Далее показано, что при $g = \text{id}$ приближения (5) и (2) совпадают для всех типов условий на границах. Для оценки погрешности (5) при $g \neq \text{id}$ с применением идей из¹³ показано, что $\tilde{r}_N(u, x)$ с точностью до быстроубывающих компонент совпадает с приближением $\mathbf{p}_N(\nu, x)$, где \mathbf{p}_N есть обобщение (2) на случай приближения функции с неоднородными условиями, $\nu = (u \circ g)/g'$.

В § 1.3 на основе предложенных полиномиальных и дробно-рациональных интерполяций построены матричные аппроксимации операторов дифференцирования первого и второго порядков (матрицы \mathcal{A} и A соответственно). Выражения элементов матриц $\mathcal{A} = (\mathbf{a}_{ij})$ и $A = (a_{ij})$, $i, j = \overline{0, N+1}$, получены путём дифференцирования (2) по x один и два раза, перехода к пределу $x \rightarrow x_i^{\text{ch}}$, где $x_0^{\text{ch}} = -1$, $x_{N+1}^{\text{ch}} = 1$ и записи линейных комбинаций

$$\tilde{\mathbf{p}}_N'(u, x_i^{\text{ch}}) = \sum_{j=0}^{N+1} \mathbf{a}_{ij} u(x_j^{\text{ch}}), \quad \tilde{\mathbf{p}}_N''(u, x_i^{\text{ch}}) = \sum_{j=0}^{N+1} a_{ij} u(x_j^{\text{ch}}).$$

В итоге, с использованием (4) и обозначений $U = (u(x_0^{\text{ch}}), \dots, u(x_{N+1}^{\text{ch}}))^T$, $\mathfrak{U}_\mu = (\mathbf{u}_\mu(x_0^{\text{ch}}), \dots, \mathbf{u}_\mu(x_{N+1}^{\text{ch}}))^T$, $\mu \in \{x, xx\}$, получены аппроксимации вида

¹²STANLY H.R. Best uniform rational approximation of x^α on $[0, 1]$ // Acta Math. 2003. Vol. 190. P. 241–306.

¹³BALTENSPERGER R., BERRUT J.-P., NOEL B. Exponential convergence of a linear rational interpolant between transformed Chebyshev points // Math. Comp. 1999. V. 68. P. 1109–1120.

$\mathfrak{U}_x \approx \mathcal{A}U + \mathcal{V}_x$, $\mathfrak{U}_{xx} \approx \mathcal{A}U + \mathcal{V}_{xx}$, где \mathcal{V}_x , \mathcal{V}_{xx} – векторы с компонентами $v(x_i^{\text{ch}})$, $v_{xx}(x_i^{\text{ch}})$, $i = 0, N+1$. Аналогичные формулы записаны для (5) и для интерполиций периодических функций. Все варианты выражений для коэффициентов \mathbf{a}_{ij} и a_{ij} приведены в § 1.3 и в приложении III.

Далее проведён анализ спектров полученных матричных аппроксимаций: с применением интервальных методов¹⁴ рассчитаны значения собственных чисел матриц и радиусы интервалов, гарантированно содержащих эти числа. Для краевых задач рассмотренных типов показано, что $[N/2]$ меньших по модулю собственных чисел матрицы A с высокой точностью совпадают с собственными числами соответствующих задач Штурма–Лиувилля. Исследованы спектральные разложения матриц A :

$$A = R_A D_A R_A^{-1}, \quad (7)$$

где R_A – матрица собственных векторов A ; D_A – диагональная матрица собственных значений A . Построены графики зависимостей норм (norm) и обусловленностей (cond) матриц \mathcal{A} , A и R_A , а также радиусов интервалов (rad), гарантированно содержащих значения norm и cond, от числа узлов интерполяции для всех описанных типов граничных условий. Исследованы зависимости norm, cond и rad от коэффициентов смешанных граничных условий и параметров δ , ε отображения (6). В результате констатировано, что norm и cond с ростом N растут медленно, что является принципиально важным для построения не завышенных оценок погрешности методов решения ОДУ, УЧП и КУ. Исключение представляет метод приближения решений задачи Коши, для которого получен быстрый (экспоненциальный) рост cond R_A . В § 1.3 предложены способы решения этой проблемы.

Далее в § 1.3 описаны аппроксимации интегральных операторов на отрезке с переменным верхним пределом и даны обобщения всех предложенных приближений и представления (4) для случая функций двух и большего числа переменных.

Параграф 1.4 посвящён разработке квадратурных формул для функций с особенностями, лежащими на границе области интегрирования или в её малой окрестности. Такие формулы необходимы для расчёта интеграла столкновений в КУ. Здесь разработаны новые формулы на основе квадратур Гаусса–Якоби, формул Мори и отображения (6); описана модификация формул Clenshaw–Curtis; получены оценки погрешности созданных методов.

В главе 2 разработан, обоснован и протестирован *нелокальный метод без насыщения (НМБН)* для решения краевых и начально-краевых задач для нелинейных ОДУ и УЧП второго порядка, а также задач Коши для четырёхволновых КУ. Основой предложенного метода является применение единого (нелокального) приближения искомого решения полиномом или

¹⁴RUMP S.M. Verification Methods: Rigorous Results using Floating-point Arithmetic // Acta Numerica. 2010. Vol. 19. P. 287–449.

дробно-рациональной функцией (ДРФ) из числа построенных в гл. 1. Скорости сходимости этих приближений близки к асимптотикам погрешности наилучших приближений в классах полиномов и ДРФ, что соответствует определению метода без насыщения. НМБН использует метод установления с регуляризирующими операторами и метод коллокаций. В рамках НМБН предложен новый подход к формированию и решению задач линейной алгебры, соответствующих исходным дифференциальным постановкам, позволивший существенно (на несколько порядков) сократить количество операций по сравнению с традиционной схемой метода коллокаций, приводящей к СЛАУ с большой разреженной матрицей. ДРБИ обеспечивают высокие адаптивные качества НМБН в задачах с особенностями. В тестовых расчётах показаны отсутствие насыщения и значительные преимущества НМБН над другими методами. Получены апостериорные оценки погрешности. Предложены обобщения для решения задач в областях сложных форм.

Глава 2 состоит из восьми параграфов. В § 2.1 описан алгоритм решения краевых и начально-краевых задач для ОДУ и УЧП. Для примера краевая задача Дирихле в области $D \subset \mathbb{R}^d$ в рамках алгоритма записывается в виде

$$\Delta u = f(u, \mathbf{x}), \quad u|_{\partial D} = g_b(\mathbf{x}), \quad (8)$$

где $\mathbf{x} = (x^1, \dots, x^d) \in D$, d – размерность задачи, f зависит от неизвестной функции и её производных 1-го и 2-го порядков; Δ – оператор Лапласа, функция $g_b(\mathbf{x})$ задаёт граничные условия. В алгоритме используется метод установления: для организации итераций вводятся *фиктивная временная переменная* t и нестационарный оператор – *регуляризация* B_t ; решение задачи (8) ищется как предел решений $u(t, \mathbf{x})$ нестационарной задачи

$$B_t u = \Delta u - f(u, \mathbf{x}), \quad u(t, \mathbf{x})|_{\mathbf{x} \in \partial D} = g_b(\mathbf{x}), \quad u(0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) \quad (9)$$

при $t \rightarrow \infty$. В рамках НМБН используются *простая регуляризация* $B_t = \frac{\partial}{\partial t}$ и *регуляризация (оператор) Соболева* $B_t = (k_1 - k_2 \Delta) \frac{\partial}{\partial t}$, где $k_1, k_2 > 0$. Вводится сетка по t с постоянным шагом τ и узлами $t_k = \tau k$, $k = 1, 2, \dots$; решения на k -м и $(k-1)$ -м шагах по времени, удовлетворяющие однородным краевым условиям, обозначаются \hat{u} , u ; с применением разностной аппроксимации $\frac{\partial}{\partial t} u(t_k, \mathbf{x}) \approx \frac{\hat{u} - u}{\tau}$ и формулы (4) выводятся соотношения для расчёта значений \hat{u} по значениям u в случае простой регуляризации:

$$\hat{u} - \tau \Delta \hat{u} = u - \tau f(u, \mathbf{x}) + \tau \Delta v \quad (10)$$

и в случае регуляризации Соболева:

$$k_1 \hat{u} - (k_2 + \tau) \Delta \hat{u} = (k_1 - k_2 \Delta) u - \tau f(u, \mathbf{x}) + \tau \Delta v. \quad (11)$$

Условие остановки итераций, $\|B_t u\| = \|\Delta u - f(u, \mathbf{x})\| \leq \varepsilon_S$, даёт приближённое решение задачи (8) с невязкой установления ε_S .

