

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт математики им. С. Л. Соболева Сибирского отделения  
Российской академии наук

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**

1.2.2. Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

**ДИССЕРТАЦИЯ**

на соискание степени

доктора физико-математических наук

Научный консультант:  
доктор физико-математических наук,  
доцент Ткачёв Дмитрий Леонидович

Новосибирск – 2024

# Оглавление

<b>Список обозначений и сокращений</b>	<b>6</b>
<b>Введение</b>	<b>8</b>
§ 0.1 О рассмотренных проблемах физики и постановке математических задач . . . . .	11
§ 0.2 Об особенностях решений исследуемых задач . . . . .	25
§ 0.3 Об учёте свойств гладкости решения и его особенностей для минимизации вычислительных затрат . . . . .	30
§ 0.4 Цели, задачи и результаты диссертационного исследования. Структура работы . . . . .	40
<b>Глава 1 Методы приближения функций, их производных и интегралов в задачах с особенностями</b>	<b>47</b>
§ 1.1 Приближения без насыщения для решения краевых задач . . . . .	48
1.1.1 Приближения функций на отрезке . . . . .	51
1.1.2 Приближение периодических функций . . . . .	53
1.1.3 Приближение функций нескольких переменных . . . . .	55
§ 1.2 Дробно-рациональные интерполяции. Барицентрическая формула и ее модификации . . . . .	61
§ 1.3 Матричные аппроксимации операторов дифференцирования и интегрирования . . . . .	68
1.3.1 Аппроксимации производных функций одной переменной . . . . .	69
1.3.2 Анализ спектральных разложений и обусловленностей матриц, аппроксимирующих операторы дифференцирования . . . . .	74
1.3.3 Аппроксимация оператора интегрирования . . . . .	83
1.3.4 Аппроксимация операторов в задачах размерности 2 и выше . . . . .	84
§ 1.4 Квадратурные формулы для функций с особенностями у границы области интегрирования . . . . .	88
<b>Глава 2 Нелокальный метод без насыщения для решения краевых и начально-краевых задач</b>	<b>96</b>
§ 2.1 Итерационный алгоритм решения нелинейных задач с особенностями . . . . .	98

2.1.1	Алгоритм решения краевых задач для уравнений эллиптического типа . . . . .	98
2.1.2	Методы решения задач Коши и начально-краевых задач для параболических уравнений . . . . .	105
2.1.3	Локализация особой точки решения . . . . .	108
§ 2.2	Алгоритм решения задачи Коши для четырёхволнового кинетического уравнения . . . . .	110
2.2.1	Расчёт интеграла столкновений . . . . .	112
2.2.2	Приближение спектра . . . . .	119
2.2.3	Реализация итераций по временной переменной . . . . .	121
§ 2.3	Численный анализ насыщенности метода решения краевых задач	123
§ 2.4	Апостериорный анализ погрешности и численные эксперименты .	126
2.4.1	Оценка вычислительной погрешности . . . . .	126
2.4.2	Оценка погрешности метода приближения . . . . .	130
§ 2.5	Решение задачи с особенностью . . . . .	133
§ 2.6	Сравнение результатов предложенного алгоритма и других методов в модельной задаче о течении полимерной жидкости . . . . .	136
2.6.1	Постановка тестовой задачи . . . . .	137
2.6.2	Методы решения тестовой задачи . . . . .	140
2.6.3	Результаты расчётов. Сравнение эффективности методов . . .	142
§ 2.7	Разработка метода спектральных элементов для решения задач в областях сложных форм . . . . .	146
2.7.1	Численные эксперименты . . . . .	151
§ 2.8	Некоторые замечания о реализации разработанных алгоритмов . .	155
<b>Глава 3 Моделирование пуазейлевских течений полимерной жидкости</b>		<b>159</b>
§ 3.1	Обобщённая мезоскопическая модель . . . . .	159
3.1.1	Постановка задачи о течении типа Пуазейля . . . . .	164
§ 3.2	Стационарные течения типа Пуазейля . . . . .	167
3.2.1	Разрешающая система уравнений . . . . .	167
3.2.2	Анализ множества решений уравнений модели . . . . .	169
3.2.3	Численный анализ течения в канале с прямоугольным сечением	175

3.2.4	Течение полимерной жидкости в канале с эллиптическим сечением . . . . .	179
3.2.5	Течение полимерной жидкости между двумя цилиндрами . . . . .	186
§ 3.3	Верификация полученных стационарных течений в канале с эллиптическим сечением . . . . .	189
§ 3.4	Нестационарные течения типа Пуазейля и их установление . . . . .	198
3.4.1	Линеаризация уравнений . . . . .	199
3.4.2	Численный анализ установления нестационарных течений . . . . .	201
§ 3.5	Точные решения для течений в цилиндрическом канале, их существование и устойчивость . . . . .	207
3.5.1	Осесимметричное течение . . . . .	211
3.5.2	Точные стационарные решения . . . . .	214
3.5.3	Численный анализ установления нестационарных решений . . . . .	220
3.5.4	Обсуждение полученных результатов . . . . .	225
§ 3.6	Численный анализ неизотермических МГД течений между двумя соосными цилиндрами с контролем погрешности . . . . .	227
3.6.1	Анализ погрешности полученных решений . . . . .	228
3.6.2	Численный анализ особенностей течений . . . . .	234
<b>Глава 4</b>	<b>Волновая турбулентность в физических системах, описываемых нелинейным уравнением Шрёдингера</b>	<b>237</b>
§ 4.1	Верификация теории волновой турбулентности . . . . .	237
4.1.1	Волновая турбулентность и статистика высокого порядка . . . . .	239
4.1.2	Построение вычислительных моделей для УГП и КУ . . . . .	242
4.1.3	Сравнение кратковременной эволюции спектров УГП и КУ . . . . .	245
4.1.4	Сравнение долговременной эволюции спектров УГП и КУ . . . . .	248
4.1.5	Статистика низкого и высокого порядков . . . . .	251
4.1.6	Обсуждение полученных результатов . . . . .	255
§ 4.2	Каскадные процессы и точные стационарные решения кинетического уравнения . . . . .	257
4.2.1	Вывод стационарных решений . . . . .	258
4.2.2	Моделирование обратного и прямого каскадов с помощью разработанного алгоритма . . . . .	263

4.2.3	Сравнение полученных решений со спектрами уравнения Гросса– Питаевского и их обсуждение . . . . .	267
§ 4.3	Автомодельная эволюция спектров . . . . .	271
4.3.1	Кинетическое описание автомодельных спектров . . . . .	272
4.3.2	Численный анализ автомодельных спектров . . . . .	277
§ 4.4	Неклассический степенной спектр и конденсация Бозе–Эйнштейна	284
4.4.1	Постановка нелинейной спектральной задачи для кинетиче- ского уравнения . . . . .	286
4.4.2	Некоторые замечания о расчёте интеграла столкновений . . .	289
4.4.3	Алгоритм решения нелинейной спектральной задачи и кон- троль погрешности . . . . .	294
4.4.4	Поиск неклассических спектров и обсуждение результатов . .	301
	<b>Заключение</b>	<b>305</b>
	<b>Литература</b>	<b>308</b>
	<b>Приложение I Определения и теоремы, используемые в дис- сертации</b>	<b>332</b>
§ I.1	Прямые теоремы теории приближений . . . . .	332
§ I.2	Обратные теоремы теории приближений . . . . .	333
§ I.3	Константы Лебега . . . . .	334
§ I.4	Методы без насыщения . . . . .	335
§ I.5	Оценки погрешности некоторых приближений . . . . .	336
§ I.6	Оценки погрешности некоторых методов интегрирования . . . . .	338
	<b>Приложение II Доказательства лемм и теорем, сформулиро- ванных в диссертации</b>	<b>341</b>
	<b>Приложение III Анализ матриц, аппроксимирующих операто- ры дифференцирования</b>	<b>349</b>
	<b>Приложение IV Идентификация параметров обобщённой ме- зоскопической модели</b>	<b>361</b>

# Список обозначений и сокращений

$\|\cdot\| = \|\cdot\|_\infty$  – супремум-норма непрерывных функций;

$\|\cdot\|_p$  – норма в пространстве  $L_p$ ;

$W_p^r(M, I) = \text{Cl}\{f \in C^{r-1}(I) : f^{(r)} \in L_p(I), \|f^{(r)}\|_p \leq M\}$  – замыкание в пространстве  $L_p$  класса функций, заданных на отрезке  $I$ , имеющих  $r - 1$  непрерывную производную и  $r$ -ю производную, ограниченную в  $L_p$  константой  $M$ ;  $W_\infty^r(M, I) = \text{Cl}\{f \in C^r(I) : \|f^{(r)}\| \leq M\}$ ;

$W_p^r(M) = \text{Cl}\{f \in C^{r-1}(S) : f^{(r)} \in L_p(S), \|f^{(r)}\|_p \leq M\}$  – замыкание в  $L_p$  класса периодических на окружности  $S$  функций, имеющих  $r - 1$  непрерывную производную и  $r$ -ю производную, ограниченную в  $L_p$  константой  $M$ ;  $W_\infty^r(M) = \text{Cl}\{f \in C^r(S) : \|f^{(r)}\| \leq M\}$ ;

$H_M^{\tilde{\alpha}}$  – класс Гёльдера с показателем  $0 < \tilde{\alpha} \leq 1$ , такие функции  $f \in C(D)$ ,  $D \subset \mathbb{R}^d$ ,  $d = 1, 2, \dots$ , что  $\forall x, y \in D \exists M \geq 0: \|f(x) - f(y)\| \leq M\|x - y\|^{\tilde{\alpha}}$ ;

$\text{Lip}_M(I)$  – класс функций, заданных на отрезке  $I$ , удовлетворяющих условию Липшица с константой  $M$ ;

$\omega(u; q) = \sup_{t \in [a, b-h], h \in [0, q]} |u(t+h) - u(t)|$  – 1-й модуль непрерывности функции  $u(x) \in C[a, b]$ ;

$\mathfrak{E}_\rho$  – эллипс Бернштейна;

$x_j^{\text{ch}}, y_j^{\text{ch}}, z_j^{\text{ch}}$  – нули многочлена Чебышёва первого рода степени  $N$ ,  $j = \overline{1, N}$ ;

$\tilde{C}^r$  – пространство  $2\pi$ -периодических функций, имеющих  $r$  непрерывных производных;

$T_N(x)$  – полином Чебышёва первого рода степени  $N$ ;

$P_N^b(u) = P_N^b(u, x)$  – наилучшее приближение функции  $u(x)$  полиномом степени не выше  $N$ ,  
 $E_N^b(u) = \|u(x) - P_N^b(u)\|$ ;

$S_N(u)$  – частичная сумма ряда Фурье с тригонометрическими мономерами степени  $\leq N$ ;

$\pi_N(u)$  – частичная сумма ряда Фурье–Чебышёва, содержащая  $N + 1$  слагаемое,  $E_N^T(u) = \|u - \pi_N(u)\|$ ;

$\mathcal{M}_{2n}^+(-1, 1) = \{f \in C^{2n}(-1, 1) : f^{(j)}(x) \geq 0 \forall x \in (-1, 1), j = \overline{0, 2n}\}$ ;

$\mathcal{M}_{2n}^-(-1, 1) = \{f \in C^{2n}(-1, 1) : f^{(j)}(x) \leq 0 \forall x \in (-1, 1), j = \overline{0, 2n}\}$ ;

ЭВМ – электронная вычислительная машина;

ОДУ – обыкновенное дифференциальное уравнение;

УЧП – уравнение с частными производными;

МКР – метод конечных разностей;

МКЭ – метод конечных элементов;

МКНК – метод коллокаций и наименьших квадратов;

СЛАУ – система линейных алгебраических уравнений;

ДРБИ – дробно-рациональная барицентрическая интерполяция;

ДРФ – дробно-рациональная функция;

НМБН – нелокальный метод без насыщения;

НАБН – нелокальный алгоритм без насыщения;

квадратурная формула СС – квадратурная формула Clenshaw–Curtis;

МГД течения – магнитогидродинамические течения;

КФГ – квадратурная формула Гаусса;

НУШ – нелинейное уравнение Шрёдингера;

ВТ – волновая турбулентность (слабая турбулентность);

ТВТ – теория волновой турбулентности;

УГП – уравнение Гросса–Питаевского;

КУ – кинетическое уравнение;

спектр (решение) КЗ – спектр (решение) Колмогорова–Захарова;

КБЭ – конденсат Бозе–Эйнштейна;

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

ПСФА – предположение о случайных фазах и амплитудах – положение ТВТ о том, что амплитуды и фазы взаимодействующих волн являются независимыми случайными величинами, и фазы равномерно распределены на окружности в комплексной плоскости;

ФПВ – функция плотности вероятности для интенсивности волн;

ГС – гауссова статистика;

НД – накачка и диссипация.

В тексте диссертации *курсивом* выделены важные понятия и фрагменты, на которые следует обратить внимание, **полужирным** отмечены заголовки и подзаголовки, а также векторные величины. Символ «◁» в приложении II означает завершение доказательства.

# Введение

Общий принцип предсказательного математического моделирования состоит в приближённом описании объектов и явлений окружающей нас среды посредством математических выражений – функций, операторов, уравнений и т. п. Качество такого приближённого описания определяется множеством специфических свойств и особенностей рассматриваемых объектов и явлений, которые удаётся учесть и выразить «языком» математики. Дальнейшая работа с построенной таким образом математической моделью должна основываться *на принципе адекватности*, т. е. на целенаправленном учёте и наследовании указанных свойств и особенностей, как при разработке методов анализа имеющихся уравнений, так и при создании вычислительной модели для поиска достоверного и высокоточного численного ответа [1] <sup>1</sup>.

Практика построения и применения математических моделей нелинейных гидро- и газодинамических систем свидетельствует об исключительной важности вопросов существования устойчивых стационарных режимов течения, актуальности исследования их свойств, а также процессов установления систем к этим режимам и разрушения этих режимов с переходом к хаотичным и турбулентным течениям. Для численного моделирования таких процессов принципиальной является информация о классе гладкости, в котором необходимо искать соответствующие решения, и об эволюции их особых точек. Разработка адекватных вычислительных моделей предполагает применение этой информации на этапах создания методов приближения решения и конструирования алгоритмов поиска этих приближений на ЭВМ. Такой подход приводит к кардинальному снижению вычислительных затрат и позволяет получить результат, соответствующий физике исследуемого процесса.

Стационарные режимы течения жидкостей и газов, как правило, описываются нелинейными *УЧП эллиптического типа*. Априорные оценки для уравнений и систем такого типа (но с существенными ограничениями на их коэффициенты и правые части, тип нелинейности задачи и т. п. [2, 3])

---

<sup>1</sup>В указанной работе для реализации принципа адекватности построены вычислительные схемы, удовлетворяющие разностным аналогам априорных оценок на нормы решений рассмотренных дифференциальных задач.



свидетельствуют, что их решения зачастую обладают существенным запасом гладкости <sup>2</sup>. Отметим также, что свойство гладкости (регулярности) тех или иных полей или распределений характерно для большинства моделей физических систем, в которых используются континуализация и/или осреднение. В частности, такие операции применяются в рамках *теории волновой турбулентности*, *ТВТ* (речь о которой пойдёт ниже), что априори обеспечивает высокую гладкость турбулентных спектров. В работах К.И. Бабенко [5, 6] предложено использовать априорную информацию о гладкости при выборе способа аппроксимации неизвестной функции, а также её производных и интегралов. Здесь же сформулирована идея о применении приближений на основе рядов Фурье и полиномов Чебышёва для построения *алгоритмов без насыщения*, автоматически учитывающих запас гладкости искомого решения. Для нескольких таких алгоритмов в случае линейных краевых задач получены *аналоги шаудеровских оценок*, позволяющие заключить, что погрешность численных решений с точностью до медленно растущих множителей (*констант Лебега*) удовлетворяет оценкам погрешности наилучших полиномиальных приближений, т. е. строго связана с гладкостью искомых функций: чем выше гладкость, тем быстрее убывает погрешность. Однако создать метод без насыщения и получить для него аналогичные оценки в нелинейных задачах, а также в задачах размерности 2 и выше со сложной геометрией до сих пор не удавалось. Основную проблему при этом представляет сочетание алгоритмов без насыщения с итерационными методами и их обобщение для поиска решений, зависящих от нескольких переменных.

Идеи методов без насыщения при решении краевых и спектральных задач развиты в работах учеников К.И. Бабенко, среди них С.Д. Алгазин, В.П. Варин, В.Ю. Петрович, В.А. Стебунов и другие [7–10]. Ряд результатов, связанных с обоснованием таких методов, приведён в работах О.В. Локуциевского, М.Б. Гаврикова, В.Н. Белых, [11, 12]. Строгий анализ насыщаемости

---

<sup>2</sup>Систематическое исследование гладкости и аналитичности решений уравнений эллиптического типа начато ещё в работах Д. Гильберта: к этому вопросу непосредственное отношение имеет проблема № 19, сформулированная им в 1900 г. на II Международном конгрессе математиков в Париже. Результаты С.Н. Бернштейна, С.А. Христиановича, Т. Радо, Э. Хопфа, Р. Куранта, Г. Леви, М.-Дж. Жевре, И.Г. Петровского позволили существенно продвинуться в анализе указанной проблемы, см. обзор в [4, § 4.4].

метода делается с применением теории поперечников (см. комментарии в начале гл. 1). Для решения задач зачатую используется теория потенциалов, позволяющая свести двумерные и осесимметричные трёхмерные задачи к интегральным уравнениям Фредгольма 2-го рода, см. [13–15], с последующей *ненасыщаемой дискретизацией* оператора интегрирования. Преимущество такого подхода состоит в понижении размерности исходной задачи и хороших спектральных свойствах интегральных операторов <sup>3</sup>, недостатки – в особенностях интегральных ядер и ограниченной сфере применимости (большинство формул и оценок получены только для классических линейных задач). Отметим также и другой подход к реализации методов без насыщения, основанный на дискретизации дифференциальных операторов с учётом граничных условий [8, 17], близкий к методам, изначально предложенным К.И. Бабенко, и к методам, развитым в диссертации.

Заметим однако, что при решении нелинейных задач близость по точности алгоритмов без насыщения к наилучшим приближениям в классе полиномов не является панацеей. Как показано в диссертации, потерю устойчивости Пуазейлевских течений вязкоупругой жидкости и разрушение автомоделных решений для турбулентных спектров можно связать с движением особых точек аналитических продолжений соответствующих решений в комплексной плоскости и с их выходом в область задачи. Аппроксимационные качества полиномиальных приближений (даже наилучших) в таких и многих других приложениях оказываются недостаточными (см. эксперименты из § 1.2 и рис. 1.3). Необходимо использовать другие конечномерные пространства и методы приближения решения, позволяющие в том числе локализовать особые точки и адаптировать к ним алгоритм. Для этого в диссертации использованы *дробно-рациональные приближения* [18, ch. 5, 22], [19], [20], построенные на тех же принципах, что и методы без насыщения – близость к приближению, обеспечивающему минимум максимальных отклонений от значений функции. Предложены обобщения этих приближений для многомерного случая и разработаны их комбинации с *итерационным методом установления* для решения нелинейных задач. Таким образом, методология конструиро-

---

<sup>3</sup>Для ряда задач показана компактность оператора, непрерывность его собственных функций и принадлежность ненулевых точек его спектра интервалу  $(-1, 1]$ , [14, 16].

вания адекватных вычислительных моделей, предложенная в диссертации, в значительной степени расширяет сферу применимости алгоритмов без насыщения, сохраняя при этом тонкую связь гладкости искомых решений с характером убывания функционала погрешности. Это позволяет применить аппарат теории приближений для контроля точности найденных решений и анализа их особенностей.

## **§ 0.1. О рассмотренных проблемах физики и постановке математических задач**

Предложенная методология применяется в диссертации для исследования *течений пуазейлевского типа несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости*, процессов установления и разрушения таких течений, а также для анализа *слаботурбулентных процессов* в физических системах, описываемых нелинейным уравнением Шрёдингера, НУШ. Несмотря на существенное отличие физических принципов, заложенных в основу исследуемых моделей, проблемы, возникающие при их математическом анализе являются общими: неизвестные функции, обладая высокой гладкостью внутри области задачи, имеют особенности в её малой окрестности или на границе. Информация о положении этих особенностей и их типе является принципиально важной для исследования существования решений и их свойств, а также для создания быстрых и высокоточных численных методов.

**Моделирование течений полимерной жидкости.** Проблема достоверного и достаточно точного описания течений растворов и расплавов полимеров имеет прямое отношение как к созданию новых материалов с заданными реологическими свойствами, так и к совершенствованию технологий экструзии, печати и напыления с использованием таких материалов [21–25]. Одним из перспективных направлений здесь является развитие методов печати электронных устройств на полимерной основе, размещённых на гибкой подложке: экранов, сенсорных панелей, мобильных устройств, вычислительной техники и т. п. Созданное таким образом электронное изделие большой площади может сворачиваться в компактное устройство.

Проблема, возникающая при создании новых материалов и технологий

в этих приложениях, связана с реализацией устойчивых течений в каналах печатающих устройств и экструдеров и с управлением такими течениями. Переход к хаотичным и турбулентным режимам течения нежелателен, поскольку это ведёт к неоднородностям и другим дефектам в изделии и не позволяет контролировать производственный процесс. Для развития технологий необходимо иметь критерии разрушения устойчивых ламинарных течений. Получение таких критериев существенно затруднено, поскольку *процесс ламинарно-турбулентного перехода* зависит сложным образом как от реологии полимерной жидкости, так и от технологических условий (размеров канала, температуры, давления и т. д.). В связи с этим принципиальной проблемой является разработка математического аппарата, который позволил бы получить детальное описание такого перехода.

Ситуация значительно осложняется тем, что течения вязкоупругих растворов и расплавов полимеров качественно отличаются от течений классических ньютоновских жидкостей. В частности, они могут разрушаться (терять устойчивость) практически при сколь угодно малых значениях числа Рейнольдса,  $Re$ . Такой ламинарно-турбулентный переход, связанный с упругими свойствами полимеров (*elastic turbulence*), как правило, наблюдается при наличии изогнутых линий тока (как, например, в течении Тейлора–Куэтта) и объясняется действием растягивающей нагрузки, вызванной центробежной силой [26]. Причины же разрушения течения полимерной жидкости пуазейлевского типа с прямыми линиями тока при малых и умеренных значениях  $Re$  (по этому поводу см. обзор экспериментальных работ в [27]) не установлены до сих пор. Поиск механизма, запускающего процессы разрушения, как правило, ведётся на основе *моделей Максвелла и Олдройда*, см. [28–30] и обзор в [31]. Однако, в целом, большинство исследователей констатируют отсутствие теории, обеспечивающей полное понимание указанных процессов.

Отметим, что при реализации устойчивых ламинарных течений управление потоками полимерной жидкости в технологиях экструзии, печати и напыления также является нетривиальной задачей. Сложное вязкоупругое поведение полимеров, включающее эффекты анизотропии, релаксации, и влияние микроструктуры на макроскопические характеристики течения, приводит в свою очередь к сложным реологическим соотношениям. Для учёта темпе-

ратурных и электромагнитных воздействий, имеющих место в *технологиях термоструйной и пьезоэлектрической печати*, требуется дальнейшее обобщение этих соотношений.

Для создания модели, учитывающей указанные эффекты, можно использовать один из двух классических подходов к описанию динамики полимерной жидкости – *феноменологический либо микроструктурный*. Достаточно полный обзор феноменологических моделей можно найти в [32] (некоторые актуальные задачи и методы их численного решения для таких моделей обсуждаются в [33]). Они основаны на представлении о том, что полимерная жидкость является неньютоновской жидкостью, как правило, со степенным законом зависимости компонент тензора напряжений  $\sigma_{ij}$  от компонент тензора скоростей деформации  $k_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ , где  $u_1, u_2, u_3$  – компоненты вектора скорости  $\mathbf{u}$ , записанного в декартовой системе координат  $(x_1, x_2, x_3)$ . Иначе говоря, в отличие от классических соотношений

$$\sigma_{ij} = \eta \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad i \neq j; \quad \sigma_{ii} = 2\eta \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad (0.1)$$

имеющих место для несжимаемой ньютоновской жидкости с динамической вязкостью  $\eta$ , в рамках феноменологических моделей для сдвиговых напряжений записываются соотношения вида

$$\sigma_{ij} = \sigma_0 + K_0 \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^{\gamma_0}, \quad i \neq j, \quad (0.2)$$

где значения  $\sigma_0, K_0, \gamma_0 > 0$  определяются по результатам механических испытаний с жидкостью в реометре. При этом выделяют псевдопластические ( $\gamma_0 < 1, \sigma_0 = 0$ ), дилатантные ( $\gamma_0 > 1, \sigma_0 = 0$ ) вязкопластические ( $\gamma_0 < 1, \sigma_0 \neq 0$ ) и бингамовские ( $\gamma_0 = 1, \sigma_0 \neq 0$ ) пластики. Уравнение движения таких жидкостей в случае постоянной плотности  $\rho$  имеет вид

$$\rho(d\mathbf{u}/dt) = \rho\mathbf{g} + \text{div}\tilde{\sigma}_{ij}, \quad d\mathbf{u}/dt = \partial\mathbf{u}/\partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}, \quad (0.3)$$

где  $t$  – время,  $\mathbf{g}$  – ускорение свободного падения,  $\tilde{\sigma}_{ij} = -p_0\delta_{ij} + \sigma_{ij}$ ,  $p_0$  – давление,  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера,  $\text{div}\tilde{\sigma}_{ij}$  – вектор, компоненты которого являются дивергенциями столбцов  $\tilde{\sigma}_{ij}$ . В неизотермическом случае в (0.2) полагают, что  $K_0$  экспоненциально зависит от температуры (закон Аррениуса) [34].

Однако на основе значительного количества экспериментов в [35, 36] отмечено, что течения высококонцентрированных растворов и расплавов полимеров демонстрируют существенно анизотропное поведение. Для их описания требуются реологические соотношения, устанавливающие связь между кинематическими характеристиками потока и внутренними термодинамическими параметрами, учитывающими молекулярную структуру полимера, неоднородность и анизотропию течения. Такие соотношения выводятся на основе принципов статистической физики и микроструктурных моделей.

Пусть молекула полимера состоит из  $(S + 1)$ -й частицы,  $\boldsymbol{\rho}_s = (\rho_s^1, \rho_s^2, \rho_s^3)$  – координата, ассоциированная с  $s$ -й частицей массы  $m$ ,  $s = \overline{0, S}$ . Тогда для описания динамики частицы с учётом броуновского движения можно использовать уравнение Ланжевена:

$$m(d^2\boldsymbol{\rho}_s/dt^2) = -\mathbf{F}_R(\mathbf{v}_s) + \mathbf{F}_I(\boldsymbol{\rho}_s) + \mathbf{f}_s(t), \quad \mathbf{v}_s = d\boldsymbol{\rho}_s/dt, \quad (0.4)$$

где  $\mathbf{F}_R(\mathbf{v}_s)$  – сила сопротивления движению частицы со стороны внешней среды (для её определения используют изотропные и анизотропные аналоги закона Стокса),  $\mathbf{F}_I(\boldsymbol{\rho}_s)$  – сила воздействия на частицу со стороны других частиц полимерной молекулы,  $\mathbf{f}_s(t)$  – случайный процесс, описывающий соударение частицы с частицами внешней среды.

Основные этапы развития микроструктурных моделей полимерных растворов и расплавов можно проследить в следующих работах. *I. Работы Рауса [37] и Зимма [38] 50-х гг. XX в.* В них были впервые предложены так называемые модели «бусинок и пружинок», в которых макромолекулы полимера представлены механическими системами, состоящими из частиц (бусинок) и связей между ними, работающих по принципу пружинок. Для таких систем получены коэффициенты диффузии и времени релаксации. *II. Работы де Жёна [39] и Дои–Эдвордса [40] 70-х–80-х гг. XX в.,* в которых для описания течений высококонцентрированных растворов и расплавов полимеров предложено использовать модели рептации (от лат. «repto» – ползать, пресмыкаться). В рамках таких моделей жидкость представляется сплетением полимерных цепей, которые «ползут» друг относительно друга в определённых направлениях, с жёсткими ограничениями на перемещения в направлении, поперечном движению. Такие ограничения формализованы в виде по-

нения «трубка». III. Работы Бёрда–Кёртиса [41], Гизекуса [42], Волкова–Виноградова [43] 80-х гг. XX в., в которых рептация заменяется на движение одной макромолекулы в анизотропном растворителе.

Несмотря на достаточную строгость и высокую степень детализации при описании динамики макромолекул, микроструктурные модели редко применяются для анализа сложных течений на макроуровне, поскольку переход от микро- к макроуровню приводит к громоздким вычислениям и вызывает множество сложностей. Стремление к упрощению соотношений моделей в совокупности с требованием соответствия расчётных данных результатам экспериментов привело к возникновению класса *мезоскопических моделей*. В таких моделях вводятся дополнительные параметры, описывающие анизотропию течения и имеющие конкретный физический смысл, например, осреднённые характеристики ориентации макромолекул  $\beta$ , их размера  $k$  и т. п. *Эти параметры, называемые феноменологическими*, задаются при сопоставлении результатов моделирования с данными механических испытаний. Развитием мезоскопических моделей занимаются научные коллективы в г. Барнауле под рук. проф. Г.В. Пышнограя и в г. Перми под рук. д. ф.-м. н. О.И. Скульского.

В диссертации за основу взяты реологические соотношения мезоскопической модели Покровского–Виноградова. Основные принципы и уравнения для корреляционных моментов и компонент тензора анизотропии этой модели предложены в работах [44–46]. Пусть « $\langle \cdot \rangle$ » – осреднение по ансамблю реализаций. Сделаем в (0.4) следующие преобразования: 1) запишем  $\mathbf{F}_R(\mathbf{v}_s)$  в виде суммы сил гидродинамического увлечения  $\mathbf{\Gamma}_s$  и внутренней вязкости среды  $\mathbf{T}_s$ ; 2) в соответствии с моделью «бусинок и пружинок» запишем  $\mathbf{F}_I(\boldsymbol{\rho}_s) = \kappa(\boldsymbol{\rho}_{s+1} - 2\boldsymbol{\rho}_s + \boldsymbol{\rho}_{s-1})$ , где  $\kappa$  – коэффициент упругости пружинок; 3) положим, что  $\mathbf{f}_s(t)$  является гауссовским процессом с нулевым средним; 4) рассмотрим безынерционное приближение ( $m = 0$ ). После перехода к нормальным координатам выражение для  $\mathbf{F}_I$  представляется в виде  $\mathbf{F}_I(\boldsymbol{\rho}_s) = -\kappa\lambda_s\boldsymbol{\rho}_s$ , где  $\lambda_s = 4\sin^2\frac{s\pi}{2(S+1)}$ . Назовём  $x_{ij}^s = \kappa\lambda_s\langle\rho_s^i\rho_s^j\rangle/(3T)$ ,  $u_{ij}^s = \langle\rho_s^i T_s^j\rangle/(3T)$  безразмерными корреляционными моментами  $s$ -й частицы, где  $T$  – температура,  $i, j = 1, 2, 3$ . По аналогии с моделью Раусса в выражении для  $\mathbf{F}_I(\boldsymbol{\rho}_s)$  положим  $\kappa = 3K_B T/(2\tilde{l}^2)$ . Здесь  $K_B$  – постоянная Больцмана,  $\tilde{l}$  – расстояние между частицами. Тогда, делая в уравнении (0.4) преобразования 1)–4) и используя

закон сохранения импульса для объёма жидкости, получаем выражение для сдвиговых компонент тензора напряжений:

$$\tilde{\sigma}_{ij} = -\tilde{\nu}T\delta_{ij} + 3\tilde{\nu}T \sum_{s=0}^S \left( x_{ij}^s - \frac{1}{3}\delta_{ij} - \frac{1}{2}(u_{ij}^s + u_{ji}^s) \right), \quad (0.5)$$

где  $\tilde{\nu}$  – количество молекул в объёме жидкости,  $i, j = 1, 2, 3$ .

Предполагая малый вклад внутреннего трения ( $u_{ij}^s = 0$ ) и моделируя макромолекулу «гантелью» ( $S = 1$  – две частицы, одна связь), получаем

$$\tilde{\sigma}_{ij} = -p_0\delta_{ij} + \sigma_{ij}, \quad \sigma_{ij} = (3\eta_0/\tau_0)a_{ij}, \quad (0.6)$$

где  $\eta_0, \tau_0$  – начальные значения сдвиговой вязкости и времени релаксации макромолекулы (по аналогии с моделью Раусса эти выражения связаны с коэффициентом упругости пружинок  $\kappa$  и коэффициентом трения бусинок о внешнюю среду  $\zeta$ :  $\tau_0 = \zeta/\kappa$ ,  $\eta_0 = \tilde{\nu}T\tau_0$ );  $p_0 = \tilde{\nu}T$  – гидростатическое давление,  $a_{ij} = a_{ij}(t, x_1, x_2, x_3)$  – компоненты тензора анизотропии. Эти компоненты содержат информацию о форме и ориентации макромолекул и определяются выражениями:  $a_{ij} = \frac{J_{ij}}{\text{tr} J_{ij}^0} - \frac{1}{3}\delta_{ij}$ , где  $J_{ij} = \frac{1}{S+1} \sum_{s=0}^S \langle \rho_s^i \rho_s^j \rangle$  – компоненты тензора инерции макромолекулы с равновесным значением следа  $\text{tr} J_{ij}^0$ .

Уравнения для компонент тензора анизотропии получаются после применения обобщения закона Стокса для выражения  $\mathbf{F}_R(\mathbf{v}_s)$  и достаточно громоздких выкладок. При этом записываются интегральные выражения для сил  $\mathbf{G}_s$  и  $\mathbf{T}_s$  с тензорными множителями, описывающими анизотропное сопротивление, которые раскладываются вблизи состояния равновесия макромолекулы в ряд по малым параметрам  $a_{ij}$ . Затем эти разложения обобщаются на случаи неравновесных состояний. Как раз коэффициенты этих разложений и являются феноменологическими параметрами  $\beta, k$ . Скорость частицы, входящая в закон Стокса для  $\mathbf{F}_R(\mathbf{v}_s)$ , также линейно выражается через отклонения тензора  $J_{ij}$  от его равновесного значения, что в итоге приводит к возникновению *квадратичной нелинейности* реологических соотношений относительно  $a_{ij}$ . Наконец, в предположении малости вклада внутреннего трения и полагая, как и выше,  $S = 1$ , приходим к соотношениям:

$$\frac{da_{ij}}{dt} - \sum_{l=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_l} a_{lj} - \sum_{l=1}^3 \frac{\partial u_j}{\partial x_l} a_{li} + \frac{1 + (k - \beta)I}{\tau_0} a_{ij} = \frac{1}{3} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{3\beta}{\tau_0} \sum_{l=1}^3 a_{il} a_{lj}, \quad (0.7)$$



где  $I = a_{11} + a_{22} + a_{33}$ ,  $da_{ij}/dt = \partial a_{ij}/\partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla) a_{ij}$ , а первые три члена составляют так называемую *верхнюю конвективную производную Олдройда*. Убедимся, что при  $\tau_0 \rightarrow 0$  уравнения (0.6), (0.7) переходят в классические соотношения (0.1). Действительно, так как при  $\tau_0 \rightarrow 0$  релаксация происходит мгновенно, то  $\frac{J_{ij}}{\text{tr} J_{ij}^0} \rightarrow \frac{1}{3} \delta_{ij}$ , поэтому в любой момент времени имеем:  $a_{ij} = 0$ , а значит, в (0.6), (0.7) имеет смысл ввести относительные величины  $\tilde{a}_{ij} = \frac{3a_{ij}}{\tau_0}$ . После деления (0.7) на  $\tau_0$  и записи его в терминах переменных  $\tilde{a}_{ij}$ , несложно установить, что при  $\tau_0 \rightarrow 0$  имеем  $\tilde{a}_{ij} \rightarrow \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$ . Отсюда  $a_{ij} \rightarrow (\tau_0/3) \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ . После подстановки этого выражения в (0.6) получаем в точности (0.1). Отметим, что при  $\tau_0 \neq 0$  и  $k = \beta = 0$  соотношения (0.6), (0.7) совпадают с моделью Oldroyd-B при задании в ней нулевой вязкости растворителя, см. § 3.1.

Выше дан очень сжатый и весьма схематичный вывод реологических соотношений мезоскопической модели Покровского–Виноградова. Достаточно подробный вывод этих соотношений, а также их валидация путём сравнения результатов моделирования с экспериментальными данными приведены в [35, 36], см. также [47–49]. Отметим, что недавно в [50] сделано обобщение модели на случай множества мод:  $S > 1$ . Также предложены её модификации для учёта более сложного и немонотонного поведения визкозиметрических функций, наблюдаемого в экспериментах [51]. Соискателем и его консультантами А.М. Блохиным и Д.Л. Ткачёвым построена *обобщённая мезоскопическая модель*, позволяющая описать широкий спектр явлений, возникающих в приложениях. Модель основана на реологических соотношениях (0.6), (0.7), уравнении теплопроводности с диссипативными членами специального вида из работы [52] и уравнениях нерелятивистской магнитной гидродинамики, МГД, [53]. Предложенная модель позволила впервые учесть широкий спектр воздействий на жидкость, возникающих в технологиях, а также дать математическое описание процесса разрушения (потери устойчивости) ламинарных течений вязкоупругих полимерных сред с прямыми линиями тока, см. гл. 3.

**Случайное взаимодействие волн в физических системах, описываемых НУШ.** Разрушение устойчивых ламинарных течений в жидкостях, газах и плазме, как правило, ведёт к хаотичной и турбулентной динамике. Однако выявление механизмов возникновения и развития турбулентных те-

чений остаётся одной из открытых проблем современной физики. Ключевую 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 постоянными потоками инвариантов между масштабами, на которых происходит их *накачка и диссипация*, *НД*, (см. [54], теорию Колмогорова–Обухова [55, 56] и полезные комментарии из [57, 58]).

Однако экспериментальные исследования показывают, что физика случайного нелинейного взаимодействия волн не ограничивается каскадными процессами, она намного богаче. Значительный интерес представляет сама эволюция спектров энергии и других инвариантов в пространстве Фурье. Здесь обнаруживается множество эффектов: изотропная и анизотропная эволюция, установление и потеря устойчивости стационарных спектров, автомодельные режимы первого и второго рода, неограниченный рост (*blow-up*) спектров и многое другое. Попытки математического исследования этих эффектов в последние десятилетия привели к бурному развитию ТВТ [59, 60], центральным объектом которой является *кинетическое уравнение, КУ, с интегралом столкновений в правой части*, описывающее волновые взаимодействия в нелинейных гамильтоновых физических системах [61].

К настоящему времени для КУ получено не много строгих результатов. Наиболее известными из них являются *спектры Колмогорова–Захарова, КЗ*, представляющие точные стационарные решения КУ и описывающие каскадные процессы. Отметим также теоремы о локальных и глобальных существовании и единственности обобщённых решений задач Коши для КУ [62, 63]. Основным инструментом исследования эволюции решения КУ остаётся численное моделирование. Однако и здесь возникают существенные сложности, связанные с нелинейностью КУ, свойствами ядер интегралов столкновений, неограниченностью областей интегрирования и самое главное с тем, что частотные диапазоны, в которых ищутся решения КУ (отличия частот накачки и диссипации энергии), могут достигать нескольких (вплоть до шести-восьми) декад, т. е. в процессе эволюции градиенты решений варьируются в пределах шести-восьми порядков. Наибольший интерес для специалистов в

области экспериментальной и теоретической физики состоит как раз в том, чтобы сделать частотный диапазон максимально широким и наблюдать в нём осреднённое (сглаженное) поведение спектра. Конечно, такой запрос представляет настоящий вызов для специалистов по математическому моделированию и численным методам.

В диссертации исследуются волновые взаимодействия в физических системах, описываемых *уравнением Шрёдингера с кубической нелинейностью*. Это уравнение является универсальным и применяется для моделирования широкого спектра явлений в оптике, космологии, динамике сверхтекучих жидкостей и бозе-газа [64–66]. Кроме того, используя преобразование Маделунга, это уравнение можно связать с моделями газовой динамики, в частности получить из него уравнения Эйлера с дополнительным членом в правой части, который называют квантовым давлением [67], [60, ch. 15].