Для перехода от (10), (11) к задачам линейной алгебры использованы интерполяции функций \hat{u} , u и их производных, созданные в гл. 1, и метод коллокаций. Для приближения производных в задачах размерности $d \geq 3$ использована операция δ -произведения матриц A_δ , аппроксимирующих производные, и d -мерных массивов \hat{U} , содержащих значения \hat{u} в узлах коллокации: $\hat{U}_{x^\delta x^\delta} \approx A_\delta \times \hat{U}$ (эта операция определена в § 1.3), где $\delta = \overline{1, d}$, $\hat{U}_{x^\delta x^\delta}$ – массив, содержащий значения второй производной \hat{u} по переменной x^δ . Схема аппроксимации уравнения (10) в случае $d = 3$ показана на рис. 4, где N_δ – число элементов массива (число узлов коллокации) по направлению δ , $H(U)$ – массив значений правой части (10) в узлах коллокации.

Из (10), (11) при использовании спектральных разложений матриц A_δ вида (7) получены уравнения с диагональными матрицами D_{A_δ} . Решения этих уравнений записаны в явном виде, и из них с использованием операций δ -произведения получены решения (10), (11). Этот алгоритм является обобщением метода решения матричного уравнения Сильвестра.

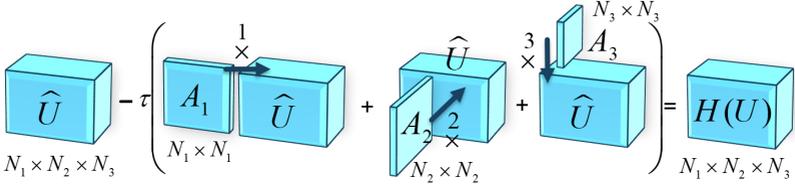


Рис. 4: Схема δ -произведений матриц и массивов в уравнении (10) при $d = 3$

В § 2.1 дано пошаговое описание алгоритма; разобраны его упрощения для частных случаев $d = 1, 2$ и обобщения для решения нестационарных уравнений; доказаны теоремы о сходимости алгоритма в линейных задачах и получены оценки объёмов памяти и числа операций. Подчеркнём, что при $N_1 = \dots = N_d = N$ на каждом шаге метода установления для поиска решения требуется порядка N^{d+1} операций. Классическая схема метода коллокаций в аналогичной постановке приводит к системе линейных уравнений с матрицей размера $N^d \times N^d$, для решения которой требуется порядка N^{3d} операций, т. е. НМБН позволяет снизить число операций в $O(N^{2d-1})$ раз.

В последнем пункте § 2.1 отмечено, что за счёт применения ДРБИ разработанный алгоритм особенно эффективен в задачах, решения которых имеют особые точки. Для их локализации в одномерном случае описан метод, основанный на аппроксимациях Чебышёва–Паде.

Параграф 2.2 посвящён разработке алгоритма решения задачи Коши для КУ, с членами, описывающими накачку и диссипацию энергии:

$$\frac{dn_\omega}{dt} = \underbrace{St_\omega(n) + \frac{c_f}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\omega - \omega_f}{\sigma} \right)^2 \right]}_{\text{накачка}} - \underbrace{[(\omega/\omega_L)^{-p} + (\omega/\omega_R)^q] n_\omega}_{\text{диссипация}}, \quad (12)$$

где $St_\omega(n)$ – интеграл столкновений из (1); $c_f, \sigma, \omega_f, \omega_L, \omega_R, p, q$ – положительные параметры; ω_L, ω_R – характерные значения частот низко- и высокочастотной диссипаций, числа p, q определяют крутизну спектра в окрестности диссипации; ω_f, c_f, σ характеризуют расположение и градиент спектра накачки, $\omega_L \ll \omega_f \ll \omega_R$. В § 2.2 полагается, что $\omega \in [0, \omega_{\max}]$, поэтому область интегрирования Δ_ω в $St_\omega(n)$ ограничена, см. рис. 1, а.

Для построения алгоритма в § 2.2 решены три задачи. Во-первых, разработаны и протестированы быстросходящиеся кубатурные формулы для расчёта интеграла столкновений. При этом реализована декомпозиция области $\Delta_\omega, \omega \in [0, \omega_{\max}]$ на подобласти $\Delta_0\text{--}\Delta_4, \Pi_1, \Pi_2$, внутри которых подынтегральная функция является аналитической; каждая подобласть отображена на квадрат $Sq = [-1, 1]^2$; интегралы по Sq представлены в виде повторных интегралов и рассчитаны с помощью квадратурных формул из § 1.4 с учётом особенностей ядра интеграла столкновений и спектра $n_\omega(t)$. Для тестирования этих формул использованы точные стационарные решения КУ, полученные в § 4.2, и спектры¹⁵, имеющие на левой границе частотного диапазона точки ветвления. Во-вторых, с применением ДРБИ (5) при $\zeta_{\pm 1} = 0, \zeta^*(x) \equiv 1$ и обобщения (6) разработаны и протестированы методы приближения функции $n_\omega(t)$ и правой части КУ (12) с учётом того, что градиенты членов, описывающих накачку и диссипацию, отличаются на несколько (вплоть до восьми) порядков. В-третьих, для построения сходящейся схемы решения задачи Коши для (12) с шагом по времени, существенно превышающим минимальное расстояние между узлами сетки по переменной ω , реализована модификация НМБН. Отметим, что схемы на основе разностных методов и метода Рунге–Кутты в этой задаче не работали.

Параграф 2.3 посвящён тестированию разработанного алгоритма в нелинейных краевых задачах с решениями различной гладкости. Порядки сходимости численных решений сопоставлены с порядками сходимости наилучших полиномиальных приближений функций соответствующей гладкости. При этом использованы оценки на основе неравенства Джексона для функции одной переменной¹⁶ и оценки из¹⁷ для функций нескольких переменных. Показано высокоточное соответствие указанных порядков сходимости, что свидетельствует об отсутствии насыщения разработанного алгоритма.

В § 2.4 даны апостериорные оценки двух компонент погрешности численных решений НМБН – погрешности использованного метода приближения ε_M и вычислительной погрешности ε_R , связанной с округлением действительных чисел в памяти ЭВМ. Оценки ε_R для одно-, дву- и трёхмерных

¹⁵Захаров В.Е., Филоненко Н.Н. Спектр энергии для стохастических колебаний поверхности жидкости // Докл. Акад. наук. 1966. Т. 170, № 6. С. 1292–1295.

¹⁶Дзядык В. К. Введение в теорию равномерного приближения функций полиномами. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1977, гл. VI.

¹⁷Бабенко К. И. Основы численного анализа. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986, гл. 3, § 1, п. 7.

задач выражаются через нормы и обусловленности матриц, аппроксимирующих производные, и матриц их спектральных разложений. Анализ этих норм и обусловленностей с гарантией точности проведён в § 1.3. Оценки ε_M построены только для случая применения (2) в рамках НМБН. Они основаны на соответствии асимптотик погрешностей численных решений НМБН и наилучших полиномиальных приближений. В [9] с применением НМБН проведены эксперименты в задачах с известными решениями. Показана близость построенных оценок ε_R и ε_M к точным значениям ε_R и ε_M . В гл. 3 эти оценки использованы при решении задачи о течении полимерной жидкости.

В § 2.5 описан эксперимент с двумерной нелинейной краевой задачей, точное решение которой, u_{ex} , имеет пик, рис. 5, а. Эта особенность обусловлена наличием у аналитических продолжений решения, как функции каждой переменной, полюсов, лежащих в комплексной плоскости близко к области задачи. Показано, что в таком случае применение ДРБИ (5) в рамках НМБН (относительная погрешность в этом случае обозначена $\varepsilon_{\text{spec}}^r$) обеспечивает существенные преимущества над ситуацией, когда используются полиномиальные приближения (2) (относительная погрешность — $\varepsilon_{\text{spec}}^{\text{Ch}}$).

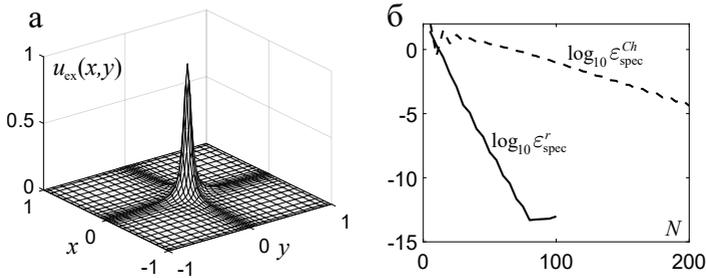


Рис. 5: График $u_{\text{ex}}(x, y)$, построенный на сетке из $N \times N$ узлов коллокации при $N = 31$, адаптированной к особенности u_{ex} с применением (6) (а); зависимость логарифмов относительных погрешностей от N (б)

Параграф 2.6 содержит сравнение результатов работы НМБН, метода конечных элементов (МКЭ) и метода коллокаций и наименьших квадратов (МКНК) в модельной задаче о течении полимерной жидкости в канале, сечение которого ограничено двумя софокусными эллипсами. Модельная задача имеет ряд особенностей: она включает систему уравнений, одно из которых является квазилинейным; решение имеет большие градиенты экспоненциального характера. Для реализации НМБН задача записана в эллиптической системе координат. В параграфе дано краткое описание *метода коллокаций и наименьших квадратов, МКНК* (реализацией занимались В.А. Беляев и Л.С. Брындин) и *метода конечных элементов, МКЭ* (реализован А.Г. Горыниным) и их параметров, и приведена сводная таблица, содержа-

щая значения параметров, погрешностей и порядков сходимости методов, а также времени расчётов. Из таблицы видны значительные преимущества НМБН как по максимальной достижимой точности, так и по времени расчётов при заданной точности. Кроме того, для рассмотренной задачи имеются диапазоны параметров, в которых численное решение удалось найти только с использованием НМБН. Вместе с этим отмечено, что МКНК и МКЭ обладают большей гибкостью при решении задач в областях сложных форм.

В § 2.7 описан один подход к обобщению НМБН для решения задач более сложной геометрии. Конкретно, созданы комбинации НМБН, методов декомпозиции и альтернирующего метода Шварца для решения нелинейных краевых задач в областях, допускающих разбиения на подобласти канонических форм, где возможно построение прямых произведений одномерных интерполяций. Далее на основе таких произведений решена одна из основных проблем численной реализации метода Шварца – разработан быстрый метод генерации данных и обмена ими в итерациях между подобластями. Приведены оценки числа операций метода. Реализованы тестовые расчёты в нелинейных дву- и трёхмерных (3D) задачах, решения которых имеют особенности. На рис. 6, а изображена область 3D задачи с решением $u(x, y, z) = \alpha(\exp[-\alpha(x - 5)^2] + 1) \sin(\pi x) \sin(\pi y) \sin(\pi z)$ при $\alpha = 100$, имеющим большие градиенты в окрестности плоскости $x = 5$. Для поиска решения использованы НМБН и ДРБИ, в подобластях I и II построены сетки размера $N \times N \times N$. На рис. 6, б показана сходимость численного решения с ростом N , а в табл. 1 – время решения задачи на одном ядре персональной ЭВМ и значения относительной погрешности $\varepsilon_{\text{spec}}^r$ при различных N .

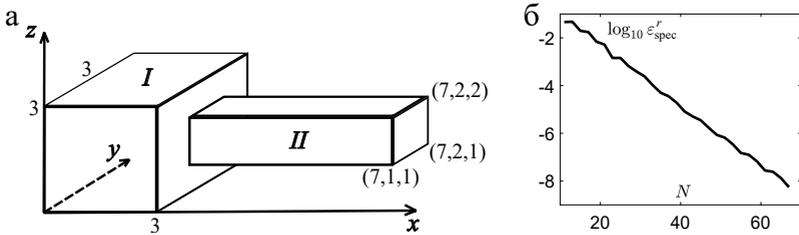


Рис. 6: Область тестовой задачи (а); \log_{10} относительной погрешности (б)

Таблица 1: Зависимость времени расчётов T (с) и погрешности от N

N	15	25	35	45	55	65
T	0.58	1.98	6.06	17.75	165.7	773.4
$\varepsilon_{\text{spec}}$	3.96×10^{-2}	2.9×10^{-3}	10^{-4}	7.1×10^{-6}	3×10^{-7}	2.6×10^{-8}

В § 2.8 обсуждаются детали реализации НМБН в виде комплексов программ для ЭВМ [20]– [22] с применением современных концепций объектно-ориентированного анализа, проектирования и программирования, методов

ускорения итерационных процессов и библиотек, использующих параллельные вычисления. Отмечена аналогия в реализации НМБН и известного псевдоспектрального метода, основанного на применении быстрых прямого и обратного преобразований Фурье (аналогами таких преобразований служат операции δ -произведений с массивами решений, определённые в § 1.3). Существенным преимуществом НМБН в этом контексте является возможность применения различных (в том числе дробно-рациональных) приближений и учёта любых типов граничных условий (не только условий периодичности). Далее отмечена возможность сочетания НМБН со схемой переменных направлений, что позволяет адаптировать алгоритм к градиентам решений, расположенным на линиях (гиперповерхностях) сложных структур, лежащих внутри области задачи.

Третья глава посвящена математическому и численному моделированию пуазейлевских течений несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости (НВУПЖ) при наличии температурных и магнитных воздействий на жидкость. Глава состоит из шести параграфов.

В § 3.1 приведена обобщённая реологическая мезоскопическая модель, которая описывает неизотермические МГД течения несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости. Уравнения модели, записанные в безразмерной форме в прямоугольной декартовой системе координат (x, y, z) , имеют вид:

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{H} = 0, \quad (13)$$

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} + \nabla \left(P + \frac{\sigma_m \|\mathbf{H}^2\|}{2} \right) = \frac{\operatorname{div}(Y\Pi)}{\operatorname{Re}} + \sigma_m (\mathbf{H}, \nabla) \mathbf{H} + (\operatorname{Fr}^{-2} - \operatorname{Ga}(Y-1)) \mathbf{e}_g, \quad (14)$$

$$\frac{da_{ij}}{dt} - \sum_{l=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_l} a_{lj} - \sum_{l=1}^3 \frac{\partial u_j}{\partial x_l} a_{li} - \frac{1}{\operatorname{W}} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \mathfrak{L}_{ij} = 0, \quad i, j = \overline{1, 3}, \quad (15)$$

$$\frac{d\mathbf{H}}{dt} = (\mathbf{H}, \nabla) \mathbf{u} + b_m \Delta_{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}} \mathbf{H}, \quad (16)$$

$$\frac{dY}{dt} = \frac{1}{\operatorname{Pr}} (\Delta Y + A_T Y \Phi + A_m \Phi_m). \quad (17)$$

Здесь t – время, P – давление; $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$ – вектор скорости жидкости, $\mathbf{H} = (L, M, N)^T$ – вектор напряжённости магнитного поля,

$\Pi = (a_{ij})$ – симметрический тензор анизотропии второго ранга, его размерные компоненты определены в § 0.1 диссертации;

$d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla$ – материальная производная по времени;