Далее мы сосредоточимся на описании волновой кинетики бозе-газа, поскольку, с тех пор как впервые был получен *конденсат Бозе–Эйнштейна, КБЭ*, [68] (Нобелевская премия по физике 2001 г.), для этого приложения наблюдается стремительный прогресс экспериментальных методов, формирующих базу для проверки существующих и разработки новых теорий (по поводу экспериментов см. [69, § IV] и недавние статьи [70–72]). Для описания динамики бозе-газа используется НУШ специального вида – *уравнение Гросса–Питаевского, УГП* [64]

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + g_b |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \psi(\mathbf{x}, t), \quad (0.8)$$

где  $\psi(\mathbf{x}, t)$  – комплекснозначная волновая функция, описывающая состояние бозонов в декартовой системе координат  $\mathbf{x} = \{x, y, z\}$  в момент времени  $t > 0$ ,  $\Delta$  – оператор Лапласа,  $i = \sqrt{-1}$ ,  $\hbar$  – приведённая постоянная Планка,  $m$  – масса бозона,  $g_b = 4\pi\hbar^2 a_s/m$  – мера интенсивности взаимодействия бозонов,  $a_s$  – длина рассеяния бозон-бозонной  $s$ -волны. Вводя в (0.8) безразмерные величины  $\tilde{t}$ ,  $\tilde{\mathbf{x}}$  и  $\tilde{\psi}$ , такие что  $t = \tau_B \tilde{t}$ ,  $\mathbf{x} = \lambda_B \tilde{\mathbf{x}}$  и  $\psi = \lambda_B^{-3/2} \tilde{\psi}$ , где  $\tau_B = 8g_b^2 m^3 / \hbar^5$ ,  $\lambda_B = 2g_b m / \hbar^2$  и опуская в итоговом выражении тильды над  $t$ ,  $\mathbf{x}$ ,  $\psi$ , получаем

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left[ -\Delta + |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t). \quad (0.9)$$

Уравнение (0.9) называют также *дефокусирующим НУШ*, поскольку знак

при нелинейном члене в правой части положителен. Будем исследовать нелинейное взаимодействие волн бозе-газа в кубе с рёбрами длины  $L$  и с условиями периодичности решения по координатам  $x, y, z$ . Объём куба:  $V = L^3$ . Из УГП (0.9), следуя [59, 60], можно получить уравнения с гамильтонианом  $\mathcal{H}$  для коэффициентов Фурье волновой функции:

$$i \frac{da_{\mathbf{k}}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a_{\mathbf{k}}^*}, \quad \mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} |a_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \delta_{12}^{34}, \quad (0.10)$$

где  $\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \in \frac{2\pi}{L} \mathbb{Z}^3$  – волновые векторы,  $\omega_{\mathbf{k}} = k^2$  – частота волны с волновым вектором  $\mathbf{k}$  в линейном приближении,  $k = |\mathbf{k}|$ ,  $a_{\mathbf{k}} \in \mathbb{C}$  – переменная волнового действия:  $a_{\mathbf{k}} = \hat{\psi}_{\mathbf{k}} = (1/V) \int \psi(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}$ , где интеграл берётся по всем возможным значениям  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$  и  $\mathbf{k}_4$ ,  $\delta_{12}^{34} = \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)$  – символ Кронекера, «\*» означает комплексное сопряжение.

Для (0.9) имеют место законы сохранения плотности частиц

$$N = \frac{1}{V} \int |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} \quad (0.11)$$

и плотности энергии

$$H = \frac{1}{V} \int \left[ |\nabla \psi(\mathbf{x}, t)|^2 + \frac{1}{2} |\psi(\mathbf{x}, t)|^4 \right] d\mathbf{x}. \quad (0.12)$$

Плотность энергии разбивается на две части: слагаемое, соответствующее линейному приближению динамики бозе-газа  $H_2 = \frac{1}{V} \int |\nabla \psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}$ , и слагаемое, характеризующее нелинейность  $H_4 = \frac{1}{V} \int \frac{1}{2} |\psi(\mathbf{x}, t)|^4 d\mathbf{x}$ . В слаботурбулентном режиме для (0.9) могут одновременно реализоваться каскады  $N$  и  $H$ , причём направление их потоков противоположны: энергия течёт из области малых в область больших волновых чисел (прямой каскад), а поток частиц направлен из области больших в область малых волновых чисел (обратный каскад, ведущий к конденсации) [60, 73]. Аналогичные «двойные» каскады обнаружены ранее для 2D течений идеального газа в работе Фьёртофта [74].

Анализ *слабонелинейного* волнового взаимодействия в физической системе, описываемой УГП (0.9), приводит к КУ для спектра волнового действия

$$n_{\mathbf{k}}(t) = n(\mathbf{k}, t) = \left( L/(2\pi) \right)^3 \langle |a_{\mathbf{k}}|^2 \rangle, \quad (0.13)$$

где угловые скобки означают осреднение по ансамблю начальных данных. Здесь и далее в диссертации рассмотрен неакустический режим эволюции спектров: при записи кинетического уравнения вклад конденсата в структуру волновых взаимодействий считается малым, что обеспечивает выполнение дисперсионного соотношения  $\omega = k^2$ . Конечно, по мере эволюции решения УГП доля конденсата в волновом спектре  $C_0 = |\hat{\psi}_0|^2/N$  может возрасти. Однако во всех расчётах гл. 4 значение  $C_0$  не превышало  $10^{-4}$ .

Опишем основные шаги и предположения ТВТ, необходимые для вывода КУ из УГП (более детально процедура вывода КУ описана в [59], [60, ch. 6]).

1. Записывая УГП (0.9) в гамильтоновой форме и переходя в пространство Фурье, получаем уравнения (0.10).

2. Вводим малый параметр  $0 < \epsilon \ll 1$ , служащий мерой нелинейности, и рассматриваем УГП на временном масштабе  $T_I$  между характерными временами линейных  $T_L$  и нелинейных  $T_N$  взаимодействий:

$$T_L = \frac{2\pi}{k^2} \ll T_I \sim \frac{2\pi}{\epsilon k^2} \ll T_N = \frac{2\pi}{\epsilon^2 k^2}.$$

3. Для описания волновых взаимодействий введём в (0.10) переменную

$$b_{\mathbf{k}}(t) = a_{\mathbf{k}} \exp(i\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}t)/\sqrt{\epsilon}, \quad \tilde{\omega}_{\mathbf{k}} = k^2 + 2N, \quad k = |\mathbf{k}|.$$

Второе слагаемое в выражении для  $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}$  называется нелинейным частотным сдвигом. Однако этот сдвиг не приводит к обмену энергией между модами в пространстве Фурье. Нетрудно видеть, что  $n_{\mathbf{k}}(t) = \epsilon(L/(2\pi))^3 \langle |b_{\mathbf{k}}|^2 \rangle$ .

4. Предположим, что амплитуды  $|b_{\mathbf{k}}|$  и фазы  $b_{\mathbf{k}}/|b_{\mathbf{k}}|$  являются независимыми случайными величинами, и фазы равномерно распределены на окружности в комплексной плоскости. Это предположение является стандартным для ТВТ (см. [75–77]). Далее будем называть его *предположением о случайных фазах и амплитудах, ПСФА*.

5. Сделаем асимптотическое разложение  $b_{\mathbf{k}}(T_I)$  в ряд по малому параметру  $\epsilon$ , подставим его в (0.10) и получим с использованием ПСФА и теоремы Г. Ц. Вика [78] уравнения для осреднённых коэффициентов разложения.

6. Приближим производную по времени от спектра волнового действия (0.13) разностным отношением, выразим её через осреднённые коэффициенты разложения  $b_{\mathbf{k}}(T_I)$  и выполним последовательный переход к пределам  $L \rightarrow \infty$  (что приводит к континуализации  $k$ -пространства) и  $\epsilon \rightarrow 0$  ( $T_I \rightarrow \infty$ ).

В результате получаем КУ, описывающее *четырёхволновые взаимодействия* — взаимодействия двух волн  $\mathbf{k}, \mathbf{k}_1$  приводят к образованию двух новых волн  $\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$  [61]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}n_{\mathbf{k}} = 4\pi \int \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)\delta(\omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2} - \omega_{\mathbf{k}_3}) & [n_{\mathbf{k}_1}n_{\mathbf{k}_2}n_{\mathbf{k}_3} + \\ + n_{\mathbf{k}}(n_{\mathbf{k}_2}n_{\mathbf{k}_3} - n_{\mathbf{k}_1}n_{\mathbf{k}_3} - n_{\mathbf{k}_1}n_{\mathbf{k}_2})] & d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3, \end{aligned} \quad (0.14)$$

где волновые векторы ( $\mathbf{k}_i \in \mathbb{R}^3$ ) теперь являются непрерывными, а  $\delta$  означает дельта-функцию Дирака. Отметим, что КУ (0.14) может быть также выведено из уравнения Больцмана при соответствующем виде функции распределения частиц [79].

Интеграл столкновений, стоящий в правой части (0.14), берётся по 9-мерному пространству. Однако в диссертации мы сосредоточимся на случае *однородных и изотропных* волновых взаимодействий. При этом условии осреднение интеграла столкновений по угловым координатам в пространствах векторов  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$  приводит к существенному снижению размерности и к КУ с новым ядром. Это упрощение позволяет исследовать сложную эволюцию спектров, в том числе автомоделные режимы [79–81].

Отметим, что исследование именно случая однородного изотропного взаимодействия волн позволяет сконцентрироваться на сути указанных проблем и нивелировать влияние многих частных факторов, существенно усложняющих ситуацию. В связи с этим, отпадает потребность в применении специальных аппроксимаций анизотропных КУ [82] и стохастических методов (методов Монте-Карло). В подтверждение этого отметим, что в работе П. Янсена [83] для анализа волновой кинетики на поверхности глубокой воды в изотропном случае реализованы метод Монте-Карло с осреднением по ансамблю реализаций и метод решения КУ вида (0.17) с применением кубатурных формул для расчёта правой части. Показано, что последний работает в сотни раз быстрее.

Следует заметить, что в различных источниках приводятся разные значения постоянного множителя при осреднённом интеграле столкновений [61, 79, 84]. В диссертации использовано значение  $4\pi^3$ , полученное соискателем и его соавторами в приложении 1 работы [85].

В изотропном случае спектр волнового действия зависит только от модуля волнового вектора,  $k = |\mathbf{k}|$ . С использованием дисперсионного соотношения

$\omega = k^2$  удобно перейти к частотной переменной  $\omega$ :  $n_{\mathbf{k}}(t) = n_{\omega}(t) = n(\omega, t)$ . В таком случае, КУ принимает вид

$$\frac{d}{dt}n_{\omega} = \int \mathcal{P}_{\omega 123} n_{\omega} n_1 n_2 n_3 (n_{\omega}^{-1} + n_1^{-1} - n_2^{-1} - n_3^{-1}) \delta_{1\omega}^{23} d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3, \quad (0.15)$$

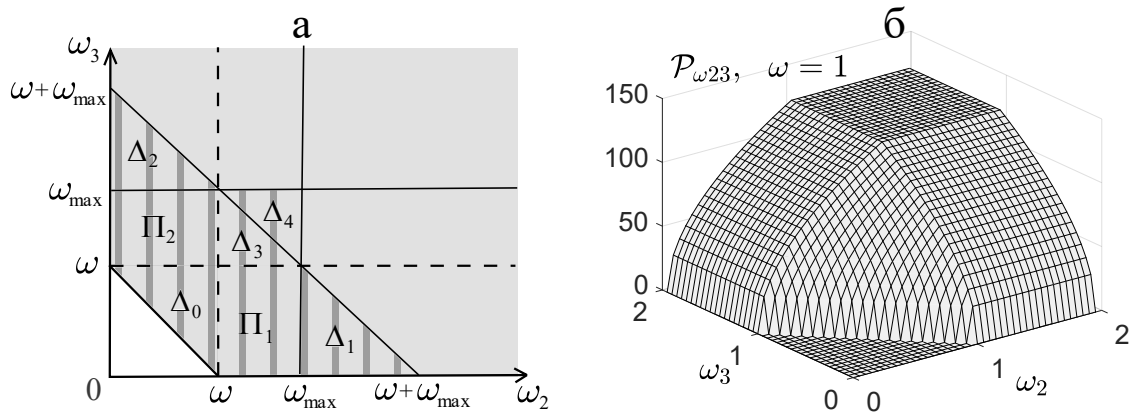
где  $\delta_{1\omega}^{23} = \delta(\omega + \omega_1 - \omega_2 - \omega_3)$ , интеграл в правой части (0.15) берётся по всем положительным значениям  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ ,  $n_i = n(\omega_i, t)$ . Ядро интеграла имеет вид

$$\mathcal{P}_{\omega 123} = \mathcal{P}(\omega, \omega_1, \omega_2, \omega_3) = \frac{4\pi^3}{\sqrt{\omega}} \min(\sqrt{\omega}, \sqrt{\omega_1}, \sqrt{\omega_2}, \sqrt{\omega_3}). \quad (0.16)$$

Наконец, используя сдвиговое свойство  $\delta_{1\omega}^{23}$  и обозначая  $n_c(t) = n(\omega_2 + \omega_3 - \omega, t)$ ,  $\mathcal{P}_{\omega 23} = \mathcal{P}(\omega, \omega_2 + \omega_3 - \omega, \omega_2, \omega_3)$  и  $\Delta_{\omega} = \{(\omega_2, \omega_3) : \omega_2, \omega_3 \geq 0, \omega_2 + \omega_3 \geq \omega\}$ , КУ (0.15) можно ещё упростить и получить

$$\frac{dn_{\omega}}{dt} = St_{\omega}(n) = \int_{\Delta_{\omega}} \mathcal{P}_{\omega 23} [n_c n_2 n_3 + n_{\omega} (n_2 n_3 - n_c n_3 - n_c n_2)] d\omega_2 d\omega_3. \quad (0.17)$$

На рис. 0.1 показаны область интегрирования и график ядра интеграла.



**Рис. 0.1.** Область интегрирования  $\Delta_{\omega}$ : неограниченная серая область при  $\omega \in [0, \infty)$ , ограниченная заштрихованная область при  $\omega \in [0, \omega_{\max}]$  (а); график ядра  $\mathcal{P}_{\omega 23}$  интеграла столкновений при  $\omega = 1$  (б)

Область  $\Delta_{\omega}$  при  $\omega \in [0, \omega_{\max})$  является неограниченной двумерной областью (см. рис. 0.1), а ядро  $\mathcal{P}_{\omega 23}$  содержит особенности: изломы вдоль линий  $\omega_2 = \omega$ ,  $\omega_3 = \omega$  и неограниченный рост производных в окрестности границы  $\Delta_{\omega}$ :  $\omega_2 = 0$ ,  $\omega_3 = 0$  и  $\omega_2 + \omega_3 = \omega$ . Эти обстоятельства осложняют численный анализ (0.17).

Для уравнения (0.17) выполнены законы сохранения плотности частиц

$$N = 2\pi \int_0^{\infty} \omega^{1/2} n_{\omega} d\omega \quad (0.18)$$

и плотности энергии

$$H = H_2 = 2\pi \int_0^{\infty} \omega^{3/2} n_{\omega} d\omega. \quad (0.19)$$

Эти величины в точности совпадают с плотностью частиц (0.11) в УГП и с частью выражения для энергии (0.12), соответствующей линейному приближению. Нелинейная часть (0.12) в исследуемом слабонелинейном режиме является пренебрежимо малой.

В диссертации решены важные проблемы, связанные с эволюцией спектров волнового действия – решений КУ (0.17). Опишем кратко суть проблем.

При выводе (0.17) использованы базовые предположения ТВТ [60, ch. 6]: ПСФА и предположение о слабой нелинейности волновых взаимодействий. Доказать строго, что эти предположения будут выполняться при долговременной эволюции спектра, до сих пор не удалось. Строгие оценки отклонения решения КУ от спектра исходного динамического уравнения получены только на временных интервалах порядка  $o$ -малое от характерного времени эволюции спектра. Такие оценки, использующие идею теоремы О.Е. Ланфорда для кинетического уравнения Больцмана [86, 87], представлены, например, в [88]. Итак, для верификации ТВТ и описания временных интервалов, в которых решения КУ с высокой точностью совпадают со спектрами УГП, требуется организация вычислений с тонкой настройкой начальных данных, членов, описывающих НД, и с контролем погрешностей.

Существенный интерес представляют точные стационарные решения КУ – спектры КЗ, соответствующие обратному каскаду частиц бозе-газа, описывающему КБЭ, и прямому каскаду энергии (эти решения с точностью до безразмерных постоянных множителей впервые получены в работе соискателя и соавторов [89], они обсуждаются в § 4.2). В спектрах прямого каскада присутствует логарифмическая поправка, позволившая решить проблему нелокальности волновых взаимодействий (расходимости интеграла столкновений) и объяснить противоречие данных экспериментов из [70] и результатов теории Колмогорова–Обухова.



В [79] впервые отмечено, что эволюция решений КУ (0.17) при моделировании обратного каскада частиц бозе-газа носит автомодельный характер. При этом наблюдаются *взрывной рост (blow-up)* и разрушение спектров в конечный момент времени  $t^*$ . В соответствии с известной классификацией Зельдовича–Райзера–Баренблатта обратный каскад должен описываться *автомодельными решениями КУ второго рода*<sup>4</sup>. Поиск таких решений требует анализа *нелинейной спектральной задачи*, что представляет сложную вычислительную проблему. Попытки решения этой задачи уже делались [80, 81], при этом были получены неклассические степенные спектры. Однако, поскольку данные об используемых вычислительных методах и их точности, как и эксперименты на сходимость, в указанных работах отсутствуют, требуется детальная верификация этих спектров с применением принципов адекватного моделирования и расчётов с контролем погрешностей.

## § 0.2. Об особенностях решений исследуемых задач

Как указано выше, проблемы, возникающие при построении адекватных моделей динамики полимерной жидкости и слаботурбулентных течений бозе-газа, *имеют определённую общность*. Они обусловлены наличием в исследуемых задачах особенностей, отражающих физические свойства явлений. Полезно сделать перечень этих особенностей, из которого несложно увидеть существенные математические аналогии проблем из разных областей, а также соответствия: «Физические свойства процесса» — «особенности Математических постановок» — «необходимость учёта этих особенностей в рамках Вычислительной модели» (далее будем обозначать эти соответствия «ФМВ»).

**1. Эволюция особых точек в нелинейных задачах для дифференциальных уравнений.** Известно, что даже если коэффициенты, правые части, начальные и краевые условия нелинейных ОДУ и УЧП эллиптического и параболического типов задаются целыми функциями, аналитические продолжения их решений могут иметь особенности (полюса, точки ветвления

---

<sup>4</sup>В таких решениях показатель автомодельности невозможно определить из соображений размерности или из законов сохранения. Их поиском в задачах газовой динамики и гидродинамики в 40-х–60-х гг. XX в. занимались К.Г. Гудерлей, И.М. Гельфанд, К.В. Брушлинский, Я.М. Каждан и другие исследователи, см. обзор в статье [90].

и т. п.), лежащие в комплексной плоскости  $\mathbb{C}$  в непосредственной близости от области задачи. Примеры задач для нелинейных ОДУ, имеющих особенности такого рода, – уравнения Пенлеве [91, 92]. Первое уравнение Пенлеве для функции  $u(x)$ ,  $x \in \mathbb{R}^+$  можно представить в виде [93, р. 158]

$$u_{xx} - u^2 = x.$$

Если дополнить это уравнение краевым условием  $u(0) = u_x(0) = 0$  и искать решение поставленной задачи на полуоси  $[0, \infty)$ , то мы столкнёмся с проблемами: решение имеет бесконечное множество полюсов в  $\mathbb{R}^+$ . Координаты первых трёх из них [93, р. 162]:  $x \approx 3.742$ ,  $x \approx 8.375$ ,  $x \approx 12.426$ . Этот пример наглядно показывает, что даже решения ОДУ 2-го порядка с постоянными коэффициентами и квадратичной нелинейностью могут иметь сильные особенности. Другие более содержательные примеры, возникающие в приложениях, можно найти в работах К. и П. Сулем, Э. и Ю. Фриш, Е.А. Кузнецова, П.М. Лушникова, В.П. Варина, Р.Е. Кафлиша, Дж. Видемана и их соавт. [94–101]. В работах Е.А. Карабут, Е.Н. Журавлёвой и соавт. [102, 103] исследованы особенности точных решений одномерных транспортных уравнений (в том числе уравнения Хопфа) в задаче о течении идеальной жидкости со свободной границей. В работах А.И. Дьяченко и соавт. [104, 105] в приложении к проблеме интегрируемости уравнений динамики такой жидкости и поиска новых инвариантов движения подчёркнута важность положения и типа особых точек. Полученные результаты свидетельствуют об особой актуальности построения динамических систем для непосредственного анализа эволюции особых точек, их типа и порядка.

С течением времени или при изменении параметров моделей, рассмотренных в диссертации, особые точки могут изменять своё положение в  $\mathbb{C}$ . Возможны ситуации, когда особая точка подходит вплотную к области, где ищется решение задачи, или даже попадает в эту область, что приводит к неограниченному росту решения и/или его производных. Зачастую это означает, что классическое решение разрушается. Исследования, проведённые в диссертации, показывают, что именно этот механизм следует использовать для математического описания разрушения ламинарных течений полимерной жидкости пуазейлевского типа и blow-up спектров в обратном каскаде бозе-газа. Для численного моделирования этих процессов необходимо учиты-

вать положение особых точек вплоть до их выхода в область решения задачи.

ФМВ: движение фронтов и blow-up решений в нелинейных задачах — эволюция особых точек решения в комплексной плоскости — дробно-рациональные приближения решений, учитывающие положение особенностей.

**2. Разномасштабность** характерна для явлений, сочетающих быстрые и медленные процессы, и объектов, размеры и/или структурные параметры которых могут отличаться на несколько порядков.

Существенное влияние на течение полимерной жидкости оказывает соотношение характерных времён макроскопической и микроструктурной динамики, которое описывается *числом Вайсенберга*,  $W$ . Число  $W$  характеризует относительное время релаксации полимерных молекул и влияние предыстории их напряжённо-деформированного состояния на свойства течения. При увеличении  $W$  наблюдается экспоненциальный рост компонент тензора напряжений, растут градиенты решений, появляются пограничные слои. Применение стандартных методов для расчёта таких течений ведёт к неустойчивым численным процессам [106, 107]. Отметим, что такой численный эффект может сложным образом «переплетаться» с физическими свойствами процесса (известно, что при больших  $W$  ламинарные течения вязкоупругих жидкостей теряют устойчивость [27, 108]). Для моделирования течений пуазейлевского типа при больших  $W$  и процесса их разрушения с ростом  $W$  требуются методы, обладающие высокой точностью и вычислительной устойчивостью.