в уравнении (14) $\operatorname{div}(Y\Pi) = (\operatorname{div}(Y\mathbf{a}_1), \operatorname{div}(Y\mathbf{a}_2), \operatorname{div}(Y\mathbf{a}_3))^T$,

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ – столбцы симметричной матрицы $\Pi = (a_{ij}) = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$;

$Y = T/T_0$, T – температура, $T_0 = 293.15 \text{ K} = 20^\circ \text{ C}$ – температура окружающей среды;

в уравнении (15) $\mathfrak{L}_{ij} = (K_I a_{ij} + \beta(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j))/\bar{\tau}_0(Y)$, $i, j = 1, 2, 3$,

$$K_I = W^{-1} + \bar{k}I/3, \quad \bar{k} = k - \beta,$$

$I = \text{tr}\Pi = a_{11} + a_{22} + a_{33}$ – первый инвариант тензора анизотропии,

k, β ($0 \leq \beta \leq 1$) – феноменологические параметры модели, характеризующие вклады, связанные с анизотропией (величина β учитывает ориентацию макромолекулярного клубка, число k – его размеры),

$$\bar{\tau}_0 = J(Y)/Y, \quad J(Y) = \exp(-\bar{E}_A(Y-1)/Y), \quad \bar{E}_A = E_A/T_0;$$

$\text{Re} = \rho u_H l / \eta_0^*$ – число Рейнольдса, $\rho (= \text{const})$ – плотность среды,

$$W = \tau_0^* u_H / l$$
 – число Вайсенберга,

η_0^*, τ_0^* – начальные значения сдвиговой вязкости и времени релаксации при $T = T_0$;

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$
 – оператор Лапласа, в (16) $\Delta_{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}} \mathbf{H} = (\Delta L, \Delta M, \Delta N)^T$;

в уравнении теплопроводности (17) Φ, Φ_m – диссипативные функции, A_T, A_m – коэффициенты диссипации;

постоянные Ra (число Релея), Pr (число Прандтля), $\text{Ga} = \text{Ra}/\text{Pr}$ (число Грасгофа), Fr (число Фруда), E_A (энергия активации) описаны в диссертации, \mathbf{e}_g – единичный вектор, задающий направление силы тяжести;

$$\sigma_m = \mu_0 H_0^2 / (\rho u_H^2)$$
 – коэффициент магнитного давления,

$$b_m = 1/\text{Re}_m, \quad \text{Re}_m = \sigma_e \mu_0 u_H l$$
 – магнитное число Рейнольдса,

μ_0 – магнитная проницаемость вакуума, σ_e – электропроводность среды.

Система (13)–(17) записана в безразмерном виде: время t ; координаты x, y, z ; компоненты вектора скорости u, v, w ; давление P ; компоненты вектора напряжённости магнитного поля L, M, N ; компоненты тензора анизотропии a_{ij} получены из исходных размерных величин делением на (l/u_H) ; $l; u_H; \rho u_H^2; H_0; W/3$ соответственно, где l – характерная длина, u_H – характерная скорость, H_0 – характерная величина напряжённости магнитного поля.

Далее в § 3.1 даны комментарии об учёте магнитных и температурных эффектов и об аналогиях (15) с моделью Oldroyd-B при $k = \beta = 0$. Проведено упрощение уравнений (13)–(17) для поиска их частных решений вида

$$\begin{cases} v = w \equiv 0, \quad M = N \equiv 0, \quad u = u(t, y, z), \quad Y = Y(t, y, z), \quad L = L(t, y, z), \\ P = \mathcal{P}(t, y, z) - P_d(t)x, \quad a_{ij} = a_{ij}(t, y, z), \quad i, j = \bar{1}, \bar{3}, \end{cases} \quad (18)$$

описывающих течения пуазейлевского типа в канале с осью Ox и прямоугольным сечением $\Omega = \{(y, z) : -1 \leq y \leq 1, -r \leq z \leq r\}$ под действием безразмерного перепада давления $P_d(t)$ на отрезке длины hl вдоль оси Ox ; и магнитного поля с вектором напряжённости, направленным вдоль оси канала. Получена разрешающая система, включающая квазилинейное уравнение второго порядка для $u(t, y, z)$, нелинейные уравнения для $Y(t, y, z)$ и $L(t, y, z)$ параболического типа и шесть нелинейных эволюционных уравнений для $a_{ij}(t, y, z)$.

В § 3.2 проведён анализ стационарных решений модели. В предположении $\text{Ga}(Y - 1) \gg \text{Fr}^{-2}$ получена разрешающая система уравнений вида

$$\begin{aligned} \hat{a}u_{yy} - 2\hat{b}u_{yz} + \hat{c}u_{zz} + \hat{d}u_y + \hat{e}u_z &= -[\text{Re}P_d + \text{Ga}(Y - 1)]\tilde{\mathcal{K}}, \\ \Delta_{y,z}Y + A_T Y \lambda \mu &= 0, \quad \Delta_{y,z}L = 0, \quad \Delta_{y,z} = \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2, \end{aligned} \quad (19)$$

где $\hat{a} = 1 - u_y^2 \mathcal{L}$, $\hat{c} = 1 - u_z^2 \mathcal{L}$, $b = u_y u_z \mathcal{L}$, $\lambda^2 = u_y^2 + u_z^2$, $\mu^2 = a_{12}^2 + a_{13}^2$,
 $\hat{d} = (1 - \bar{\gamma}) \frac{Y_y}{Y} - \bar{\gamma} \bar{E}_A \frac{Y_y}{Y^2}$, $\hat{e} = (1 - \bar{\gamma}) \frac{Y_z}{Y} - \bar{\gamma} \bar{E}_A \frac{Y_z}{Y^2}$, $\mathcal{L} = \frac{1 - \bar{\gamma}}{\lambda^2}$, $\bar{\gamma} = \frac{\bar{\tau}_0 \lambda}{\mu} \mu_\Lambda$.

Неизвестные функции (19) – стационарные распределения $u(y, z)$, $Y(y, z)$, $L(y, z)$ в канале. Выражения $\tilde{\mathcal{K}}$ и μ_Λ приведены в диссертации. Для их вычисления потребовалось решить кубическое уравнение, связывающее величины $\sigma = a_{22} + a_{33}$ и μ . В § 3.2 исследованы ветви решения этого уравнения и описаны все возможные выражения для функций \hat{a} – \hat{e} и $\tilde{\mathcal{K}}$ в (19), таким образом, исследована множественность стационарных решений модели.

При переходе в (19) к эллиптическим и биполярным координатам выведены разрешающие уравнения, описывающие течения в каналах с сечениями между двумя софокусными эллипсами и между двумя окружностями, см. рис. 2, в, г. Для всех полученных уравнений поставлены граничные условия: условия прилипания жидкости, значения температуры на внешних и внутренних (при наличии) границах каналов, условия Дирихле для $L(y, z)$. С использованием НМБН проведён численный анализ стационарных течений при вариации параметров задачи в широких диапазонах, исследованы зависимости потоков и температур от этих параметров, построены графики соответствующих решений и зависимостей (некоторые результаты приведены на рис. 7, параметры модели идентифицированы по данным из ¹⁸).

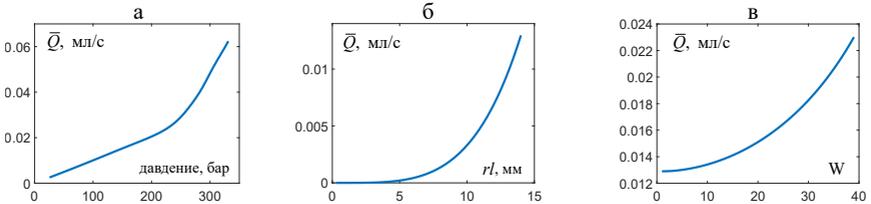


Рис. 7: Зависимости размерного потока жидкости \bar{Q} в канале с прямоугольным сечением от перепада давления (а), от ширины канала rl (б) и от числа Вайсенберга (в)

Параграф 3.3 посвящён верификации численных решений задачи о течении НВУПЖ в канале между двумя софокусными эллипсами при сравнении результатов, полученных НМБН, МКЭ и МКНК. Указанные методы

¹⁸SCHMIDT M., WASSNER E., MÜNSTEDT H. Setup and test of a laser doppler velocimeter for investigations of flow behaviour of polymer melts // Mechanics of Time-Dependent Materials. 1999. Vol. 3. P. 371–393.