При поиске численных решений КУ проблема разномасштабности является ключевой, поскольку характерные значения частот, на которых происходит накачка, должны во много раз отличаться от значений частот, на которых происходит диссипация. В соответствии с теорией Колмогорова–Обухова это необходимо для реализации каскадных процессов. Накачку в таком случае целесообразно моделировать гауссовой функцией с острым пиком, а диссипацию – степенными функциями (см. (2.25), а также § 4.2 и [89]). Эволюция решений КУ в разных частотных диапазонах имеет также разные временные масштабы, поэтому для построения адекватной вычислительной модели помимо учёта больших градиентов по частотной переменной, требуется разработка устойчивой схемы по времени с высоким порядком сходимости. Вследствие указанных сильных особенностей рассматриваемые задачи для

КУ является близкими к вырожденным. Некоторые подходы к численному анализу таких уравнений и их систем обсуждаются в работах М.В. Булатова, В.Ф. Чистякова [109–111].

ФМВ: разномасштабность исследуемых процессов по временной и частотной переменным — большие градиенты, пограничные слои и пики решений — методы приближения функций с большими градиентами, устойчивые схемы по времени высокого порядка, расчёты на сходимость.

**3. Объекты со сложной геометрией и структурой.** Известно, что решения краевых задач для УЧП в областях с негладкими границами, а также в многосвязных областях могут иметь существенные особенности. Этот эффект обусловлен спектральными свойствами дифференциальных операторов. Так, при решении спектральной задачи для оператора Лапласа в секторе возникают функции радиальной переменной с нецелыми степенями, а в кольце — функции с отрицательными степенями и логарифмы [112, гл. 4, § 4]. При решении нелинейных прикладных задач ситуация усложняется: анализ задачи об осесимметричном течении полимерной жидкости между двумя соосными цилиндрами показал, что особенности, вызванные геометрическими свойствами, «смешиваются» с особенностями, связанными с реологическими свойствами жидкости (см. п. 3.6.2). Аналогичная задача в двумерном случае — о течении в канале с сечением между двумя софокусными эллипсами — оказалась сложной вычислительной проблемой, требующей разработки специальных приближений, учитывающих геометрию [113], см. п. 1.1.3.

Проблема построения быстросходящегося приближения возникает также в задачах, где область состоит из нескольких структурных элементов, а параметры, само решение или его производные имеют разрывы на границах этих элементов. В таком случае целесообразно проводить декомпозицию области на минимально возможное число подобластей, так чтобы точки разрыва попадали на их границы, а решение в каждой подобласти имело высокий запас гладкости. Этот подход реализован при расчёте интеграла столкновений в правой части КУ (см. декомпозицию на рис. 0.1, а и п. 4.4.2).

ФМВ: задача со сложной геометрией и структурой объекта — компоненты решений с логарифмами, нецелыми и отрицательными степенями, разрывы решений и их производных — декомпозиция области вдоль разрывов и раз-

работка методов поиска приближенных решений, учитывающих геометрию.

**4. Множество режимов эволюции или стационарных состояний** и переключение между ними при изменении параметров задачи. Нелинейные задачи механики сплошных сред могут иметь множество решений. Возникает вопрос, какое из этих решений действительно описывает исследуемый процесс. Отметим, что выбор такого решения связан с анализом значений параметров задачи, начальных данных и граничных условий. Мы исходим из позиции, что такой анализ необходимо проводить с применением априорной информации, основанной на экспериментах и накопленном опыте.

В п. 3.2.2 для задачи о течении полимерной жидкости получены три ветви стационарных решений, а в п. 3.4.2 в расчётах на установление показано, что переключение между ними происходит при изменении соотношения между вкладом анизотропной и изотропной составляющих сопротивления среды. Иными словами, течение полимеров, в котором анизотропное трение преобладает над изотропным, качественно отличается от течения с противоположными свойствами. Выбор стационарного решения должен основываться на том, полимерную жидкость с какими свойствами мы рассматриваем.

При анализе задач волновой турбулентности получено два стационарных решения – спектры КЗ, соответствующие прямому и обратному каскадам. Реализуемость конкретного из этих двух решений в расчётах определяется коэффициентами компонент правой части КУ, описывающими НД энергии. Переключение между ними происходит за счёт вариации положений НД в спектральном пространстве. Априорная информация об этом содержится в *аргументе Фьёртофта*, основанном на простых физических соображениях [74], [60, sec. 2.1.3]. Два режима спектральной эволюции реализуются и в обратном каскаде: один описывает конденсацию бозе-газа, другой – выход на термодинамическое равновесие. Переключение между ними можно описать, используя *аргумент Эйнштейна* (см. [114] и п. 4.3.1).

ФМВ: множественность режимов эволюции или стационарных состояний — анализ процесса установления к тому или иному режиму с учётом физической специфики задачи — корректные ограничения значений параметров и/или выбор нужной ветви решения при вычислениях.

### § 0.3. Об учёте свойств гладкости решения и его особенностей для минимизации вычислительных затрат

Как мы видим, анализ особенностей задач математической физики необходимо связывать с природой моделируемых объектов и явлений. При этом проблема построения адекватных вычислительных моделей и методов, учитывающих специфику решаемых задач, помимо научной имеет ещё прикладную и инженерную направленность. При решении краевых и начально-краевых задач высокой вычислительной сложности на ЭВМ специалисты неизбежно сталкиваются с проблемой минимизации вычислительных затрат при условии достижения необходимой точности. Актуальность этой проблемы особенно остро проявляется как раз в приложениях с особенностями; а также при решении задач большой размерности, в которых ограничения объёмов памяти становятся наиболее критичными; и при оптимизации сложных систем, сводящейся к решению большого количества прямых задач.

Указанную проблему можно сформулировать в следующем виде.

**Дано:** задача для дифференциального либо интегро-дифференциального уравнения; требуемая точность решения.

**Найти:** метод, позволяющий получить решение с требуемой точностью:

- I) использовав минимальный объём памяти;
- II) совершив минимальное количество операций;
- III) внося пренебрежимо малую вычислительную погрешность в решение.

Отметим, что свойства I и II могут в степени, известной каждому вычислителю, противоречить друг другу. Однако концепция оптимального алгоритма, предложенная в [115] и детально описанная в [11, § 20], предполагает поиск вычислительных схем, экономичных по числу операций (свойство II) среди алгоритмов, реализующих свойство I. Эта концепция основана на понятии  *$\varepsilon$ -энтропии функциональных компактов, теории поперечников и теории табулирования функций* различной гладкости. Фундаментальная роль  $\varepsilon$ -энтропии в численном анализе обсуждается в [6, гл. 4], [11, § 18], [116, 117].

Анализ работ Понтрягина–Шнирельмана [118], Колмогорова [119] и Бабенко [120] позволяет проследить зависимость минимального объёма таблицы  $\mathfrak{L}$  (т. е., по сути, минимального объёма памяти, необходимого для приближения решения с заданной относительной погрешностью  $\varepsilon$ ) от гладкости иско-

мой функции и положения её особых точек в  $\mathbb{C}$ . Так, для функций действительной переменной, допускающих аналитическое продолжение в область  $\Omega_A \in \mathbb{C}$ , с модулем, ограниченным константой  $M$ , получаем  $\mathfrak{L} \sim \frac{1}{\log \rho} \log^2 \frac{M}{\varepsilon}$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ , где  $\rho$  – сумма полуосей эллипса Бернштейна  $\mathfrak{E}_\rho \in \Omega_A$ . Для функций  $f \in C^r[a, b]$ , у которых  $\|f\| \leq C$ ,  $\|f^{(r)}\| \leq M$ , имеем  $\mathfrak{L} \sim \alpha_r \left(\frac{M}{\varepsilon}\right)^{1/r} (b-a)$ , где  $\alpha_r$  зависит только от  $r$ . В классических работах не рассматривался случай бесконечно гладких, но неаналитических функций, например, *функций из класса Жевре*. Этот пробел восполнен в [116, 117], где на основе обобщённой теоремы Джексона предложена специальная техника для расчёта  $\varepsilon$ -энтропии классов таких функций.

Для функций  $d$  переменных, являющихся  $r$  раз непрерывно дифференцируемыми по каждой переменной, имеем  $\mathfrak{L} = O(\varepsilon^{r/d})$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Эту оценку называют ещё «*проклятьем размерности*». Суть этого феномена состоит в том, что при увеличении размерности задачи, чтобы сохранять точность расчётов порядка  $\varepsilon$ , мы вынуждены работать в классе всё более гладких функций. Однако даже в случае бесконечной гладкости искомым функций и умеренных значениях  $d$  вопрос о построении алгоритмов, эффективных по критериям I, II, для многомерных краевых задач не является тривиальным. В рамках диссертации проведена разработка и дано обоснование такого алгоритма.

Реализация свойства II в прикладных задачах с особенностями связана не только с минимизацией объёмов перерабатываемой информации при сохранении требуемой точности. Здесь речь идёт прежде всего об искусстве построения быстрых вычислительных схем, учитывающих свойства задачи, с последующей эффективной реализацией на ЭВМ. Отметим, что существенным преимуществом в плане скорости выполнения обладают *алгоритмы на основе локальной аппроксимации решений* (методы конечных разностей, МКР, конечных и граничных элементов, методы сплайн-коллокаций и т. п.), поскольку, как правило, они приводят к СЛАУ, с разреженными матрицами определённых структур. Число операций, необходимых для решения таких СЛАУ, если оценивать его через количество неизвестных, на 1–2 порядка меньше, чем число операций, необходимых для решения СЛАУ с заполненными матрицами, возникающих при использовании нелокальных приближений и методов без насыщения. Однако, используя специальные подходы к дискре-

тизации задач, указанные кардинальные различия в числе операций удаётся нивелировать. В данной работе предложен алгоритм решения многомерных задач, который уменьшает объём таблиц в соответствии с имеющимся запасом гладкости искомого решения и его особенностями и для заданного объёма таблицы лишь незначительно уступает по числу операций схемам МКР.

Свойство III не связано напрямую с I, II, тем не менее оно также является принципиально важным. Известно, что плохая обусловленность задачи линейной алгебры, соответствующей исходной краевой проблеме, может «пустить под откос» все усилия по удовлетворению свойств I, II из-за неконтролируемого роста погрешностей округления чисел с плавающей точкой в памяти ЭВМ. Чтобы избежать такого эффекта, в ходе вычислений необходимо использовать приближения с медленно растущими константами Лебега и отслеживать *обусловленность* решаемых задач линейной алгебры. В диссертации развита техника построения оценок вычислительной погрешности, основанная на расчёте обусловленностей матричных операторов алгоритма с гарантией точности с помощью *интервальных методов* [121].

Методология численного решения задач с особенностями, предложенная в диссертации, является эффективной в смысле свойств I–III. Она основана на нелокальных приближениях непрерывных функций, определённых на окружности  $S$  или на отрезке  $I \in \mathbb{R}$ , полиномами и дробно-рациональными функциями, ДРФ, адаптированными к свойствам искомого решения.

**Полиномиальные приближения и учёт гладкости решения.** *Прямые теоремы теории приближений* позволяют выделить три класса функций, наилучшие полиномиальные приближения которых имеют принципиально разные асимптотики функционала погрешности. Класс 1 содержит функции  $f \in W_p^r(M, I)$  и  $f \in \mathcal{W}_p^r(M)$  с ограниченной гладкостью  $r = 1, 2, \dots$ , для которых наилучшие приближения полиномами степени не выше  $n$  обеспечивают *степенной характер убывания погрешности (algebraic convergence)*,  $n^{-r}$ , в соответствии с теоремой Джексона и её следствиями [122], [123, гл. 4], см. также приложение I, § I.1.

Класс 2 включает бесконечно дифференцируемые функции на  $S$  и  $I$ , допускающие аналитическое продолжение в ограниченное множество комплексной плоскости  $\mathbb{C}$  и имеющие особые точки в  $\mathbb{C}$  (полюса, точки ветвления



и т. п.). В соответствии с теоремами Фабера [124] и Бернштейна [125] для таких функций можно строить полиномиальные приближения, демонстрирующие *экспоненциальный характер убывания погрешности*:  $q^{-n}$ , где  $q > 1$ . В зарубежной литературе такой характер сходимости называют также «*geometric convergence*» [126, sec. 2.4], подчёркивая тем самым, что оценка погрешности получена при использовании мажорант из частичных сумм геометрической прогрессии со знаменателем  $1/q$ . Отметим, что для  $C^\infty(I)$ -функций, не являющихся аналитическими, сходимость также носит экспоненциальный характер, однако степень экспоненты меняется. Например, для функций из класса Жевре с индексом  $s > 1$  на основе обобщённой теоремы Джексона и результатов из [116, 117] можно заключить, что сходимость характеризуется величиной  $q^{-n^{1/s}}$ . В [126, p. 26] отмечено, что при решении задач в ограниченных областях такой тип сходимости реализуется редко.

Класс 3 содержит *целые функции*, которые не имеют особых точек и могут быть приближены разложением в ряд Тейлора, сходящимся во всей  $\mathbb{C}$ . Анализ остаточного члена такого разложения с учётом неравенства Коши–Адамара для  $n$ -й производной целой функции показывает, что скорость сходимости таких приближений выше экспоненциальной (см. теорему I.4 в приложении I).

В диссертации приближения периодических функций строятся на основе полиномов с ядром Дирихле, а приближения функций на отрезке – на основе интерполяционных полиномов с узлами в нулях многочлена Чебышёва. Такие приближения не имеют насыщения. Это означает, что для решений из классов  $W_p^r(M, I)$  и  $W_p^r(M)$  (класс 1) асимптотика функционала погрешности метода приближения будет с точностью до медленно растущих множителей (констант Лебега) совпадать с асимптотикой наилучших приближений (см. § I.4). Кроме того, применение теории потенциалов для оптимизации интерполяций аналитических функций (классы 2 и 3) показывает, что скорость равномерной сходимости является максимальной тогда и только тогда, когда плотность распределения узлов интерполяции на отрезке  $[-1, 1]$  даётся формулой  $\mu(\tilde{\tau}) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-\tilde{\tau}^2}}$  [18, ch. 11, 12]. Нули ортогональных полиномов, в том числе полиномов Чебышёва, имеют именно такую плотность распределения.

Отметим, что в рамках нашего исследования для построения апостериорных оценок погрешности используются также *обратные теоремы теории*

*приближения* – теорема Бернштейна [125], [18, теорема 8.3] и теоремы, доказанные Дзядыком [127], [123, гл. VII, § 2]. Применение этих теорем и расчётов на последовательности сеток позволяет делать заключения о порядке гладкости решений, а также о положении и типе их особенностей в  $\mathbb{C}$ , см. § I.2.

**Дробно-рациональные приближения и учёт особенностей решения.** Как отмечено выше, для построения адекватных вычислительных моделей исследуемых нелинейных процессов аппроксимационных качеств пространства полиномов даже при использовании наилучших приближений может оказаться недостаточно.

Для решения задач с особенностями в  $\mathbb{C}$  (адекватное моделирование движения фронтов, эффектов «blow-up» и учёт компонент решения с нецелыми и отрицательными степенями) в диссертации предложены модификации *дробно-рациональных барицентрических интерполяций, ДРБИ*, из работ [19, 20, 128], см. § 1.2. Отметим, что за счёт высокой численной устойчивости [129] и простоты выражений для весовых множителей интерполяционные полиномы с узлами в супремумах или в нулях многочленов Чебышёва, записанные в барицентрической форме, демонстрируют впечатляющую эффективность. Так, в работе [18, ch. 5] показан пример приближения функции  $f(x) = \sin(10^5 x)$ ,  $x \in [-1, 1]$ , полиномом степени  $10^6$  с точностью до 12-го знака, при этом для вычисления значения полинома в ста точках на персональной ЭВМ потребовалось 1.86 секунды. Переход от барицентрических полиномиальных к дробно-рациональным интерполяциям технически прост: нужно изменить положения узлов и/или значения весов формулы с учётом особенности искомого решения. В [20] показано, что конформное отображение области, лежащей в  $\mathbb{C}$  и содержащей отрезок  $[-1, 1]$ , переводящее этот отрезок в себя и «уносящее» ближайшую к нему особую точку приближаемой функции на большое расстояние в  $\mathbb{C}$ , позволяет адаптировать положения узлов к особенности и существенно повысить скорость сходимости. При наличии информации о положении и типе особенностей решения для построения таких отображений предложены различные подходы [130]. При отсутствии такой информации ключевым является *вопрос о локализации особых точек*.

Этот вопрос в том числе в приложении к задачам гидродинамики активно обсуждается в работах зарубежных исследователей [94, 100, 101, 128]. Важную

роль в анализе и локализации особенностей играет современный прогресс в теории дробно-рациональных приближений. Отметим в связи с этим работы А.А. Гончара, Е.А. Рахманова, Дж. Нутталла, Г. Шталя, С.П. Суетина, А.И. Аптекарева, Л.Н. Третьякова и их соавторов [131–141], в которых обсуждаются асимптотики погрешности наилучших дробно-рациональных приближений, приближений Чебышёва – Паде и Эрмита – Паде; а также экспоненциальное сгущение и чередование нулей и полюсов таких аппроксимаций в окрестности особых точек приближаемой функции, и сходимость распределений нулей и полюсов к определённым мерам в области, где строится приближение. Полезная информация содержится в обзорной статье [142].

Способ решения проблемы локализации одной особенности, эффективный с практической точки зрения и состоящий в применении приближений Чебышёва – Паде, где в числителе стоит полином высокой степени, а в знаменателе – полином второй степени, предложен в [128] и развит в [143]. Этот способ использован в диссертации при разработке вычислительных алгоритмов.

В целом отметим, что получение для дробно-рациональных приближений строгих теоретических результатов, подобных теоремам Джексона и Бернштейна, существенно осложняется нелинейностью таких приближений. Не так давно в [135] выведено точное выражение асимптотики погрешности наилучшего приближения функции  $|x|^{\tilde{\alpha}}$ ,  $\tilde{\alpha} > 0$ ,  $x \in [0, 1]$  отношением полиномов степеней не выше  $n$ :

$$E_n^{rb} \sim 4^{1+2\tilde{\alpha}} |\sin(0.5\pi\tilde{\alpha})| \exp(-\pi\sqrt{\tilde{\alpha}n}) \text{ при } n \rightarrow \infty. \quad (0.20)$$

Такое выражение для погрешности позволяет заключить, что скорость сходимости наилучших дробно-рациональных приближений также строго связана с гладкостью приближаемой функции, только характер сходимости в отличие от теоремы Джексона становится экспоненциальным. Вслед за авторами [144] и с учётом экспериментов из § 1.2 (см. рис. 1.3) заметим, что ДРБИ демонстрируют именно такой характер сходимости и позволяют строить приближения всевозможных особых точек набором полюсов, что обеспечивает их высокую эффективность в задачах с особенностями.

**Алгоритмы решения многомерных задач.** Существенной идеологической составляющей диссертационного исследования является создание под-

хода, позволившего объединить все указанные приближения в единый инструмент для решения сложных прикладных проблем размерностей 2 и выше. Ключевую роль в создании такого подхода сыграла возможность представления приближений функций в *канонических областях* в виде *прямого (тензорного) произведения* одномерных приближений. Под канонической понимается область простой формы: квадрат, куб, круг, кольцо, цилиндр, тор, шар и т. п. Именно такое представление подтолкнуло автора к созданию удобных матричных аппроксимаций операторов дифференцирования и интегрирования с последующим переходом к *матричным и тензорным уравнениям Сильвестра* и быстрым алгоритмам их решения. Подчеркнём, что такие представления являются универсальными. Они применимы ко всем приближениям, предложенным в работе.

Отметим, что построение быстросходящихся приближений в областях неканонических форм в общем случае наталкивается на проблемы фундаментального характера, решение которых следует искать с применением методов геометрии, топологии и функционального анализа. В работе [6, гл. 3, § 5] сформулирована мысль о том, что при решении задач в таких областях «следует отказаться от многочленов, как от основного строительного материала» и задавать базис из функций специального вида, связанных с геометрией области. В некоторых случаях для решения подобных проблем можно использовать специальные системы координат (так, например, сделано в п. 1.1.3). Кроме того, существуют достаточно широкие классы областей (односвязные области и поверхности с гладкой границей, многоугольники), допускающие конформные отображения на канонические области, а значит, и использование подходов к аппроксимации, разработанных в диссертации. Речь идёт о применении отображений двумерной односвязной области на круг (см. теорему Римана), *отображений Шварца–Кристоффеля*, принципов *изогеометрического анализа* или об использовании специальных систем узлов – узлов Фейера (Fejér points), Лейа (Leja points) и Фекете (Fekete points). О технике построения таких отображений и о проблемах, которые при этом возникают, написано в работах [145–148], [18, ch. 12].

**Методы аппроксимации производных и интегралов в задачах с особенностями.** Численный анализ дифференциальных и интегро-диффе-

ренциальных уравнений подразумевает прежде всего переход от операторов дифференцирования и интегрирования, действующих в бесконечномерных функциональных пространствах, к их конечномерным аппроксимациям. Качество таких аппроксимаций определяется точностью, которую обеспечивают используемые формулы приближённого интегрирования и дифференцирования для рассматриваемого класса функций; спектральными свойствами соответствующих конечномерных операторов; а также *скоростью их «действия» на функцию*. Под последней мы понимаем как количество операций, необходимое для вычисления образа функции, так и скорость выполнения этих операций на современных ЭВМ. С точки зрения минимизации объёмов памяти важно, чтобы конечномерный оператор имел компактную форму записи.

В диссертации предложены аппроксимации операторов дифференцирования и интегрирования заполненными матрицами. Далее будем называть такие объекты матрицами, аппроксимирующими производные и интегралы, или просто *аппроксимирующими матрицами*. Элементы этих матриц задаются коэффициентами производных и интегралов используемых приближений, см. § 1.3. Описанная техника аппроксимации операторов восходит к работам К.И. Бабенко [6, гл. 9, § 5], см. также [8, 149]. В работах зарубежных авторов такой подход, именуемый «differentiation matrix technique», был развит независимо [150].

В случае приближения функции  $f \in C^\infty[a, b]$  полиномом с узлами Чебышёва оценка погрешности формул дифференцирования вида (1.37), (1.38) даётся обобщением классической теоремы Коши о погрешности интерполяции (см. теорему I.13 в § I.6 и [6, гл. 3, § 3]). Наглядное представление о поведении погрешности при использовании ДРБИ можно получить из [144].

Для аппроксимаций интегральных операторов в случае высокой гладкости подынтегральной функции целесообразно использовать разложения фундаментальных многочленов интерполяции из [6, гл. 6, § 5], см. 1.3.3. Для расчёта интегралов с существенными особенностями в работе предложено три подхода: первый основан на модификации *формулы Clenshaw–Curtis* [151], использующей гипергеометрические функции, второй – на применении специальных отображений, третий – на модификации так называемых *двуэкспоненциальных формул Мори* [152], см. § 1.4. В этом же параграфе даны оценки

погрешностей интегрирования новых формул.

Анализ приближённых спектров дифференциальных и интегральных операторов является нетривиальным и принципиально важным для исследования сходимости и точности алгоритмов. В некоторых линейных задачах удаётся провести строгий анализ на основе априорной информации о компактности оператора и положении полюсов его резольвенты [14, 16, 153]. Однако в случае нелинейной спектральной задачи из области волновой турбулентности, рассмотренной в § 4.4, вопрос о точности удаётся прояснить лишь косвенно, наблюдая за невязкой спектра. Анализ спектров аппроксимирующих матриц проведён с гарантией точности в п. 1.3.2 и в приложении III. Информация о знаках собственных чисел является принципиальной для обоснования сходимости и устойчивости предложенных методов, см. теорему 2.1.

По поводу скорости «действия» предложенных аппроксимаций операторов отметим, что для расчёта производных по формулам вида (1.42) требуется порядка  $N^2$  операций, что на порядок больше, чем в методах с локальной аппроксимацией производной. Однако с применением технологии векторных вычислений, когда умножение вектора на вектор или даже матрицы на вектор происходит за небольшое число тактов работы процессора, это преимущество локальных аппроксимаций нивелируется, а недостаток, связанный с наличием больших разреженных матриц, остаётся. В связи с этим подчеркнём, что предложенная техника аппроксимации реализуется особенно эффективно в системах с векторной арифметикой. Таких систем довольно много: библиотеки Fortran, C++, язык Matlab.

**Сочетание методов коллокаций и установления в нелинейных задачах.** Аппроксимация дифференциальных и интегральных операторов нацелена на поиск приближённых решений уравнений математических моделей в конечномерных пространствах. При этом необходим переход от исходной нелинейной дифференциальной или интегральной постановки к задачам линейной алгебры. Основными вопросами в этом контексте являются: 1) выбор способа минимизации невязки уравнения исходной задачи в конечномерном пространстве и 2) способ линеаризации уравнений.

Одним из наиболее распространённых подходов к минимизации невязки является *метод Бубнова–Галёркина*. При этом невязка минимизируется

в пространствах  $L_2$ ,  $L_2$  с весами или в более общем случае – в пространствах Соболева. При использовании нелокальных приближений частичными суммами ряда Фурье, разложений по ортогональным многочленам и другим специальным функциям, характеризующим спектр рассматриваемой задачи, такой метод называют *спектральным* [126, 154].

Другой подход, основанный на минимизации невязки на дискретном множестве точек, называют *методом коллокаций*, а соответствующее дискретное множество точек – *узлами коллокации*. Такой метод при использовании ортогональных базисов и спектральных разложений называют *псевдоспектральным*. Метод коллокаций можно также трактовать как метод Бубнова–Галёркина с весами в виде  $\delta$ -функций Дирака. В рамках методов коллокаций задача о минимизации невязки тоже может решаться по-разному: могут задаваться условия строгого равенства нулю невязки в узлах, или могут строиться *переопределённые системы уравнений*, в которых количество узлов коллокации заведомо больше числа свободных параметров аппроксимации. Решения таких систем ищутся, как правило, в смысле наименьших квадратов, см. работы А.Г. Слепцова, В.П. Шапеева, П.Б. Бочева и их соавт. [155–159].

В рамках диссертации разрабатывается псевдоспектральный метод, использующий интерполяционные полиномы в форме Лагранжа и приближения Фурье–Чебышёва, а также их обобщения, в том числе ДРБИ. Невязка при этом минимизируется за счёт приравнивания левых и правых частей уравнения в узлах коллокации, без использования переопределения. Это приводит к задачам линейной алгебры в виде матричных и тензорных уравнений Сильвестра, см. § 2.1. Методы решения таких уравнений могут быть найдены в [160, 161], а также в книге [154, ch. 8] (см. метод «*full diagonalization*»). Отметим, что в [7, гл. 3,6] описан ещё один подход к записи и быстрому решению задач линейной алгебры с применением интерполяционных полиномов и так называемых *h-матриц*. В диссертации разработан новый метод решения матричных и тензорных уравнений Сильвестра, кроме того, в § 2.7 предложено обобщение метода на случай задач, область которых допускает разбиение на канонические подобласти. Такое обобщение будем называть *методом спектральных элементов*.

Для линеаризации уравнений в диссертации используется метод установ-

ления с набором *нестационарных регуляризаций*. Такой подход в зарубежных источниках называют «relaxation method». Как и большинство других итерационных схем (методы Ньютона и Чебышёва, метод простой итерации и т. п.), метод установления основан на принципе сжимающих отображений и теоремах о неподвижной точке. Тем не менее он выгодно отличается от других высокой гибкостью, особенно если используется в совокупности со специальными нестационарными операторами (регуляризациями). Причина использования термина «регуляризация» в этом контексте обсуждается в п. 2.1.1, см. замечание 2.1. Обоснование сходимости метода установления при использовании регуляризаций дано в кандидатской диссертации соискателя [162] при решении задач физики полупроводников (см. также монографию [163] и статьи [164–166]). Практическая польза от таких регуляризаций в том, что за счёт интерактивной вариации их параметров в процессе установления можно не только добиться сходимости в задачах, где другие схемы не работают, но и уменьшить число итераций, требуемое для достижения заданной точности, в десятки и сотни раз (сравнение созданного алгоритма с другими методами в прикладной задаче обсуждается в § 2.6 и в [113]).

## **§ 0.4. Цели, задачи и результаты диссертационного исследования. Структура работы**

**Основные цели и задачи работы** состоят в достоверном математическом описании пуазейлевских течений полимерной жидкости и нелинейных волновых взаимодействий в бозе-газах, а также в разработке адекватных вычислительных моделей этих процессов с учётом особенностей 1–4 из § 0.2 и свойств I–III из § 0.3 и в применении этих моделей для решения проблем, указанных в § 0.1.

### **Основные положения диссертации, 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 паузейлевского типа в каналах, показана неединственность их стационарных решений. Рассчитаны стационарные течения и процессы их установления.

4. Найдены точные стационарные решения задачи об осесимметричном паузейлевском 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 взаимодействия 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 комплек-

сов 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.

**Структура диссертации.** Диссертация содержит подробное изложение работ по всем положениям, выносимым на защиту, и включает **введение**; **четыре главы**, содержащие описание

- 1) методов приближения функций, их производных и интегралов в задачах с особенностями (положение 1, гл. 1);
- 2) нелокального метода без насыщения для решения ОДУ, УЧП и КУ с контролем погрешностей, а также алгоритмов и комплексов программ на его основе (положения 2, 7, гл. 2);
- 3) пуазейлевских течений несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости, их установления и потери устойчивости (положения 3, 4, 7 гл. 3);
- 4) волновых взаимодействий в физических системах, моделируемых с применением нелинейного уравнения Шрёдингера (положения 5–7, гл. 4);

и **четыре приложения**, включающие соответственно: 1) формулировки теоретических результатов, полученных другими авторами и использованных в работе; 2) доказательства теорем и лемм, сформулированных в главах диссертации; 3) формулы для элементов матриц, аппроксимирующих производные в рамках разработанного алгоритма, а также анализ спектральных разложений и обусловленностей матриц; 4) идентификацию параметров модели течения полимеров по данным экспериментальных работ. Диссертация содержит 364 страницы, 84 рисунка, 36 таблиц и 321 ссылку на литературу.

Основные результаты по главам 1 и 2 опубликованы в статьях [167–172]; по главе 3 – в [113, 173–180]; по главе 4 – в [85, 89, 181, 182]. Всего 19 публикаций в рецензируемых журналах из перечня ВАК, в том числе 5 статей в журналах, индексируемых Web of Science из квартиля Q1.

С применением созданных методов и алгоритмов разработаны, реализованы и зарегистрированы в ФИПС комплексы проблемно-ориентированных программ для ЭВМ [183–185].

### **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 расплавов 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 волновых взаимодействий.

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.

**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 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, критерии потери устойчивости течений полимерной жидкости, указанные в диссертации, соответствуют данным из [186, 187], а полученные стационарные и автомоделные спектры, описывающие кинетику волн в бозе-газе, – результатам измерений из [70, 188].

**Личный вклад автора.** Все результаты диссертации получены лично соискателем или при его непосредственном участии. Работы [168–174], всего 7 работ, являются сольными (по ним соискатель не имеет соавторов). В статьях [85, 89, 167, 181, 182] соискателю принадлежат разработка, обоснование и тестирование алгоритмов решения КУ, дополнительно в [85, 89, 181] соискатель работал над выводом КУ для однородного изотропного взаимодействия волн бозе-газа, над получением точных стационарных решений КУ, над постановкой задач для автомоделных переменных, над сравнением результатов решения НУШ и КУ. В работах [113, 175–178] соискателю принадлежат вывод разрешающих соотношений, описывающих пуазейлевские течения полимерной жидкости, разработка и реализация нелокального метода без насыщения, оценки погрешностей, дополнительно в [175, 176] – идентификация параметров моделей, проведение расчётов и анализ результатов; в работах [179, 180] – разработка и реализация численных методов, проведение расчётов. Комплексы программ [183, 185] разработаны и реализованы лично соискателем, в реализации программы [184] участвовала ученица соискателя, Е.А. Круглова.

**Апробация работы.** Основные результаты работы обсуждались на следующих семинарах: «Теоретические и вычислительные проблемы задач математической физики» в ИМ СО РАН, 2020, 2021, 2022 гг. (рук. проф. А.М. Блохин, проф. Д.Л. Ткачёв); «Общеинститутский математический семинар» в ИМ СО РАН, 2021 г.; «Математический коллоквиум» в ИМ СО РАН, 2023 г. (видеозапись доступна на сайте [sobolevmath.tilda.ws](http://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. Ерманюк); «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); «Общеинститутский научный семинар ИВМиМГ СО РАН», 2024 г. (рук. чл.-корр. РАН Г.А. Михайлов, чл.-корр. РАН С.И. Кабанихин, проф. РАН М.А. Марченко); «Информационно-вычислительные технологии» в ФИЦ ИВТ, 2015, 2019, 2022, 2024 гг. (рук. акад. Ю.И. Шокин, проф. 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, проф. РАН 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).

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 «Wavocomplexity 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.

\*\*\*

Соискатель выражает глубокую признательность своему учителю доктору 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; докторá 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; младшие научные сотрудники НГУ Л.С. Брындин и 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 РНФ (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).

## Глава 1

# Методы приближения функций, их производных и интегралов в задачах с особенностями

Методы приближения, описанные в этой главе, нацелены на учёт запаса гладкости решений и особенностей, характерных для рассмотренных приложений, см. введение. Отметим, что в задачах с решениями высокой гладкости применение методов без насыщения автоматически обеспечивает наивысшую скорость сходимости метода. Этот факт основан на оценках погрешности наилучших полиномиальных приближений функций заданного порядка гладкости. Такие оценки, полученные Джексоном, Бернштейном и уточнённые впоследствии Фаваром, Зигмундом, Стечкиным, легли в основу идеи Колмогорова о приближении бесконечномерных классов функций конечномерными линейными подпространствами. Метрические характеристики классов функций, определяющие максимальную точность, с которой их элементы могут быть приближены элементами этих подпространств, получили название поперечников. На их основе даётся определение насыщаемых алгоритмов и алгоритмов без насыщения по Бабенко (см. приложение I, § I.4, а также [6, гл. 3, § 2, п. 5], [11, § 15]). Оценки некоторых поперечников и их замечательные следствия обсуждаются в [6, гл. 3, § 7], [11, гл. 4], [189].

Однако, как мы увидим в ходе исследований, сама природа нелинейных задач такова, что приближения их решений элементами линейных подпространств во многих случаях не являются эффективными. В таких случаях классические оценки линейных поперечников уже не представляются актуальными. Необходимо строить нелинейные методы приближения, основанные, например, на дробно-рациональных функциях, ДРФ, учитывающие дополнительную информацию о поведении решения. Эту информацию можно извлечь из физических свойств исследуемого процесса, из уравнений рассматриваемых моделей, а также из апостериорного анализа численных решений, который необходимо сопрягать с адаптивными подходами к аппроксимации.

Мы начнём с удобной модификации приближений без насыщения для решения краевых задач различных типов, см. § 1.1; опишем способ обобщения этих приближений для многомерных задач в канонических областях. Затем, построим дробно-рациональные барицентрические интерполяции, ДРБИ, которые представляют обобщения созданных приближений и позволяют адаптировать метод к особенности приближаемой функции; получим оценки погрешностей таких приближений, см. § 1.2. В § 1.3 разработана универсальная техника матричных аппроксимаций операторов дифференцирования и интегрирования, использующих разработанные приближения, и проведён анализ их основных свойств, отмеченных в § 0.3. Решение задач интегрирования с особенностями в окрестности границы области требует разработки специальных квадратурных формул, § 1.4 посвящён созданию и таким формул для анализа задач о течении полимерной жидкости с пограничными слоями и для расчёта интеграла столкновений, описывающего волновые взаимодействия в бозе-газе.

## § 1.1. Приближения без насыщения для решения краевых задач

Как известно, интерполяционные полиномы с узлами в нулях многочленов Чебышёва не имеют насыщения [190, теорема 9], а их константы Лебега демонстрируют наименьшую возможную (логарифмическую) асимптотику роста при увеличении числа узлов [191]. Указанные полиномы для приближения функции  $u(x) \in C[-1, 1]$  можно представить в виде

$$p_N(u, x) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j T_N(x)}{x - x_j^{\text{ch}}} u(x_j^{\text{ch}}), \quad (1.1)$$

где  $x_j^{\text{ch}}$  и  $\omega_j = N/T'_N(x_j^{\text{ch}})$  являются узлами и весами интерполяции соответственно:

$$x_j^{\text{ch}} = x_j^{\text{ch},z} = \cos\left(\frac{2j-1}{2N}\pi\right), \quad \omega_j = \omega_j^z = (-1)^{j-1} \sin\left(\frac{2j-1}{2N}\pi\right), \quad (1.2)$$

$j = \overline{1, N}$ ,  $T_N(x)$  – многочлен Чебышёва первого рода степени  $N$ .



Отметим, однако, что непосредственное применение (1.1), (1.2) к решению краевых задач для дифференциальных уравнений второго и более высоких порядков наталкивается на проблему, связанную с вырождением операторов, аппроксимирующих производные. Действительно, постоянная и линейная функции являются собственными для оператора дифференцирования второго порядка, соответствующими нулевому собственному значению. В [6, с. 277, 278] установлено, что применение приближений (1.1), (1.2) и метода коллокаций для решения задачи Дирихле ведет к системам линейных уравнений с вырожденными матрицами, спектр которых состоит из одного нулевого значения, которому отвечают лишь два собственных вектора, что делает такой подход абсолютно непригодным для вычислений.

На данный момент известны два способа решения этой проблемы. Первый состоит в применении интерполяционных полиномов с узлами в экстремумах  $T_N(x)$  на отрезке  $[-1, 1]$ . Такие полиномы имеют вид (1.1), но выражения для их узлов и весов отличаются от (1.2):

$$x_j^{\text{ch}} = x_j^{\text{ch},e} = \cos\left(\frac{j-1}{N-1}\pi\right), \quad \omega_j = \omega_j^e = \begin{cases} 2^{N-2}(-1)^{j-1}, & 2 \leq j \leq N-1, \\ 2^{N-3}(-1)^{j-1}, & j = 1, N. \end{cases}$$

Выражения для  $\omega_j^e$  получены в [192].

Отметим, что  $x_1^{\text{ch},e} = 1$ ,  $x_N^{\text{ch},e} = -1$ . При использовании метода коллокаций с узлами  $x_j^{\text{ch},e}$ ,  $j = \overline{1, N}$  для решения краевых задач на отрезке  $[-1, 1]$  это обстоятельство позволяет получить системы линейных уравнений, в которых краевые условия записаны в явном виде [193, ch. 6]. Однако обобщение этого метода для решения краевых задач размерности больше первой в области  $[-1, 1]^d := \{(x^1, \dots, x^d) : -1 \leq x^k \leq 1, k = \overline{1, d}\}$ ,  $d = 2, 3, \dots$  приводит к системе линейных уравнений с матрицей большого размера и сложной структуры [193, ch. 7] и, как следствие, к существенному росту вычислительных затрат.

Второй способ состоит в модификации полиномов (1.1) с узлами в нулях многочлена Чебышёва (далее, если не сказано иное, обозначаем  $x_j^{\text{ch}} = x_j^{\text{ch},z}$ ):

$$\tilde{p}_N(u, x) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j(x) \frac{\omega_j T_N(x)}{x - x_j^{\text{ch}}} u(x_j^{\text{ch}}) + \sigma_{-1}(x) u(-1) + \sigma_{+1}(x) u(1), \quad (1.3)$$

где функции  $\sigma_j(x)$ ,  $\sigma_{\pm 1}(x)$  обеспечивают реализацию однородных граничных условий типа Дирихле, Неймана или Неймана–Дирихле. Такие модификации

в простейшем случае описаны в книге [6, гл. 9, § 5, п. 1], где они использованы при разработке алгоритмов без насыщения для решения соответствующих краевых задач. Несколькими годами позже формулы подобного вида были опубликованы в работах зарубежных исследователей [194–196], причём акцент был сделан на их эффективности в спектральных задачах и на снижении обусловленности систем линейных уравнений при аппроксимации задач с производными высоких порядков (см. также [126, сек. 7.7]).

Другое преимущество состоит в том, что применение прямых (тензорных) произведений (1.3) позволяет свести решение краевой задачи в области  $[-1, 1]^d$  к матричному уравнению Сильвестра (при  $d = 2$ ) или к его тензорным обобщениям (при  $d \geq 3$ ) и использовать быстрые алгоритмы их решения (см. [169, 171] и п. 2.1.1). Такие алгоритмы позволили с высокой точностью и малыми вычислительными затратами решить ряд прикладных задач (см. гл. 3, 4, а также [162, 163, 197, 198]).

Пусть  $E_N(u) := \|u(x) - p_N(u, x)\| = \max_{x \in [-1, 1]} |u(x) - p_N(u, x)|$  – погрешность приближения (1.1). Напомним, что асимптотика  $E_N(u)$  при  $N \rightarrow \infty$  характеризуется величиной  $E_N^b(u) = \|u(x) - P_N^b(u)\|$ , где  $P_N^b(u) = P_N^b(u, x)$  – наилучшее приближение функции  $u(x)$  полиномом степени не выше  $N$ . Конкретно, имеет место неулучшаемая оценка погрешности – неравенство Лебега:

$$E_N(u) \leq (1 + \Lambda_N) \|u - P_N^b(u)\|, \quad \Lambda_N = \max_{x \in [-1, 1]} \Lambda_N(x) \leq 1 + \frac{2}{\pi} \log N, \quad (1.4)$$

где  $\Lambda_N$  называется константой Лебега, а  $\Lambda_N(x)$  – функцией Лебега интерполяционного полинома (1.1):

$$\Lambda_N(x) = \sum_{j=1}^N \left| \frac{T_N(x) \omega_j}{N(x - x_j^{\text{ch}})} \right|. \quad (1.5)$$

Оценка (1.4) и иные формулы для констант Лебега обсуждаются в [199–201].