основаны на приближениях, лежащих в различных конечномерных функциональных пространствах. Их высокоточное совпадение, показанное в § 3.3, является важным аргументом в пользу существования устойчивых стационарных решений рассматриваемой прикладной задачи. При этом наблюдаемые относительные отклонения решений имеют порядки $10^{-5} - 10^{-3}$. Их можно трактовать как характерные значения погрешности решений.

В § 3.3 исследованы сходимости численных решений, полученных с применением НМБН, МКНК и МКЭ в отдельности; показаны сходимости этих методов к единому решению в широком диапазоне параметров модели; проведён анализ особенностей решений.

В § 3.4 исследован процесс установления нестационарных изотермических течений НВУПЖ к стационарным при наличии постоянного перепада давления P_d с начальными условиями, соответствующими состоянию покоя жидкости. При этом для разрешающей системы уравнений из § 3.1 поставлена начально-краевая задача и для организации итераций по нелинейности выполнена линеаризация соотношений для a_{ij} по Ньютону. Решения задачи получены численно с применением НМБН. В расчётах найдены значения параметров W , P_d , r , β , при превышении которых метод расходится (это говорит об отсутствии стационарного течения); показано, что в процессе установления могут возникать сильные осцилляции скорости и изменение направления потока жидкости; подтверждено, что предельное решение нестационарных уравнений (при условии установления) с высокой точностью совпадает с одной из ветвей стационарных решений, рассчитанных в § 3.2; обнаружен и охарактеризован эффект переключения предельного решения нестационарных уравнений между ветвями решения стационарной задачи при изменении параметра $c_k = k/\beta$. Показано, что при малых W и P_d указанное переключение реализуется при переходе через линию на плоскости (β, c_k) , близкую к гиперболе: $c_k(\beta) = 3/(4\beta) - 0.5$.

В § 3.5 найдены точные стационарные решения, описывающие изотермические осесимметричные течения типа Пуазейля в цилиндрическом канале с сечением $\{(r, \varphi) : 0 \leq r \leq 1, 0 \leq \varphi < 2\pi\}$. В случае $k = \beta$ эти решения для скорости $w(r)$ и для функций $a_{ij}(r)$ имеют вид:

$$a_{r\varphi} = a_{\varphi\varphi} = a_{\varphi z} \equiv 0,$$

$$a_{rr} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - (\beta\Lambda P_d)^2 r^2}}{2\beta\Lambda}, \quad a_{rz} = -P_d \frac{r}{2}, \quad a_{zz} = a_{rr} + \frac{P_d^2}{2(W^{-1} + a_{rr})} r^2, \quad (20)$$

$$w(r) = \frac{1}{P_d\beta\Lambda W} \left\{ (8(1 - \beta)\beta - 1) \log \left| \frac{\theta(r)}{\theta(1)} \right| \pm \hat{\beta}\Upsilon \right\} \pm \frac{4\Upsilon\hat{\beta}(\beta - 1)}{P_d W \Lambda \theta(r)\theta(1)}, \quad (21)$$

где

$$\Upsilon = \theta(r) - \theta(1), \quad \Lambda = \text{Re } W, \quad \hat{\beta} = 2\beta - 1, \quad \theta(r) = \pm\hat{\beta} + \sqrt{1 - (P_d\beta\Lambda)^2 r^2}.$$

В случае $k \neq \beta$ получены более сложные выражения со сходящимся интегральным оператором. Из (20), (21) видно, что существование гладких

решений определяется положением точек ветвления. С учётом этого наблюдения в § 3.5 сформулирован сценарий разрушения таких решений: при изменении параметров Re , W , P_d , β точки ветвления решений движутся вне отрезка $[0, 1]$ (в общем случае в комплексной плоскости) и при некоторых значениях этих параметров попадают на границу канала, в точку $r = 1$. При этом действительное решение перестаёт существовать. Показано, что критические значения параметров обратно пропорциональны, т.е., например, $Re_c \sim 1/W_c$, что соответствует экспериментальным данным, см. ссылку в разделе «Обоснованность и достоверность результатов».

Далее в § 3.5 численно исследовано установление нестационарных решений и определены соотношения между параметрами, при реализации которых решение перестаёт устанавливаться. Показано, что при $\beta \geq 0.5$ эти соотношения с высокой точностью совпадают с критическими значениями параметров стационарной задачи; при $\beta < 0.5$ имеет место «преднеустойчивость»: нестационарные решения с увеличением Re перестают устанавливаться немного раньше, чем достигается критическое значение Re_c , рис. 8.

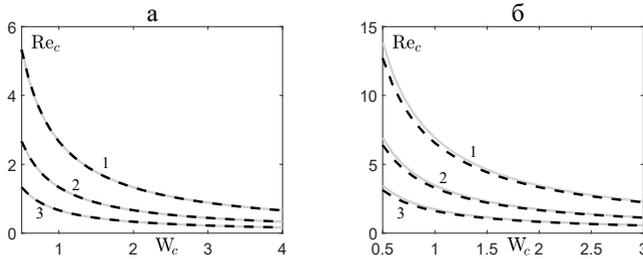


Рис. 8: Критические значения Re в зависимости от W : а) $\beta = 0.75$ и случаи $P_d = 0.5$, $P_d = 1$, $P_d = 2$ (линии 1, 2, 3 соответственно); б) $\beta = 0.25$ для тех же значений P_d . Серые сплошные линии соответствуют условиям существования решений (20), (21), пунктирные линии получены при численном анализе установления нестационарных решений

Параграф 3.6 содержит результаты численного анализа стационарных неизотермических течений полимерной жидкости между двумя соосными цилиндрами при отсутствии диссипации тепла. Сечение канала $\{(y, z) : r_0 \leq y^2 + z^2 \leq 1\}$ изображено на рис. 2, б. Проведены расчёты с контролем погрешности метода приближения ε_M и вычислительной погрешности ε_R (апостериорные оценки ε_M , ε_R обсуждались в § 2.4). С применением обратных теорем теории приближений сделано заключение, что поле скорости является аналитическим, но его продолжение в \mathbb{C} имеет особую(ые) точку(и), положение которой(ых) не является фиксированным (как в соответствующем решении Пуазейля для ньютоновской жидкости), а зависит от параметров реологии жидкости. Координаты особой точки $\delta + i\varepsilon \in \mathbb{C}$ вычислены с при-

менением приближения Чебышёва–Паде, описанного в § 2.1. Показано, что ε близка к нулю, и построены зависимости δ от параметров β , \bar{E}_A , W , рис. 9.

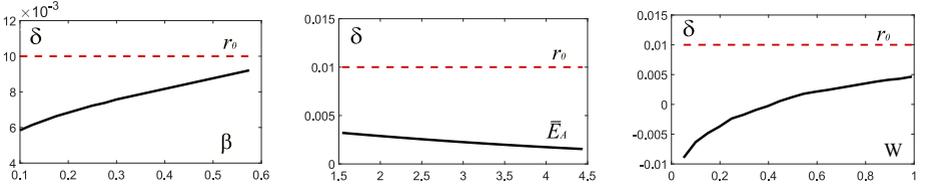


Рис. 9: Зависимость δ от феноменологического параметра β , энергии активации \bar{E}_A и числа Вайсенберга W . Для всех случаев $r_0 = 0.01$. Пунктирной линией показана левая граница области решения $[r_0, 1]$

При приближении особой точки к границе канала $r = r_0$ у скорости возникает большой градиент, а при выходе особой точки на границу решение разрушается, что соответствует сценарию, описанному в § 3.5.

Глава 4 диссертации посвящена моделированию волновых взаимодействий в бозе-газе, для описания динамики которого использовано НУШ, конкретно, *уравнение Гросса–Питаевского (УГП)*. На примере этого приложения в гл. 4 даны ответы на открытые вопросы ТВТ, указанные выше в разделе «Актуальность работы». Глава включает четыре параграфа.

В § 4.1 на основе количественных сравнений численных решений КУ и спектров УГП, а также их статистик дана верификация ТВТ. Под статистиками здесь понимается *функция плотности вероятности (ФПВ)* интенсивностей волн и *кумулянты*. Численные решения УГП в волновом диапазоне $k \in [0, k_{\text{cutoff}}]$ получены соавторами соискателя по работе [17]. При проведении вычислений особое внимание уделено реализации основных положений ТВТ: условия о достаточно слабом нелинейном взаимодействии волн и о том, что амплитуды и фазы волн являются независимыми случайными величинами и фазы равномерно распределены на окружности. При решении УГП с разрешениями 256^3 и 512^3 рассчитан спектр $n^{\text{rad}}(k, t)$, являющийся осреднением спектра волнового действия по сфере радиуса k в пространстве Фурье. Этот спектр выражается через решение КУ (1): $n^{\text{rad}}(k, t) = 4\pi\omega n_\omega(t)$ с использованием дисперсионного соотношения $\omega = k^2$ (исследован неакустический режим). Начальные условия для УГП и КУ заданы следующим образом:

$$n^{\text{rad}}(k, 0) = g_0 \exp\left(\frac{-(k - k_s)^2}{\sigma^2}\right), \quad n_\omega(0) = n^{\text{rad}}(k, 0)/4\pi\omega, \quad (22)$$

где $g_0 = 1$, $k_s = 22$, $\sigma = 2.5$. Затем спектры УГП и решения КУ рассчитаны и сопоставлены в диапазоне $\omega \in [0.1^2, k_{\text{cutoff}}^2]$ на коротком, $t \in [0, 25]$, и длинном, $t \in [0, 100]$, временных промежутках, рис. 10.

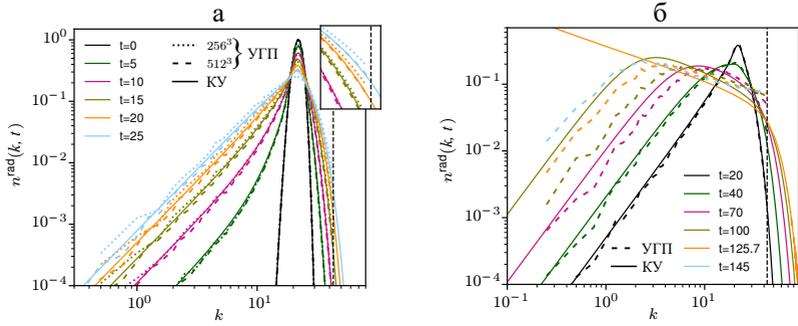


Рис. 10: Эволюция $n^{\text{rad}}(k, t)$ при $t \in [0, 25]$: спектры решений УГП с разрешениям 256^3 и 512^3 и решения КУ при $t = 0, 5, 10, 15, 20, 25$ (а); эволюция $n^{\text{rad}}(k, t)$ при $t \in [0, 100]$: спектры решений УГП с разрешением 512^3 и решения КУ при $t = 20, 40, 70, 100, 125.7, 145$ (решение при $t = 145$ получено только для УГП) (б). Вертикальными пунктирными линиями показан $k_{\text{cut off}}$

С применением точных решений для ФПВ из ¹⁹ и численных решений задачи Коши (1), (22) рассчитаны ФПВ и кумулянты. Показано их высокоточное соответствие с ФПВ и кумулянтами, полученными при решении УГП. Установлено, что ФПВ эволюционируют к экспоненциально убывающим функциям, соответствующим гауссовой статистике, и в большинстве режимов характерное время такой эволюции совпадает с кинетическим временным масштабом T_{kin} ²⁰ (для рассмотренной постановки $T_{kin} \sim 15$).

Основной результат § 4.1 состоит в том, что установлено высокоточное соответствие спектров УГП и решений КУ во временных диапазонах порядка $2T_{kin}$, где значения спектра изменяются примерно в 4 раза, и качественное соответствие в существенно более длительных диапазонах вплоть до неограниченного роста (blow-up) решения КУ, описывающего начало процесса конденсации.

Параграф 4.2 посвящён моделированию прямого каскада энергии и обратного каскада частиц бозе-газа при наличии накачки и диссипации. На основе преобразования Захарова найдены точные стационарные решения КУ:

$$n_{\omega} = C_i |Q_0|^{1/3} \omega^{-7/6}, \quad C_i \approx 7.5774045 \times 10^{-2}, \quad (23)$$

$$n_{\omega} = \tilde{C}_d P_0^{1/3} \omega^{-3/2} \ln^{-1/3}(\omega/\omega_f), \quad \omega \gg \omega_f, \quad \tilde{C}_d \approx 5.26 \times 10^{-2} \quad (24)$$

с постоянными потоками частиц $Q_0 < 0$ и энергии $P_0 > 0$ в обратном и прямом каскадах соответственно. Здесь ω_f – частота накачки. Новизна (23), (24) состоит в выражениях для C_i , \tilde{C}_d и в поправке « $\ln^{-1/3}(\omega/\omega_f)$ ».

¹⁹СНОИ Y., Jo S., KWON Y.-S., NAZARENKO S.V. Nonstationary distributions of wave intensities in wave turbulence // J. of Phys. A. 2017. Vol. 50. No. 35. Art. #355502.

²⁰ T_{kin} – характерное время эволюции решения КУ (время, по прошествии которого значения спектра в какой-либо области частотного диапазона изменяются в два раза).

Далее в § 4.2 показано, что решения задачи Коши для КУ (12) с нулевыми начальными данными устанавливаются к спектрам (23), (24). Отметим, что для обеспечения установления в широком частотном диапазоне потребовалась тонкая настройка параметров накачки и диссипации в правой части (12), а также параметров НМБН.

Для рассмотренной постановки соавторами соискателя по работе [18] рассчитаны спектры УГП. На рис. 11 приведены графики решений КУ и спектров УГП, компенсированных выражениями (24) и (23) после перехода к нормированной волновой переменной $k/k_f = \sqrt{\omega/\omega_f}$. Эти графики близки к единице, что говорит о соответствии точных и приближённых решений.

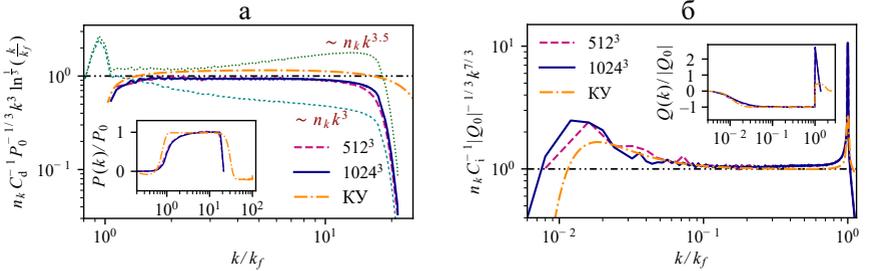


Рис. 11: Компенсированные спектры волнового действия для прямого (а) и обратного (б) каскадов, полученные при численном решении КУ и УГП с разрешениями 512^3 и 1024^3 . На вставке – соответствующие потоки энергии (а) и частиц (б), нормированные на их стационарные значения

На рис. 11, а для прямого каскада построены классические стационарные спектры КЗ ($n_k \sim k^3$) и спектры, обнаруженные в экспериментах работы ²¹ ($n_k \sim k^{3.5}$). Полученное в § 4.2 решение (24) благодаря логарифмической поправке объясняет отклонения экспериментальных и теоретических результатов: в узком диапазоне волновых чисел на частотах, близких к частоте накачки, спектр $k^{-3.5}$ является аппроксимацией (24) (на рис. 11, а видна близость спектра $n_k k^{3.5}$ и полученных решений при $k/k_f \gtrsim 1$).