Из (1.4) следует, что (1.1) сходится, если  $\|u - P_N^b(u)\| = o(1/\log(N))$  при  $N \rightarrow \infty$ . В силу неравенства Джексона, обобщённого на случай непериодических функций, такая асимптотика имеет место тогда и только тогда, когда функция  $u(x)$  лежит в классе Дини–Липшица [123, гл. IV, VI, теорема 2]. Отметим также, что скорость убывания  $E_N^b(u)$  с ростом  $N$  определяется линей-

ным поперечником класса функций, в котором лежит  $u(x)$ , размер которого выражается через порядок гладкости  $u(x)$  [190, теоремы 9, 10].

### 1.1.1. Приближения функций на отрезке

В диссертации приближение (1.3) используется для решения задач для ОДУ и УЧП с краевыми условиями следующих типов <sup>1</sup>.

1. Условия Дирихле  $u(\pm 1) = 0$ :

$$\sigma_j(x) = \frac{1 - x^2}{1 - (x_j^{\text{ch}})^2}, \quad \sigma_{\pm 1}(x) \equiv 0. \quad (1.6)$$

2. Условия Неймана  $u'(\pm 1) = 0$ :

$$\sigma_j(x) = \frac{(1 - x^2)^2}{(1 - (x_j^{\text{ch}})^2)^2}, \quad \sigma_{\pm 1}(x) = \frac{\chi_N^{\pm}}{4} \{1 + (1 \mp x)(1 + N^2)\} T_N(x), \quad (1.7)$$

где  $\chi_N^{\pm} = (\pm 1)^N (1 \pm x)^2$ .

3. Смешанные краевые условия:

$$\begin{aligned} \widehat{\alpha}u(1) + \widehat{\beta}u'(1) = 0, \quad \widehat{\gamma}u(-1) + \widehat{\theta}u'(-1) = 0, \quad \widehat{\beta} \neq 0, \quad \widehat{\theta} \neq 0: \\ \sigma_j(x) = \frac{(1 - x^2)^2}{(1 - (x_j^{\text{ch}})^2)^2}, \quad \sigma_{\pm 1}(x) = \frac{\chi_N^{\pm}}{4} \{1 + (1 \mp x)(1 \pm \kappa_{\pm} + N^2)\} T_N(x), \end{aligned} \quad (1.8)$$

где  $\kappa_{-1} = \widehat{\gamma}/\widehat{\theta}$ ,  $\kappa_{+1} = \widehat{\alpha}/\widehat{\beta}$ .

4. Условия Дирихле и смешанные условия  $u(-1) = 0$ ,  $\widehat{\alpha}u(1) + \widehat{\beta}u'(1) = 0$ :

$$\begin{aligned} \sigma_j(x) = \frac{(1 - x^2)(1 - x)}{(1 - (x_j^{\text{ch}})^2)(1 - x_j^{\text{ch}})}, \quad \sigma_{-1}(x) \equiv 0, \\ \sigma_{+1}(x) = \frac{1}{2}(1 + x) \{1 + (1 - x)(N^2 + 0.5 - \kappa_{+1})\} T_N(x). \end{aligned} \quad (1.9)$$

5. Условия Дирихле и смешанные условия  $u(1) = 0$ ,  $\widehat{\gamma}u(-1) + \widehat{\theta}u'(-1) = 0$ :

$$\begin{aligned} \sigma_j(x) = \frac{(1 - x^2)(1 + x)}{(1 - (x_j^{\text{ch}})^2)(1 + x_j^{\text{ch}})}, \quad \sigma_{+1}(x) \equiv 0, \\ \sigma_{-1}(x) = \frac{(-1)^N}{2}(1 - x) \{1 + (1 + x)(N^2 + 0.5 + \kappa_{-1})\} T_N(x). \end{aligned} \quad (1.10)$$

6. Условия Коши  $u(-1) = 0$ :

---

<sup>1</sup>Выражения для  $\sigma_j(x)$ ,  $\sigma_{\pm 1}(x)$  получены на базе формул из [6, гл. 9, § 5, п. 1]; см. также [171].

$$\sigma_j(x) = \frac{1+x}{1+x_j^{\text{ch}}}, \quad \sigma_{+1}(x) = \sigma_{-1}(x) = 0. \quad (1.11)$$

Отметим, что частными случаями условий типов 4, 5 являются условия Неймана–Дирихле: при  $\widehat{\alpha} = 0$ ,  $\widehat{\beta} = 1$  в условиях 4-го типа имеем  $u(-1) = 0$ ,  $u'(1) = 0$ ; при  $\widehat{\gamma} = 0$ ,  $\widehat{\theta} = 1$  в условиях 5-го типа имеем  $u(1) = 0$ ,  $u'(-1) = 0$ . Для реализации условий Неймана–Дирихле в приведённых выражениях для  $\sigma_{+1}(x)$  и  $\sigma_{-1}(x)$  нужно положить соответственно  $\kappa_{+1} = 0$  и  $\kappa_{-1} = 0$ .

**Замечание 1.1.** Приближения (1.3) с выражениями (1.6)–(1.11) обеспечивают автоматическую реализацию однородных граничных условий соответствующих типов. Однако если для решения  $\mathbf{u}(x)$  краевой задачи имеют место неоднородные условия, то следует использовать сумму:

$$\mathbf{u}(x) \approx \widetilde{p}_N(u, x) + v(x), \quad u(x) = \mathbf{u}(x) - v(x), \quad (1.12)$$

где  $v(x)$  – целая функция простого вида (обычно полином 1, 2 или 3-й степени), удовлетворяющая неоднородным условиям на границе. В случае краевой задачи на отрезке такая функция строится достаточно легко методом неопределённых коэффициентов.

Построение добавочных функций  $v$  для задач размерности 2 и выше представляет определённую проблему, для решения которой можно использовать различные подходы. Один из таких подходов, основанный на построении так называемых *трансфинитных интерполяционных формул*, описан в [202], см. также [126, sec. 6.7]. Другой подход использует произведения многочленов  $T_N$ , третий, реализованный в диссертации, описан в п. 1.3.4. Отметим, что имеются и другие подходы к реализации граничных условий [17].

Нетрудно проверить, что полиномы, построенные для условий 1-го и 6-го типов, являются интерполяциями функции  $u(x)$  на узлах  $\{x_0^{\text{ch}}, \dots, x_{N+1}^{\text{ch}}\}$  и  $\{x_0^{\text{ch}}, \dots, x_N^{\text{ch}}\}$  соответственно, где  $x_0^{\text{ch}} = -1$ ,  $x_j^{\text{ch}} = \cos \frac{(2j-1)\pi}{2N}$ ,  $j = \overline{1, N}$ ,  $x_{N+1}^{\text{ch}} = 1$ . Полиномы, построенные для условий 2–5-го типов, являются эрмитовыми интерполяциями  $u(x)$ . Эти полиномы для условий типа 2 и 3 имеют вид

$$\begin{aligned} \widetilde{p}_N^{H1}(u, x) &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j(x) \frac{\omega_j T_N(x)}{x - x_j^{\text{ch}}} u(x_j^{\text{ch}}) + \\ &+ \sigma_{-1}^{H1}(x) u(-1) + \sigma_1^{H1}(x) u(1) + s_{-1}^{H1}(x) u'(-1) + s_1^{H1}(x) u'(1), \quad \text{где} \end{aligned} \quad (1.13)$$

$$\sigma_{\pm 1}^{H1}(x) = \frac{\chi_N^{\pm}}{4} T_N(x) [(2 \mp x) + (1 \mp x)N^2], \quad s_{\pm 1}^{H1}(x) = \frac{\chi_N^{\pm}}{4} (x \mp 1) T_N(x). \quad (1.14)$$

Действительно, учитывая условия Неймана  $u'(\pm 1) = 0$ , из (1.13) получаем (1.3), (1.7); учитывая смешанные краевые условия, приводящие к равенствам  $u'(-1) = -\kappa_{-1}u(-1)$  и  $u'(1) = -\kappa_1u(1)$ , из (1.13) получаем (1.3), (1.8).

По аналогии для условия типа 4 полином (1.3), (1.9) можно представить в виде

$$\tilde{p}_N^{H2}(u, x) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j(x) \frac{\omega_j T_N(x)}{x - x_j^{\text{ch}}} u(x_j^{\text{ch}}) + \sigma_{+1}^{H2}(x) u(1) + s_{+1}^{H2}(x) u'(1), \quad (1.15)$$

а для условия типа 5 полином (1.3), (1.10) есть

$$\tilde{p}_N^{H2}(u, x) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j(x) \frac{\omega_j T_N(x)}{x - x_j^{\text{ch}}} u(x_j^{\text{ch}}) + \sigma_{-1}^{H2}(x) u(-1) + s_{-1}^{H2}(x) u'(-1), \quad (1.16)$$

где

$$\sigma_{\pm 1}^{H2}(x) = \frac{(\pm 1)^N}{2} (1 \pm x) \{1 + (1 \mp x)(N^2 + 0.5)\} T_N(x), \quad s_{\pm 1}^{H2}(x) = (\pm 1)^N (x \mp 1) T_N(x).$$

### 1.1.2. Приближение периодических функций

Как мы увидим далее, для учёта геометрических свойств многих прикладных задач требуются также методы приближения периодических функций. В связи с этим необходимо дополнить типы краевых условий, описанные в п. 1.1.1, следующими:

7. Условия периодичности (общий случай):  $u(t) \in \tilde{C}[0, 2\pi]$ . Применяется интерполяционный полином с ядром Дирихле

$$s_N(u, t) = \frac{2}{2N + 1} \sum_{j=0}^{2N} D_N(t - t_j) u(t_j), \quad (1.17)$$

где  $D_N(t) = \frac{\sin(N+0.5)t}{2\sin(t/2)}$  – ядро Дирихле,  $t_j = \frac{2\pi j}{2N+1}$  – узлы интерполяции,  $j = \overline{0, 2N}$ . Далее будем также использовать обозначение  $s_N^\beta = s_N(u, t + \beta)$ . Отметим, что узлы  $t_j$  расположены равномерно на интервале  $[0, 2\pi)$  и их число всегда нечётно. В [6, гл. 3, § 1, п. 4] построен полином для приближения периодических функций на чётном числе узлов, его также можно использовать в

рамках вычислительного алгоритма, предложенного в диссертации. Однако он имеет немного более сложный вид, поэтому далее будем пользоваться полиномом (1.17). Отметим также, что (1.17) аппроксимирует частичную сумму  $S_N(u, t)$  ряда Фурье функции  $u(t)$ , причём точность этой аппроксимации зависит от порядка гладкости  $u(t)$ . Действительно, следуя идеям Дирихле из доказательства теоремы о сходимости ряда Фурье [6, с. 88, 89], имеем

$$S_N(u, t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(\tau) D_N(t - \tau) d\tau.$$

Далее, используя формулу Эйлера – Маклорена, можно показать [203, сек. 2.9], что при  $u \in \mathcal{W}_\infty^r(M)$ ,  $\|s_N(u, t) - S_N(u, t)\| \leq M\tilde{C}_r N^{-r}$ . Комбинируя этот результат с теоремой I.12 из приложения I, заключаем, что приближение (1.17) не имеет насыщения.

8. Условия периодичности и чётности:  $u(t) \in \tilde{C}_+[0, 2\pi]$ . Применяется полином, полученный из (1.1) с помощью замены:  $x = \cos t$ :

$$s_N^e(u, t) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (-1)^{j-1} \frac{\sin t_j \cos(Nt)}{\cos t - \cos t_j} u(t_j), \quad t_j = \frac{(2j-1)\pi}{2N}. \quad (1.18)$$

9. Условия периодичности и нечётности:  $u(t) \in \tilde{C}_-[0, 2\pi]$ . Применяется полином, полученный из (1.1) с помощью замены:  $x = \cos t$ :

$$s_N^o(u, t) = \frac{1}{N+1} \sum_{j=1}^N (-1)^{j-1} \frac{\sin t_j \sin((N+1)t)}{\cos t - \cos t_j} u(t_j), \quad t_j = \frac{\pi j}{N+1}. \quad (1.19)$$

Нетрудно проверить, что этот полином является нечётным тригонометрическим интерполяционным полиномом с узлами  $t_j = \arccos x_j^{\text{ch}2}$ , где  $x_j^{\text{ch}2}$  – корни многочлена Чебышёва второго рода. Отметим, что для условий 8-го и 9-го типов узлы имеют равномерное распределение на отрезке  $[0, \pi]$ .

Константа Лебега (1.17) – это максимум модуля  $D_N$ . Её оценка, показывающая логарифмическую скорость роста, дана в классической теореме I.8. Константы Лебега приближений (1.1) и (1.18) совпадают и определяются теоремой I.9. Логарифмическую скорость роста константы Лебега (1.19) можно доказать по аналогии с теоремой I.9.

### 1.1.3. Приближение функций нескольких переменных

Приближения полиномами  $p_N$  и  $s_N$ , описанные в предыдущих разделах, работают в одномерных областях: на отрезке и на окружности соответственно. Для приближения функций нескольких переменных следует пользоваться прямыми (тензорными) произведениями  $p_N$  и  $s_N$ , причём конкретный вид  $p_N$  и  $s_N$  и самого тензорного произведения зависит от геометрии области и от типа краевых условий задачи, для решения которой строится приближение. Остановимся сначала на случае однородных граничных условий и рассмотрим в качестве примеров следующие задачи.

#### Задачи Дирихле в двумерных областях на плоскости $(y, z)$

1. Задачи в прямоугольнике  $D = \{(y, z) : a_1 \leq y \leq b_1, a_2 \leq z \leq b_2\}$ . Введём в области  $D$  сетку с узлами  $(y_j, z_k)$ , где  $y_j = \mathcal{L}_{[a_1, b_1]}(\cos \frac{2j-1}{2N}\pi) = \mathcal{L}_{[a_1, b_1]}(y_j^{\text{ch}})$ ,  $z_k = \mathcal{L}_{[a_2, b_2]}(\cos \frac{2k-1}{2K}\pi) = \mathcal{L}_{[a_2, b_2]}(z_k^{\text{ch}})$ ,  $j = \overline{1, N}$ ,  $k = \overline{1, K}$ ,  $\mathcal{L}_{[a_1, b_1]}$ ,  $\mathcal{L}_{[a_2, b_2]}$  – линейные отображения отрезка  $[-1, 1]$  на отрезки  $[a_1, b_1]$  и  $[a_2, b_2]$  соответственно. Расположения узлов показаны на рис. 1.1, а. Далее используем обозначения:  $u_{jk} = u(y_j, z_k)$ . Аппроксимация  $u(y, z)$  с применением прямого произведения интерполяционных полиномов (1.3) имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(u) = \mathcal{P}(u, y, z) &= \tilde{p}_N^1(u, y) \times \tilde{p}_K^1(u, z) = \\ &= \frac{1}{NK} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^K \frac{\sigma_j^1(\tilde{y}) \omega_j T_N(\tilde{y})}{\tilde{y} - y_j^{\text{ch}}} \frac{\sigma_k^1(\tilde{z}) \omega_k T_K(\tilde{z})}{\tilde{z} - z_k^{\text{ch}}} u_{jk}, \end{aligned} \quad (1.20)$$

где  $\tilde{y} = \mathcal{L}_{[a_1, b_1]}^{-1}(y)$ ,  $\tilde{z} = \mathcal{L}_{[a_2, b_2]}^{-1}(z)$ . Здесь и далее верхний индекс у  $\tilde{p}_N$  и  $\sigma_j$  означает номер типа краевых условий, зафиксированный в п. 1.1.1. Отметим, что при реализации других типов условий в силу  $\sigma_{\pm 1}(y) \neq 0$  прямое произведение имеет более громоздкий вид, но суть рассуждений от этого не меняется.

Аналогичным способом, используя сетки, координаты узлов которых определяются величинами  $y_j^{\text{ch}}$  и  $t_j$  и их образами под действием определённых отображений, и прямые произведения соответствующих полиномов, можно приближать решения следующих задач.

2. Задача в кольце  $D = \{(r, \varphi) : 0 < a \leq r \leq b, 0 \leq \varphi < 2\pi\}$ , полином  $\mathcal{P}(u, r, \varphi) = \tilde{p}_N^1(u, r) \times s_K(u, \varphi)$ , где  $(r, \varphi)$  – полярные координаты с полюсом в центре кольца, см. рис. 1.1, б.

3. Задача между двумя софокусными эллипсами с фокусами в точках  $(\pm\delta_0, 0)$ ,  $\delta_0 < 1$ , большой полуосью внешнего эллипса, равной 1, и малой полуосью внутреннего эллипса, равной  $r_0 = a$ :

$$D = \{(y, z) : y^2 + z^2/(1 - \delta_0^2) \leq 1, y^2/(a^2 + \delta_0^2) + z^2/a^2 \geq 1\},$$

полином  $\mathcal{P}(u, \alpha, \gamma) = \tilde{p}_N^1(u, \alpha) \times s_K(u, \gamma)$ , где  $(\alpha, \gamma)$  – эллиптические координаты, см. рис. 1.1, в:

$$y = \delta_0 \cosh \alpha \sin \gamma, \quad z = \delta_0 \sinh \alpha \cos \gamma, \quad (1.21)$$

$\alpha \in [\alpha^0, \alpha^1]$ ,  $\gamma \in [0, 2\pi)$ ,  $\alpha^0 = \ln \frac{r_0 + \sqrt{1+r_0^2-r_1^2}}{\sqrt{1-r_1^2}}$ ,  $\alpha^1 = \frac{1}{2} \ln \frac{1+r_0}{1-r_0}$ ,  $r_1 = \sqrt{1-\delta_0^2}$  – малая полуось внешнего эллипса.

4. Задача в области между двумя окружностями с центрами  $(y_0, 0)$ ,  $(y_1, 0)$  и радиусами  $r_0$  и 1 соответственно:

$$D = \{(y, z) : r_0 \leq (y - y_0)^2 + z^2, (y - y_1)^2 + z^2 \leq 1, y_1 - y_0 + r_0 < 1\},$$

полином  $\mathcal{P}(u, \alpha, \gamma) = \tilde{p}_N^1(u, \alpha) \times s_K(u, \gamma)$ , где  $(\alpha, \gamma)$  – биполярные координаты,  $\alpha \in [\alpha^0, \alpha^1]$ ,  $\gamma \in [0, 2\pi)$ , см. рис. 1.1, г:

$$y = \delta_0 \frac{\sinh \alpha}{\cosh \alpha - \cos \gamma}, \quad z = \delta_0 \frac{\sin \gamma}{\cosh \alpha - \cos \gamma}, \quad (1.22)$$

где  $\delta_0 = (1 - r_0^2)/\nu_0$ ,  $\nu_0 = \sqrt{d^2(1 + r_0^2) + 2dw}$ ,  $w = \sqrt{(1 - r_0^2)^2 + (dr_0)^2}$ ,

$$\alpha^0 = \operatorname{arcctanh}(y_0), \quad \alpha^1 = \operatorname{arcctanh}(y_1), \quad y_0 = \frac{dr_0^2 + w}{1 - r_0^2}, \quad y_1 = \frac{d + w}{1 - r_0^2},$$

$d = y_1 - y_0$  – расстояние между центрами окружностей.