В § 4.3 дан анализ автомодельных режимов эволюции решений КУ в прямом и обратном каскадах при наличии и отсутствии накачки и диссипации энергии. В частности, показано, что при наличии накачки, увеличивающей энергию системы по закону $E(t) \propto t^{\bar{\lambda}}$, где $\bar{\lambda} = \text{const} \geq 0$, в области $k > k_f$ реализуется прямой каскад энергии, описываемый автомодельным решением 1-го рода по классификации Зельдовича–Райзера–Баренблатта $g(\xi)$:

$$g(\xi) = n^{\text{rad}}(\xi t^{\bar{\alpha}}, t) t^{1/2} \text{ при } \xi = k/t^{\bar{\alpha}}, \bar{\alpha} = 1/6 + \bar{\lambda}/3. \quad (25)$$

При определённых ограничениях на начальные значения спектра (они вы-

²¹NAVON N., GAUNT A.L., SMITH R.P., HADZIBABIC Z. Emergence of a turbulent cascade in a quantum gas // Nature. 2016. Vol. 539. P. 72–75.

водятся из аргумента Эйнштейна о конденсации и закона Рэлея–Джинса²²⁾ вне зависимости от наличия накачки энергии реализуется обратный каскад частиц бозе-газа, описываемый автомодельным решением КУ 2-го рода $f(\eta)$:

$$f(\eta) = n^{\text{rad}}(\eta\hat{\tau}^b, t)\hat{\tau}^{1/2}, \quad \text{где } \eta = k/\hat{\tau}^b \text{ и } \hat{\tau} = t^* - t. \quad (26)$$

Такое решение существует в малой окрестности момента времени t^* и имеет степенную асимптотику $f(\eta) \sim \eta^{-\bar{x}^*}$ при $\eta \rightarrow \infty$, где $\bar{x}^* = 1/(2b)$. Его разрушение при $t = t^*$ означает начало процесса конденсации. Параметр \bar{x}^* и время t^* не могут быть определены с помощью законов сохранения, для их расчёта необходимо решить нелинейную спектральную задачу (см. § 4.4).

В § 4.3 выведены кинетические уравнения, описывающие автомодельные режимы эволюции спектра в прямом и обратном каскадах, и с применением НМБН решены задачи Коши для них. Графики решений при отсутствии накачки представлены на рис. 12. При анализе спектров обратного каскада рассчитаны $\bar{x}^* \approx 0.52$ ²³⁾ и $t^* \approx 89.5$.

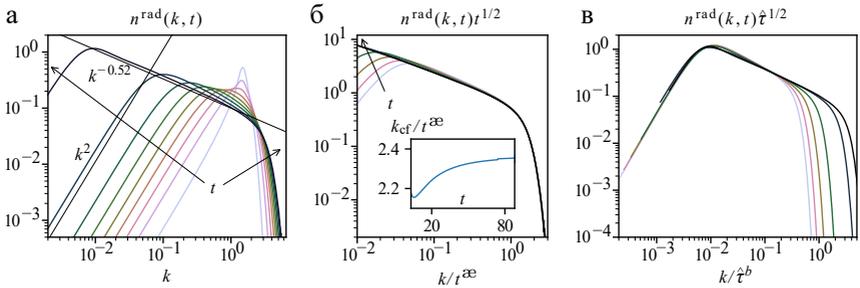


Рис. 12: Численные решения задачи Коши (1), (22): а) спектр $n^{\text{rad}}(k, t)$ при $t = 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 88.5$; б) зависимость $n^{\text{rad}}(k, t)t^{1/2}$ от $k/t^{2\epsilon}$ в прямом каскаде и график движения нормированного волнового фронта $k_{\text{cf}}/t^{2\epsilon}$ на вставке; в) зависимость $n^{\text{rad}}(k, t)\hat{\tau}^{1/2}$ от $k/\hat{\tau}^b$ в обратном каскаде. Графики б) и в) содержат спектры при $t = 80, 82, 84, 86, 88, 88.5$

Из рис. 12, б, в видно, что использование автомодельных переменных (25), (26) приводит к тому, что графики решений совмещаются при наложении, что служит подтверждением реализуемости автомодельных режимов.

Параграф 4.4 посвящён решению нелинейной спектральной задачи для КУ и определению параметров автомодельного спектра 2-го рода, описывающего начало процесса конденсации Бозе–Эйнштейна. Дан обзор результатов, полученных для таких спектров ранее, как в случае физических систем,

²²⁾ CONNAUGHTON C., JOSSERAND CH., PICOZZI A., POMEAU Y., RICA S. Condensation of classical nonlinear waves // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95. No. 26. Art. #263901.

²³⁾ Указанное значение \bar{x}^* является достаточно грубым приближением точной величины сверху (на рис. 12, а видно, что при $t \rightarrow t^*$ наклон спектра плавно уменьшается).

описываемых НУШ, так и в случае других систем гидродинамического типа. Показано, что в этих результатах имеется ряд неточностей, в связи с чем требуется провести их численную верификацию с учётом свойств и особенностей решения и с контролем погрешности.

Далее приведено кинетическое уравнение, описывающее автомодельный спектр вида (26) (вместо k использована переменная $\omega = k^2$, вместо $n^{\text{rad}}(k, t) - n_\omega(t) = n^{\text{rad}}(k, t)/(4\pi k^2)$):

$$xf + \eta(df/d\eta) = (A(f, \eta) + fB(f, \eta))/b, \quad (27)$$

$$A(f, \eta) = \int_{\Delta_\eta} S \cdot (f_2 f_3 f_c) d\eta_2 d\eta_3, \quad B(f, \eta) = \int_{\Delta_\eta} S \cdot (f_2 f_3 - f_3 f_c - f_2 f_c) d\eta_2 d\eta_3,$$

$$S = S(\eta, \eta_2, \eta_3) = (4\pi^3/\sqrt{\eta}) \min\{\sqrt{\eta}, \sqrt{\eta_2}, \sqrt{\eta_2 + \eta_3 - \eta}, \sqrt{\eta_3}\},$$

$f_2 = f(\eta_2)$, $f_3 = f(\eta_3)$, $f_c = f(\eta_2 + \eta_3 - \eta)$, $\Delta_\eta = \{(\eta_2, \eta_3) : \eta_2 > 0, \eta_3 > 0, \eta_2 + \eta_3 > \eta\}$ – область интегрирования (она совпадает с областью, отмеченной серым цветом на рис. 1, а).

Для (27) обоснованы краевые условия: при малых η функция $f(\eta)$ является постоянной, при больших η – степенной, $f(\eta) \sim C\eta^{-x}$. В связи с этим для (27) на отрезке $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$ ($0 < \eta_{\min} \ll 1 \ll \eta_{\max} < \infty$) поставлена краевая задача:

$$\left. \frac{df}{d\eta} \right|_{\eta=\eta_{\min}} = 0, \quad xf + \eta \left. \frac{df}{d\eta} \right|_{\eta=\eta_{\max}} = 0. \quad (28)$$

Постановка нелинейной спектральной задачи для проведения вычислений состоит в том, чтобы найти такие значения параметров x , η_{\min} , η_{\max} , при которых задача (27), (28) имеет нетривиальное, положительное решение.

В отличие от задачи, рассмотренной в § 2.2, область интегрирования в выражениях $A(f, \eta)$, $B(f, \eta)$ является неограниченной. В связи с этим метод расчёта интеграла столкновений в НМБН был дополнен и протестирован. Далее в § 4.4 на основе метода установления и метода коллокаций выполнены линеаризация (27), (28) и сведение нелинейной спектральной задачи к поиску собственных чисел и собственных векторов матриц, возникающих на итерациях метода установления. При этом использованы полиномиальные приближения функций и их производных из гл. 1.

В результате найдены несколько приближённых решений нелинейной спектральной задачи. Для оценки их погрешности введена функция относительной невязки $R_r(\eta)$, показывающая величину отклонений левой и правой частей (27) в процентах после подстановки в это уравнение приближенного решения. На рис. 13 показаны два приближённых решения с наименьшими значениями невязки и соответствующие значения параметра $x = x^*$. Для спектра 1) – $x^* \approx 1.239$, максимум невязки – $\|R_r\| \approx 6.11\%$, для спектра 2)

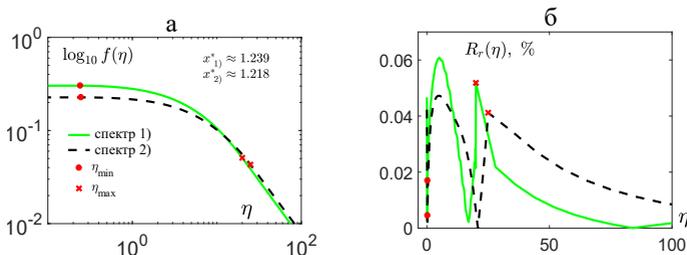


Рис. 13: Два наиболее точных решения нелинейной спектральной задачи (а) и графики относительных невязок (б)

– $x^* \approx 1.218$, $\|R_r\| \approx 4.69\%$. Отметим, что при переходе к переменной k и функции $n^{\text{rad}}(k, t)$ нужно выполнить преобразование: $\bar{x}^* = 2(x^* - 1)$.

В заключении диссертации подведены итоги работы и сделаны комментарии о возможных направлениях развития полученных результатов.

Приложение I содержит формулировки основных понятий и теоретических результатов, полученных ранее другими авторами, на которые опирается диссертационное исследование. Приведены ссылки на источники, содержащие доказательства этих результатов.

В приложении II приведены доказательства теорем и лемм, сформулированных в тексте диссертации.

Приложение III содержит формулы элементов матриц, аппроксимирующих операторы дифференцирования в задачах с различными типами краевых условий. Здесь же приведены графики зависимостей норм и чисел обусловленности этих матриц, а также матриц, возникающих в их спектральных разложениях, от размера матриц (от числа узлов коллокации) и выписаны значения собственных чисел, найденные с гарантией точности.

В приложении IV содержится информация для идентификации параметров обобщённой мезоскопической модели течения НВУПЖ, описанной в гл. 3. Приведены ссылки на литературу, содержащую необходимые экспериментальные данные.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

В рецензируемых журналах, рекомендуемых ВАК:

- [1] Семисалов Б.В., Медведев С.Б., Назаренко С.В., Федорук М.П. Алгоритм решения четырёхволнового кинетического уравнения в задачах волновой турбулентности // ЖВМиМФ. 2024. Т. 64, № 2. С. 362–384.
- [2] Семисалов Б.В. О точных решениях паузейлевского типа для течений вязкоупругой полимерной жидкости в цилиндрическом канале // ПМТФ. 2023. Т. 64, № 4. С. 139–151.

- [3] Семисалов Б.В. Об одном сценарии перехода к турбулентности при течении полимерной жидкости в цилиндрическом канале // *Мат. моделирование*. 2023. Т. 35, № 11. С. 62–78.
- [4] Блохин А.М., Семисалов Б.В. Нахождение стационарных течений паузейлевского типа для несжимаемой полимерной жидкости методом установления // *Журн. выч. мат. и мат. физ.* 2022. Т.62, № 2. С. 305–319.
- [5] Семисалов Б. В. Об одном подходе к численному решению задач Дирихле произвольной размерности // *Сиб. журн. выч. мат.* 2022. Т. 25, № 1. С. 77–95.
- [6] Блохин А.М., Семисалов Б.В. Расчёт стационарных неизотермических МГД течений полимерной жидкости в каналах с внутренними нагревательными элементами // *Сиб. журн. индустр. мат.* 2020. Т. 23, №2. С. 17–40.
- [7] Блохин А.М., Круглова Е.А., Семисалов Б.В. Оценка двух компонент погрешности численного решения задачи о неизотермическом течении полимерных растворов между двумя соосными цилиндрами // *Журн. выч. мат. и мат. физ.* 2018. Т. 58, № 7. С. 1099–1115.
- [8] Блохин А.М., Круглова Е.А., Семисалов Б.В. Стационарные неизотермические течения несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости между двумя соосными цилиндрами // *Журн. выч. мат. и мат. физ.* 2017. Т. 57, № 7. С. 1184–1197.
- [9] Семисалов Б. В. Быстрый нелокальный алгоритм решения краевых задач Неймана–Дирихле с контролем погрешности // *Выч. мет. и программирование*. 2016. Т. 17, № 4. С. 500–522.
- [10] Блохин А.М., Семисалов Б.В., Шевченко А.С. Стационарные решения уравнений, описывающих неизотермические течения несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости // *Мат. моделирование*. 2016. Т. 28, №10. С. 3–22.
- [11] Семисалов Б. В. Нелокальный алгоритм поиска решений уравнения Пуассона и его приложения // *Журн. выч. мат. и мат. физ.* 2014. Т. 54, № 7. С. 1110–1135.
- [12] Блохин А.М., Семисалов Б.В. Стационарное течение несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости в канале с эллиптическим сечением // *Сиб. журн. индустр. мат.* 2014. Т. 17, № 4(60). С. 38–47.

В журналах, индексируемых Web of Science или Scopus:

- [13] Семисалов Б.В. Применение дробно-рациональных интерполяций для решения краевых задач с особенностями // *Вестн. ЮУрГУ ММП*. 2022. Т. 15, № 4. С. 5–19.
- [14] Семисалов Б.В. Разработка и анализ быстрого псевдоспектрального метода решения нелинейных задач Дирихле // *Вестн. ЮУрГУ ММП*. 2018. Т. 11, № 2. С. 123–138.

В зарубежных журналах:

- [15] SEMISALOV B.V., GREBENEV V.N., MEDVEDEV S.B., NAZARENKO S.V. Numerical analysis of a self-similar turbulent flow in Bose–Einstein condensates // CNSNS. 2021. Vol. 102. Art. #105903.
- [16] SEMISALOV B.V., BELYAEV V.A., BRYNDIN L.S., GORYNIN A. G., BLOKHIN A.M., GOLUSHKO S.K., SHAPEEV V. P. Verified simulation of the stationary polymer fluid flows in the channel with elliptical cross-section // Applied Mathematics and Computation. 2022. Vol. 430. Art. #127294. P. 1–25.
- [17] ZHU Y., SEMISALOV B.V., KRSTULOVIC G., NAZARENKO S.V. Testing wave turbulence theory for the Gross–Pitaevskii system // Phys. Rev. E. 2022. Vol. 106, No. 1. Art. #014205.
- [18] ZHU Y., SEMISALOV B.V., KRSTULOVIC G., NAZARENKO S.V. Direct and inverse cascades in turbulent Bose–Einstein condensates // Phys. Rev. Lett. 2023. Vol. 130, Is. 13. Art. #133001.
- [19] ZHU Y., SEMISALOV B.V., KRSTULOVIC G., NAZARENKO S.V. Self-similar evolution of wave turbulence in Gross–Pitaevskii system // Phys. Rev. E. 2023. Vol. 108. No. 6. Art. #064207.

Свидетельства о регистрации комплексов программ для ЭВМ:

- [20] Свидетельство о государственной регистрации № 2015615527 от 20 мая 2015 г. Программа поиска решений краевых задач для уравнений в частных производных с высокой точностью и малыми вычислительными затратами «Нелокальный метод без насыщения». Семисалов Б. В.
- [21] Свидетельство о государственной регистрации № 2018664836 от 22 ноября 2018 г. Программа для расчёта неизотермического течения вязкоупругой полимерной жидкости между двумя соосными цилиндрами с контролем погрешности. Семисалов Б.В., Круглова Е.А.
- [22] Свидетельство о государственной регистрации № 2023687768 от 18 декабря 2023 г. Программа для решения четырёхволновых кинетических уравнений, описывающих однородное изотропное взаимодействие волн в нелинейных физических системах «4WaveKESolver». Семисалов Б.В.