5. Задача в круге  $D = \{(x, y) : x^2 + y^2 \leq 1\}$  требует некоторой модификации изложенного подхода. Необходимо перейти к полярным координатам и задать значения приближаемой функции  $u(r, \varphi)$  в узлах сетки  $(r_j, \varphi_k)$ , где  $r_j = \cos \frac{2j-1}{2N-1}\pi$ ,  $j = \overline{1, N/2}$ , где  $N \geq 2$  – чётное число,  $\varphi_k$  – нули ядра Дирихле  $D_K(t)$ ,  $k = \overline{0, K}$ , см. овалы на рис. 1.1, д. Для приближения значения  $u$  в произвольной точке  $(\tilde{r}, \tilde{\varphi}) \in D$  нужно, используя ряд  $s_N$ , сначала вычислить значения в точках, изображённых на рис. 1.1, д малыми квадратами:

$$u_j^0(\tilde{\varphi}) = u(r_j, \tilde{\varphi}) \approx s_{jK}(u, \tilde{\varphi}) = \frac{2}{2K+1} \sum_{k=0}^{2K} D_K(\varphi - \varphi_k) u(r_j, \varphi_k), \quad j = \overline{1, N/2},$$

затем рассчитать значения в точках, изображённых звёздами, лежащими на луче  $l_2$ , полученном поворотом луча  $l_1$  на угол  $\pi$ :



$$u_j^\pi(\tilde{\varphi}) = u(r_j, \tilde{\varphi} + \pi) \approx s_{jK}^\pi(u, \tilde{\varphi}) = s_{jK}(u, \tilde{\varphi} + \pi).$$

Найденный таким образом набор значений  $\{u_j^0, u_j^\pi\}$  нужно использовать для интерполяции  $u(r, \varphi)$  по переменной  $r$ . Тогда приходим к полиному:

$$\mathcal{P}(u, \tilde{r}, \tilde{\varphi}) = \frac{1}{N} \left( \sum_{j=1}^{N/2} \sigma_j^1(\tilde{r}) \frac{\omega_j T_N(\tilde{r})}{\tilde{r} - r_j^{\text{ch}}} u_j^0(\tilde{\varphi}) + \sum_{j=N/2+1}^N \sigma_j^1(\tilde{r}) \frac{\omega_j T_N(\tilde{r})}{\tilde{r} - r_j^{\text{ch}}} u_j^\pi(\tilde{\varphi}) \right).$$

Используя очевидные свойства весов:  $\omega_{N/2+s} = -\omega_{N/2-s+1}$ ,  $s = \overline{1, N/2}$  и функций  $\sigma_j^1(\tilde{r})$ :  $\sigma_{N/2+s}^1 = -\sigma_{N/2-s+1}^1$ ,  $s = \overline{1, N/2}$  (аналогичными свойствами обладают функции  $\sigma_j^2(\tilde{r})$ ,  $\sigma_j^3(\tilde{r})$ ), а также симметрию в расположении узлов  $r_j$  относительно нуля, получаем

$$\mathcal{P}_{NK}^{\text{circ}} = \mathcal{P}(u, \tilde{r}, \tilde{\varphi}) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N/2} \omega_j \sigma_j^1(\tilde{r}) T_N(\tilde{r}) \left( \frac{u_j^0(\tilde{\varphi})}{r - r_j^{\text{ch}}} - \frac{u_j^\pi(\tilde{\varphi})}{r + r_j^{\text{ch}}} \right). \quad (1.23)$$

**Замечание 1.2.** В работе [6, задачи к § 5, гл. 3] показано, что порядок погрешности интерполяций вида (1.23) есть  $\mathcal{N}^{\tilde{\nu}/2} \log^2 \mathcal{N}$ , где  $\mathcal{N} = (N/2)(2K+1)$ ,  $\tilde{\nu}$  – сумма порядков гладкости  $u(r, \varphi)$  как функции переменной  $r$  и  $\varphi$ . Также отмечено, что если  $D$  – произвольная односвязная область с бесконечно гладкой границей, то можно построить конформное отображение  $\overline{\mathfrak{F}}(r, \varphi)$  единичного круга в  $D$  и для приближения функции  $u$  в  $D$  использовать полином  $\mathcal{P}^{\text{circ}}(u \circ \overline{\mathfrak{F}}, \tilde{r}, \tilde{\varphi}) \circ \overline{\mathfrak{F}}^{-1}$ , что даёт те же оценки скорости сходимости.

6. Задача в треугольнике с вершинами  $A = (y_1, z_1)$ ,  $B = (y_2, z_2)$ ,  $C = (y_3, z_3)$  (см. рис. 1.1, е) решается с помощью построения отображения  $\overline{\mathfrak{F}} = \overline{\varphi} \circ \overline{\psi}$ , где  $\overline{\varphi}$  отображает стандартный треугольник  $R_{tr}$  с вершинами  $(-1, 1)$ ,  $(-1, -1)$ ,  $(1, -1)$  на плоскости  $(\hat{u}, \hat{v})$  в  $\triangle ABC$ ;  $\overline{\psi}$  отображает стандартный квадрат  $R_{sq} = \{(\hat{y}, \hat{z}) : -1 \leq \hat{y}, \hat{z} \leq 1\}$  на плоскости  $(\hat{y}, \hat{z})$  в  $R_{tr}$  (рис. 1.2 и [204]). Таким образом,  $\overline{\mathfrak{F}} : R_{sq} \rightarrow \triangle ABC$ .

Формулы  $\overline{\psi}$ :

$$\hat{u} = (3\hat{y} - \hat{z}(\hat{y} + 1) - 1)/4, \quad \hat{v} = (3\hat{z} - \hat{y}(\hat{z} + 1) - 1)/4. \quad (1.24)$$

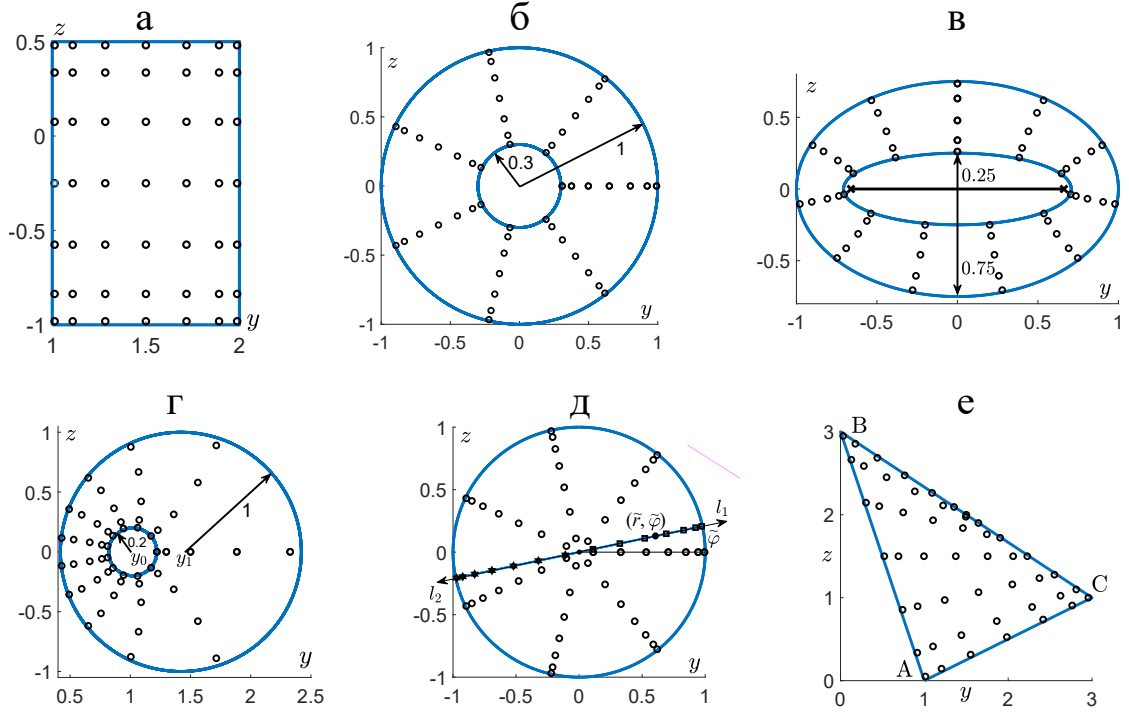
Формулы  $\overline{\varphi}$ :

$$y = \sum_{i=1}^3 y_i L_i(\hat{u}, \hat{v}), \quad z = \sum_{i=1}^3 z_i L_i(\hat{u}, \hat{v}), \quad (1.25)$$

$$L_1(\hat{u}, \hat{v}) = -\frac{1}{2}(\hat{u} + \hat{v}), \quad L_2(\hat{u}, \hat{v}) = \frac{1}{2}(1 + \hat{u}), \quad L_3(\hat{u}, \hat{v}) = \frac{1}{2}(1 + \hat{v}).$$

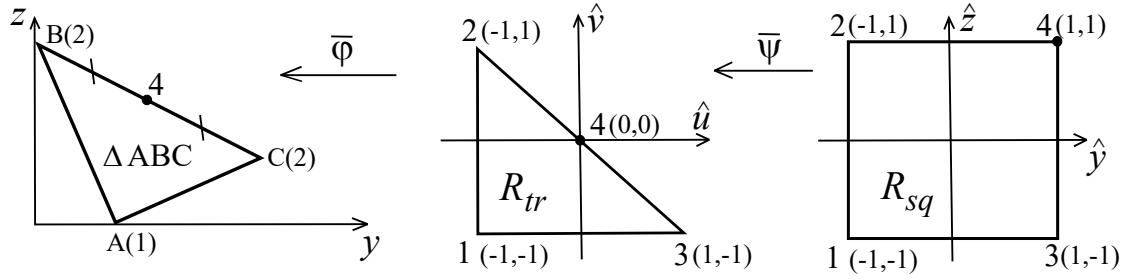
Для приближения функции  $u(y, z)$  в  $\triangle ABC$  можно использовать полином

$$\mathcal{P}(u, y, z) = [\tilde{p}_N^1(u \circ \bar{\mathfrak{F}}, \hat{y}) \times \tilde{p}_K^1(u \circ \bar{\mathfrak{F}}, \hat{z})] \circ \bar{\mathfrak{F}}^{-1}. \quad (1.26)$$



**Рис. 1.1.** Области на плоскости и узлы интерполяционных полиномов  $\mathcal{P}(u, y, z)$  (случаи а, б, д, е –  $N = 7, K = 4$ ; случаи в, г –  $N = 5, K = 6$ ): а – прямоугольник  $\{(y, z) : 1 \leq y \leq 2, -1 \leq z \leq 0.5\}$ ; б – кольцо с внутренним контуром радиуса  $a = 0.3$  и внешним –  $b = 1$ ; в – область между софокусными эллипсами при  $\delta_0 = \sqrt{7}/4$  с малыми полуосями  $a = 0.25$  и  $0.75$ ; г – область между двумя окружностями радиусов  $r_0 = 0.2$  и  $1$  при  $d = 0.4$  ( $y_0 \approx 1.02, y_1 \approx 1.42$ ); д – круг радиуса  $1$ ; е – треугольник с вершинами  $A = (1, 0), B = (0, 3), C = (3, 1)$

Отметим, что  $\bar{\mathfrak{F}}(\hat{y}, \hat{z})$  является целой, поэтому композиция  $u \circ \bar{\mathfrak{F}}$  в приближении (1.26) не влияет на его скорость сходимости. Однако вычисление  $\bar{\mathfrak{F}}^{-1}$  требует обращения квадратичных функций (1.24), что приводит к особенностям в исходных переменных  $y, z$ , поэтому, такая замена переменных может привести к дополнительным сложностям при решении дифференциальных уравнений. При этом она является эффективной для приближения функций и расчёта интегралов в треугольных областях.



**Рис. 1.2.** Отображение  $\bar{\mathfrak{F}}$  стандартного квадрата  $R_{sq}$  в треугольник ABC с последовательным применением отображений  $\bar{\psi}$  и  $\bar{\varphi}$

### Задачи Дирихле на поверхностях в пространстве $(x, y, z)$

1. Задача на торе  $D = \{(\varphi, \psi) : 0 \leq \varphi, \psi < 2\pi\}$ , полином  $\mathcal{P}(u, \varphi, \psi) = s_N(u, \varphi) \times s_K(u, \psi)$ .

2. Задача на ограниченной цилиндрической поверхности:  $D = \{(x, y, z) : x^2 + y^2 = 1, -1 \leq z \leq 1\}$ , полином  $\mathcal{P}(u, \varphi, z) = s_N(u, \varphi) \times \tilde{p}_K^1(u, z)$ , где использована угловая координата  $\varphi$ :  $0 \leq \varphi < 2\pi$  в плоскостях  $z = \text{const}$ .

3. Задача на сфере:  $D = \{(x, y, z) : x^2 + y^2 + z^2 = 1\}$ . Приближения, используемые для решения, строятся по аналогии со случаем задачи в круге. При этом используется сферическая система координат  $(\varphi, \psi)$ , где  $0 \leq \varphi < 2\pi$ ,  $0 \leq \psi \leq \pi$  (точки 0 и  $\pi$  соответствуют полюсам сферы). Построим на сфере сетку  $(\varphi_j, \psi_k)$ , где  $\varphi_j$  – нули ядра Дирихле  $D_N$ ,  $j = \overline{0, 2N}$  ( $\varphi_j, \psi_k$ ),  $\psi_k = \frac{2\pi k}{2K+1}$ ,  $k = \overline{0, K}$ , и заметим, что поскольку  $\psi_0 = 0$  – полюс сферы, то точки  $(\varphi_j, \psi_0)$  для всех  $j = \overline{0, 2N}$  являются одной и той же полярной точкой, поэтому значения  $u(\varphi_j, \psi_0) = u_P$  совпадают.

При фиксированном  $\varphi = \tilde{\varphi}$  рассчитаем

$$u_k^0(\tilde{\varphi}) \approx s_{kN}(u, \tilde{\varphi}), \text{ и } u_k^\pi(\tilde{\varphi}) \approx s_{kN}^\pi(u, \tilde{\varphi}), \quad k = \overline{1, K}.$$

Для приближения функции в точке  $(\tilde{\varphi}, \tilde{\psi})$  на сфере имеем полином

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{sphe} &= \mathcal{P}_{NK}^{sphe}(u, \tilde{\varphi}, \tilde{\psi}) = \frac{2D_K(\tilde{\psi})}{2K+1} u_{P+} \\ &+ \frac{2}{2K+1} \sum_{k=1}^K [D_K(\tilde{\psi} - \psi_k) u_k^0(\tilde{\varphi}) + D_K(\tilde{\psi} + \psi_k) u_k^\pi(\tilde{\varphi})]. \end{aligned}$$

При условии, что по переменной  $\psi$  функция  $u(\varphi, \psi)$  является нечётной

периодической функцией, приближение можно существенно упростить:

$$\mathcal{P}^{spher} = \mathcal{P}_{NK}^{spher}(u, \tilde{\varphi}, \tilde{\psi}) = s_N(u, \tilde{\varphi}) \times s_N^o(u, \tilde{\psi}).$$

### Задачи Дирихле в пространстве $(x, y, z)$

1. Задача в параллелепипеде  $D = \{(x, y, z) : a_1 \leq x \leq b_1, a_2 \leq y \leq b_2, a_3 \leq z \leq b_3\}$ , по переменным  $x, y, z$  строятся сетки  $x_j = \mathcal{L}_{[a_1, b_1]}(\cos \frac{2j-1}{2N}\pi) = \mathcal{L}_{[a_1, b_1]}(x_j^{ch})$ ,  $y_k = \mathcal{L}_{[a_2, b_2]}(\cos \frac{2k-1}{2K}\pi) = \mathcal{L}_{[a_2, b_2]}(y_k^{ch})$ ,  $z_m = \mathcal{L}_{[a_3, b_3]}(\cos \frac{2m-1}{2M}\pi) = \mathcal{L}_{[a_3, b_3]}(z_m^{ch})$ ,  $m = \overline{1, M}$  и строится полином  $\mathcal{P}(u, x, y, z) = \tilde{p}_N^1(u, x) \times \tilde{p}_K^1(u, y) \times \tilde{p}_M^1(u, z)$ .

2. Задача в цилиндрическом слое  $D = \{(x, y, z) : 0 < a \leq x^2 + y^2 + z^2 \leq b, \}$ , полином  $\mathcal{P}(u, r, \varphi, z) = \tilde{p}_N^1(u, r) \times s_K(u, \varphi) \times \tilde{p}_M^1(u, z)$ , где использованы полярные координаты  $(r, \varphi)$ :  $a \leq r \leq b$ ,  $0 \leq \varphi < 2\pi$  в плоскостях  $z = \text{const}$  с полюсом на оси  $z$ .

3. Задача в сферическом слое  $D = \{(x, y, z) : 0 < a \leq x^2 + y^2 \leq b, -1 \leq z \leq 1\}$  – полином  $\mathcal{P}(u, r, \varphi, \psi) = \tilde{p}_N^1(u, r) \times \mathcal{P}_{KM}^{spher}(u, \varphi, \psi)$ , построенный в сферической системе координат  $(r, \varphi, \psi)$ ,  $0 \leq \varphi < 2\pi$ ,  $0 \leq \psi \leq \pi$ ,  $a \leq r \leq b$ .

**Задачи в гиперпространстве.** По аналогии с формулами, описанными выше, можно построить аппроксимации для решения краевых задач в гиперкубе, на  $d$ -мерном торе, на  $d$ -мерной сфере, в симплексе. Отметим только, что решения краевых задач для уравнений эллиптического типа в областях с негладкой границей могут иметь существенные особенности, см. п. 3 в § 0.2, что потребует адаптации построенных сеток (об одном из способов такой адаптации написано в § 1.2).

Подчеркнём, что описанные геометрические формы не исчерпывают всех возможных вариантов областей краевых задач, для решения которых можно применять подход, разработанный в диссертации. Они служат лишь несколькими типичными примерами. Более общий подход к решению задачи в области произвольной геометрии, допускающей гладкую параметризацию, использует криволинейные координаты. Некоторые аспекты применения таких координат, включающие вывод выражений для параметров Ляме, символов Кристоффеля, а также компонент метрического тензора и тензора Римана–Кристоффеля для решения задач механики, см. в [205, гл. 4, § 3], [206, гл. 1].

## § 1.2. Дробно-рациональные интерполяции. Барицентрическая формула и ее модификации

Идея о представлении интерполяционных полиномов в барицентрической форме восходит к работам Лагранжа и Якоби. Некоторые важные результаты в этом направлении были опубликованы в первой половине XX в. (см. [207–209] и обзор в книге [18, ch. 5]). Однако широкое распространение в вычислительной практике такие приближения получили после работы Сэлзера (Salzer) [192]. Здесь было впервые получено барицентрическое представление для интерполяционного полинома (1.1), которое оказалось простым и чрезвычайно эффективным с вычислительной точки зрения:

$$p_N(u, x) = \frac{\sum_{j=1}^N \frac{\omega_j u(x_j^{\text{ch}})}{x - x_j^{\text{ch}}}}{\sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{x - x_j^{\text{ch}}}}. \quad (1.27)$$

Представление (1.27) получено с помощью деления (1.1) на тождество  $1 = \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{x - x_j^{\text{ch}}}$ , при этом полином  $T_N(x)$  сократился.

Основное преимущество барицентрического представления для интерполяционного полинома состоит в высокой скорости вычислений: для расчета приближенного значения функции  $u(x)$  в любой точке  $x \in [-1, 1]$ ,  $x \neq x_j^{\text{ch}}$  требуется порядка  $O(N)$  операций, что позволяет строить на ЭВМ полиномиальные приближения степени  $10^6$  с точностью, близкой к погрешности машинной арифметики, см. [18, ch. 5]. Алгоритмы, использующие такие формулы, и их преимущества подробно обсуждаются в [19, 128, 144].

В общем случае, когда узлы и веса не связаны специальным образом, нетрудно видеть, что (1.27) представляет дробно-рациональное приближение. Положим сначала, что приближаемая функция является аналитической, и ее продолжение в комплексную плоскость имеет *изолированную особую точку*, лежащую на малом расстоянии от отрезка  $[-1, 1]$ . Следуя [20], зафиксируем значения весов  $\omega_j$  и будем адаптировать положения узлов  $x_j^{\text{ch}}$  к положению особой точки функции. Для этого применим отображение  $g : [-1, 1] \rightarrow [-1, 1]$ , обладающее свойствами, описанными в теореме из [20].

**Теорема 1.1.** Пусть  $\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2$  являются подобластями  $\mathbb{C}$ , содержащими отрезок  $I = [-1, 1]$ ,  $g$  – конформное отображение из  $\mathcal{D}_1$  в  $\mathcal{D}_2$ , такое что

$g(I) = I$ , и функция  $u : \mathcal{D}_2 \rightarrow \mathbb{C}$  такова, что композиция  $u \circ g : \mathcal{D}_1 \rightarrow \mathbb{C}$  является аналитической внутри эллипса Бернштейна  $\mathfrak{E}_{\tilde{\rho}}$ , где  $\tilde{\rho}$  – сумма полюсов эллипса. Рассмотрим интерполяцию

$$r_N(u, x) = \frac{1}{\mathfrak{D}_N(x)} \sum_{j=1}^N J_j(x) u(x_j), \quad J_j(x) = \frac{\omega_j}{x - x_j}, \quad \mathfrak{D}_N(x) = \sum_{j=1}^N J_j(x), \quad (1.28)$$

где  $x_j = g(x_j^{\text{ch}})$ . Тогда для любого  $x \in I$  при  $N \rightarrow \infty$  имеет место следующее асимптотическое представление погрешности:

$$|u(x) - r_N(u, x)| = O(\tilde{\rho}^{-N}).$$

Идея построения отображения  $g$  состоит в том, чтобы «унести» особую точку приближаемой функции в комплексной плоскости на достаточно большое расстояние от отрезка  $[-1, 1]$ , что приводит к существенному увеличению значения  $\tilde{\rho}$  и, как следствие, скорости сходимости приближения.

Далее приближение (1.28) будем называть дробно-рациональной барицентрической интерполяцией, ДРБИ. Отметим, что непосредственное применение ДРБИ к решению краевых задач для ОДУ и УЧП наталкивается на те же проблемы, что и применение  $p_N(u, x)$ : подстановка таких приближений в дифференциальное уравнение с последующим применением метода коллокаций ведет к системам с вырожденными матрицами, спектр которых состоит из одного нулевого значения, которому отвечают лишь два собственных вектора, что делает такой подход непригодным для вычислений.

Для разработки алгоритмов решения краевых задач по аналогии с п. 1.1.1 выполним модификацию ДРБИ:

$$\tilde{r}_N(u, x) = \frac{1}{\mathfrak{D}_N(x)} \sum_{j=1}^N \zeta_j^*(x) J_j(x) u(x_j) + \zeta_{-1}(x) u(-1) + \zeta_1(x) u(1), \quad (1.29)$$

где функции  $\zeta_j^*(x)$ ,  $\zeta_{\pm 1}(x)$  задаются так, чтобы приближение  $\tilde{r}_N(u, x)$  автоматически удовлетворяло однородным граничным условиям того же типа, что и условия краевой задачи.

1<sub>r</sub>. Для условий Дирихле  $u(\pm 1) = 0$ :

$$\zeta_j^*(x) = \frac{1 - x^2}{1 - x_j^2}, \quad \zeta_{\pm 1}(x) \equiv 0.$$

2<sub>r</sub>. Для условий Неймана  $u'(\pm 1) = 0$ :

$$\zeta_j^*(x) = \frac{(1-x^2)^2}{(1-x_j^2)^2}, \quad \zeta_{\pm 1}(x) = \pm \frac{(x \pm 1)^2}{4\mathfrak{D}_N(x)} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j [x_j(x \mp 2) \mp 2x + 3]}{(1 \mp x_j)^2}.$$

3<sub>r</sub>. Для смешанных условий  $\widehat{\alpha}u(1) + \widehat{\beta}u'(1) = 0$ ,  $\widehat{\gamma}u(-1) + \widehat{\theta}u'(-1) = 0$ ,  $\widehat{\beta} \neq 0$ ,  $\widehat{\theta} \neq 0$  функция  $\zeta_j^*(x)$  определяется точно так же, как в предыдущем пункте:

$$\zeta_{\pm 1}(x) = \frac{(x \pm 1)^2}{4\mathfrak{D}_N(x)} \sum_{j=1}^N \omega_j \frac{x_j [\kappa_{\pm 1}(x \mp 1) \pm x - 2] - 2x \pm 3 + \kappa_{\pm 1}(1 \mp x)}{(1 \mp x_j)^2},$$

где  $\kappa_{+1} = \widehat{\alpha}/\widehat{\beta}$ ,  $\kappa_{-1} = \widehat{\gamma}/\widehat{\theta}$ .

4<sub>r</sub>. Условия Дирихле и смешанные условия  $u(-1) = 0$ ,  $\widehat{\alpha}u(1) + \widehat{\beta}u'(1) = 0$ :

$$\zeta_j^*(x) = \frac{(1-x^2)(1-x)}{(1-x_j^2)(1-x_j)}, \quad \zeta_{-1}(x) \equiv 0,$$

$$\zeta_{+1}(x) = \frac{x+1}{4\mathfrak{D}_N(x)} \sum_{j=1}^N \omega_j \frac{x_j(x-3) - 3x+5 + 2\kappa_{+1}(1-x)(1-x_j)}{(1-x_j)^2}.$$

5<sub>r</sub>. Условия Дирихле и смешанные условия  $u(1) = 0$ ,  $\widehat{\gamma}u(-1) + \widehat{\theta}u'(-1) = 0$ :

$$\zeta_j^*(x) = \frac{(1-x^2)(1+x)}{(1-x_j^2)(1+x_j)}, \quad \zeta_{+1}(x) \equiv 0,$$

$$\zeta_{-1}(x) = \frac{x-1}{4\mathfrak{D}_N(x)} \sum_{j=1}^N \omega_j \frac{x_j(x+3) + 3x+5 - 2\kappa_{-1}(1+x)(1+x_j)}{(1+x_j)^2}.$$

6<sub>r</sub>. Условия Коши  $u(-1) = 0$ :

$$\zeta_j^*(x) = \frac{1+x}{1+x_j}, \quad \zeta_{\pm 1}(x) = 0.$$

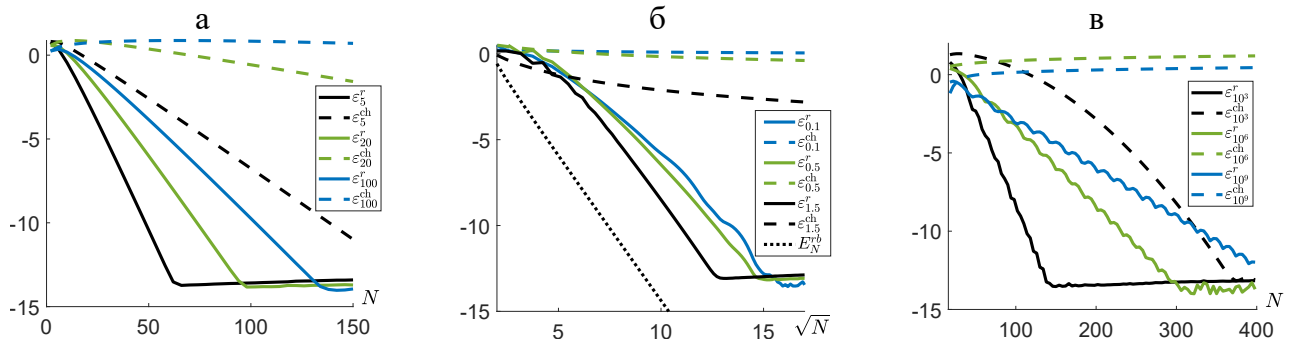
Заметим, что, в зависимости от свойств искомого решения, существует множество подходов к построению отображения  $g(x)$  (см., например, [128, 130, 210]). Однако в диссертации применяется формула

$$g(x) = \delta + \varepsilon \sinh \left\{ (a^- + a^+) \frac{x-1}{2} + a^- \right\}, \quad a^\pm = \sinh^{-1} \frac{1 \pm \delta}{\varepsilon}, \quad (1.30)$$

где выражение « $\sinh^{-1}$ » обозначает обратную функцию к гиперболическому синусу. Такой выбор функции  $g$  обусловлен возможностью явного указания

координат  $(\delta, \varepsilon) \in \mathbb{C}$  особой точки решения. Действительно, при  $\varepsilon \ll 1$  несложно видеть, что  $g$  по построению отображает точку  $(\delta, \varepsilon)$  в точку, лежащую значительно дальше от отрезка  $[-1, 1]$ . Это приводит к существенному росту значения  $\tilde{\rho}$  в теореме 1.1.

Проведём несколько численных экспериментов по приближению функций с особенностями. На рис. 1.3, а показаны зависимости десятичных логарифмов погрешности приближений функции  $f_T^1(x) = (1 + (\tilde{\beta}x)^2)^{-1} - (1 + \tilde{\beta}^2)^{-1}$  от числа узлов  $N$ , построенные при использовании (1.3) ( $\varepsilon_{\tilde{\beta}}^{\text{ch}}$ , пунктир) и (1.29), (1.30) ( $\varepsilon_{\tilde{\beta}}^r$ , сплошные линии) с условиями первого типа. Функция  $f_T^1(x)$  является обобщением известного примера Рунге, для которого  $\tilde{\beta} = 5$ . Аналитическое продолжение этой функции имеет полюса в точках  $\pm i/\tilde{\beta} \in \mathbb{C}$ , поэтому в формуле (1.30) заданы  $\delta = 0$  и  $\varepsilon = 1/\tilde{\beta}$ . Графики на рис. 1.3, а показывают значительное увеличение скорости сходимости ДРБИ по сравнению с полиномиальными приближениями за счёт роста  $\tilde{\rho}$ , особенно при больших  $\tilde{\beta}$ .



**Рис. 1.3.** Десятичные логарифмы погрешностей (1.3) ( $\varepsilon_{\tilde{p}}^{\text{ch}}$ , пунктир) и (1.29) ( $\varepsilon_{\tilde{p}}^r$ , сплошные линии) с условиями первого типа: для функции  $f_T^1(x)$  при  $\tilde{p} = \tilde{\beta} = 5, 20, 100$  (а); для функции  $f_T^2(x)$  при  $\tilde{p} = \tilde{\alpha} = 0.1, 0.5, 1.5$  (точки соответствуют (0.20) с  $\tilde{\alpha} = 1.5$ ) (б); для функции  $f_T^3(x)$  при  $\tilde{p} = \tilde{\gamma} = 10^3, 10^6, 10^9$  (в)

Отметим, что при наличии разрыва у некоторой производной приближаемой функции в точке  $x_d \in [-1, 1]$ , в формуле (1.30) следует задать  $\delta = x_d$  и установить малое значение  $\varepsilon$ . В таком случае (1.29), (1.30) имеет скорость сходимости, асимптотически близкую к скорости наилучшего дробно-рационального приближения. На рис. 1.3, б показаны зависимости логарифмов ( $\varepsilon_{\tilde{\alpha}}^r$  и  $\varepsilon_{\tilde{\alpha}}^{\text{ch}}$ ) погрешностей приближения функции  $f_T^2(x) = |x|^{\tilde{\alpha}} - 1$ ,  $\tilde{\alpha} \in \mathbb{R}^+$ , лежащей в классе Гёльдера, от  $\sqrt{N}$ . Здесь параметры отображения (1.30) были фиксированы:  $\delta = 0$ ,  $\varepsilon = 10^{-15}$ . Линия из точек, соответствующая асимп-



тотике (0.20) для  $\tilde{\alpha} = 1.5$ , параллельна  $\varepsilon_{\tilde{\alpha}}^r$ . Приближение (1.29) сходится существенно быстрее (1.3) особенно при малых  $\tilde{\alpha}$ .

Наконец, существенную важность для моделирования слаботурбулентных процессов в бозе-газах при наличии накачки энергии имеют приближения целых функций с экспоненциальными пиками, см. (2.30). На рис. 1.3, в изображены зависимости логарифмов ( $\varepsilon_{\tilde{\gamma}}^r$  и  $\varepsilon_{\tilde{\gamma}}^{\text{ch}}$ ) погрешностей приближения функции  $f_T^3(x) = \exp(-\tilde{\gamma}x^2) - \exp(-\tilde{\gamma})$ ,  $\tilde{\gamma} \gg 1$ . Здесь параметр  $\delta = 0$ , а  $\varepsilon$  был подобран так, чтобы обеспечить максимальную скорость сходимости (при  $\tilde{\gamma} = 10^3$  задали  $\varepsilon = 0.09$ ,  $\tilde{\gamma} = 10^6 - \varepsilon = 2 \times 10^{-3}$ ,  $\tilde{\gamma} = 10^9 - \varepsilon = 3 \times 10^{-5}$ ). Видно, что приближения (1.29) дают погрешность, близкую к точности машинной арифметики при тех  $N$ , для которых сходимости (1.3) ещё не наблюдается.

Формула (1.30) допускает естественное обобщение на случай произвольного количества особых точек, см. [143]. Больше деталей о построении  $g(x)$  можно найти в [128].

Условия  $1_r-6_r$  совпадают с 1-6 из п. 1.1.1, а модификация ДРБИ (1.29) схожа с (1.3). Для этих приближений имеет место следующий результат.

**Теорема 1.2.** *Если функция  $g=id$  – тождественное отображение отрезка  $I = [-1, 1]$  в себя, то приближения (1.29) и (1.3) совпадают для условий каждого из типов 1-6, описанных в п. 1.1.1.*

Доказательство теоремы 1.2, приведённое в приложении II, основано на следующей лемме.

**Лемма 1.1.** *Зададим узлы  $x_j^{\text{ch}}$  и веса  $\omega_j$ ,  $j = \overline{1, N}$  по формуле (1.2). Тогда*

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{1 - x_j^{\text{ch}}} = 1, \quad \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1 - x_j^{\text{ch}})^2} = N^2 \quad (1.31)$$

*и*

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{1 + x_j^{\text{ch}}} = (-1)^{N+1}, \quad \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1 + x_j^{\text{ch}})^2} = (-1)^{N+1} N^2. \quad (1.32)$$

Адаптивные свойства модифицированных ДРБИ при решении краевых задач с особенностями характеризуются следующей теоремой.

**Теорема 1.3.** Пусть  $g(x)$  – отображение отрезка  $[-1, 1]$  в себя, удовлетворяющее условиям из теоремы 1.1, функция  $u(x) \in C[-1, 1]$  удовлетворяет однородным граничным условиям одного из типов 1–6 из п. 1.1.1. Тогда для приближения (1.29) имеют место представление

$$\tilde{r}_N(u, x) \approx \mathbf{p}_N\left(\frac{u \circ g}{g'}, x\right) / p_N\left(\frac{1}{g'}, x\right) \quad (1.33)$$

и оценка погрешности следующего вида:

$$\|\tilde{r}_N(u, x) - u(x)\| \leq \|g'\| \frac{E_{\mathbf{p}_N}\left(\frac{u \circ g}{g'}\right) + \Psi_N^g \|u\|}{1 - \|g'\| \varepsilon_N^g}, \quad (1.34)$$

где для условий 1, 6,  $\mathbf{p}_N(u, x)$  – полином вида (1.3), для условий 2, 3,  $\mathbf{p}_N(u, x)$  – полином вида (1.13), для условий 4, 5,  $\mathbf{p}_N(u, x)$  – полином вида (1.15) или (1.16);  $p_N(u, x)$  определён формулой (1.1);  $E_{\mathbf{p}_N}\left(\frac{u \circ g}{g'}\right)$  – погрешность приближения функции  $\frac{u \circ g}{g'}$  полиномом  $\mathbf{p}_N$ ;  $\Psi_N^g = [\hat{c}_N \varepsilon_N^g + \hat{c} \hat{\varepsilon}_N^g](1/\|g'\| + \varepsilon_N^g) + \varepsilon_N^g$ ,  $\varepsilon_N^g = \|\varepsilon_N^g(x)\|$ ,  $\hat{\varepsilon}_N^g = \|\hat{\varepsilon}_N^g(x)\|$ ,  $\varepsilon_N^g(x) = \frac{1}{g'(x)} - p_N\left(\frac{1}{g'}, x\right)$ ,  $\hat{\varepsilon}_N^g(x) = (\varepsilon_N^g)'(x)$ ,  $\hat{c}_N, \hat{c}$  – некоторые числа,  $\hat{c}_N = 1$ ,  $\hat{c} = 0$  для однородных условий Дирихле и Коши,  $\hat{c}_N$  пропорционален  $N^2$  для других типов условий.

Здесь предполагается, что  $\varepsilon_N^g < 1/\|g'\|$ .

При доказательстве теоремы используется следующее утверждение, являющееся аналогом леммы 1.1.

**Лемма 1.2.** Пусть  $g(x) \in C^2[-1, 1]$  имеет ненулевые производные. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{1 - g(x_j^{\text{ch}})} &= \frac{1}{g'(1)} - \varepsilon_N^g(1), \\ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1 - g(x_j^{\text{ch}}))^2} &= \frac{N^2}{g'(1)} + \frac{g''(1)}{(g'(1))^2} + \tilde{\varepsilon}_N^g(1) \end{aligned} \quad (1.35)$$

и

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{1 + g(x_j^{\text{ch}})} &= \frac{(-1)^{N+1}}{g'(-1)} - \varepsilon_N^g(-1), \\ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1 + g(x_j^{\text{ch}}))^2} &= (-1)^{N+1} \left( \frac{N^2}{g'(-1)} + \frac{g''(-1)}{(g'(-1))^2} + \tilde{\varepsilon}_N^g(-1) \right), \end{aligned} \quad (1.36)$$

где  $\varepsilon_N^g(x) = \frac{1}{g'(x)} - p_N\left(\frac{1}{g'}, x\right)$ ,  $\tilde{\varepsilon}_N^g(x) = (\varepsilon_N^g)'(x) - N^2 \varepsilon_N^g(x)$ .

**Следствие 1.1.** Если  $g$  – аналитическая функция в области  $\mathcal{D}_1 \in \mathbb{C}$ , тогда в силу теоремы I.16  $\varepsilon_N^g = O(\rho_g^{-N})$  и  $\hat{\varepsilon}_N^g = O(\rho_g^{-N})$  при  $N \rightarrow \infty$ , где  $\rho_g > 1$  – сумма полюсов эллипса Бернштейна для функции  $1/g'(x)$ . С применением неравенства Лебега (I.5) для приближения  $\mathfrak{p}_N\left(\frac{u \circ g}{g'}, x\right)$  имеем

$$\|\tilde{r}_N(u, x) - u(x)\| = O\left((1 + \tilde{\Lambda}_N)E_N^b\left(\frac{u \circ g}{g'}\right)\right) \text{ при } N \rightarrow \infty,$$

где  $\tilde{\Lambda}_N$  – константа Лебега  $\mathfrak{p}_N$ .

**Замечание 1.3.** Теорема 1.3 связывает погрешность интерполяции (1.29) функции  $u(x)$  и погрешность интерполяции (1.3) функции  $(u \circ g)/g'$ . Если функция  $u(x)$  аналитична на отрезке  $[-1, 1]$  и имеет особую точку, лежащую близко к отрезку  $[-1, 1]$ , а функция  $g$  уносит эту точку на большое расстояние и  $g'(x) \neq 0$ , то сумма полюсов эллипса Бернштейна для  $(u \circ g)/g'$  существенно больше, чем для  $u$ , поэтому в силу теоремы I.16 при достаточно больших  $N$  погрешность (1.29) убывает существенно быстрее, чем погрешность (1.3). Этот факт служит обоснованием эффективности отображения (1.30) при известных координатах особой точки  $(\delta, \varepsilon)$ .

Теорема 1.3 позволяет связать погрешности полиномиальных и дробно-рациональных приближений, ДРП, асимптотически близких к наилучшим. По мнению соискателя, это открывает новые перспективы развития теории ДРП. Большое значение при этом имеет анализ конформных отображений. В частности, можно сделать следующее

**Предположение 1.1.** Пусть  $u \in C^{(r-1)}([-1, 1])$ ,  $u^{(r-1)} \in H_M^{\tilde{\alpha}}$  и  $u^{(r)}(x)$  разрывна в точке  $x_0 \in [-1, 1]$ . Зададим  $u(x)$  как предел функций  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u_\varepsilon(x)$ , где  $u_\varepsilon(x) = v(x)((x - x_0)^2 + \varepsilon^2)^{r-1+\tilde{\alpha}}$ ,  $v(x)$  – аналитическая функция на отрезке  $[-1, 1]$ . Положим  $g(x) = g(x, \delta, \varepsilon)$  – отображение вида (1.30). Тогда функция  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (u_\varepsilon \circ g(x, \delta, \varepsilon))/g'(x, \delta, \varepsilon)$  лежит в классе Жевре с индексом 2 и мажорантой  $G(k) = A_G^k k^{2k}$ , где  $A_G = (1/(r + \tilde{\alpha}))$ .

С учётом результатов из [117, § 4], [135] последнее утверждение в совокупности с теоремой 1.3 и следствием 1.1 означает асимптотическую эквивалентность (с точностью до медленно растущих множителей) наилучших ДРП

функций из класса Гёльдера и наилучших полиномиальных приближений функций из класса Жевре с индексом 2. Строгое обоснование этого предположения не является целью диссертационной работы. Однако его численное подтверждение можно видеть, например, на рис. 1.3, б.

В заключение параграфа отметим, что недавно, в работе [211], был предложен способ построения ДРБИ для периодических функций. Комбинации этих ДРБИ и формул (1.29) с условиями  $1_r-6_r$  позволяют реализовать весь спектр приближений функций в областях сложных форм из п. 1.1.3 с адаптацией к особенностям этих функций, см. также [212].

### **§ 1.3. Матричные аппроксимации операторов дифференцирования и интегрирования**

Для численного решения дифференциальных и интегральных уравнений необходим переход от операторов дифференцирования и интегрирования, действующих в бесконечномерных функциональных пространствах, к их конечномерным аппроксимациям, т. е. к операторам, позволяющим по конечному набору чисел, задающих приближённо функцию, восстановить конечный набор чисел, задающих приближённо производные и интегралы от этой функции. В рамках предложенных методов в качестве указанных конечных наборов чисел могут выступать значения функции в узлах интерполяций (1.3), (1.29) либо коэффициенты рядов Фурье–Чебышёва (I.7) и его модификации из [210]. Дальнейшие описания будем проводить, работая в основном со значениями функций в узлах интерполяции. При этом отметим, что техника приближения операторов и решения уравнений, предложенная в этой и следующей главах, может также эффективно работать со значениями коэффициентов рядов, более того, при рассмотрении задач размерности 2 и выше возможны комбинации, когда для аппроксимации решения в одном координатном направлении используются значения в узлах, а в другом – коэффициенты ряда. Заметим также, что представление решения в виде значения в узлах является более практичным (можно сразу оценить его поведение и нарисовать график), однако представление в виде набора коэффициентов более информативно с точки зрения анализа погрешности и свойств гладкости

функции. Действительно, наблюдая скорость убывания  $a_k$  с ростом  $k$  при больших  $k$  можно сделать заключения о величине погрешности (остаточный член ряда (1.7) оценивается через  $a_{N+1}$ ) и о степени гладкости функции (см. теоремы I.15, I.16 и § I.2).

### 1.3.1. Аппроксимации производных функций одной переменной

Для построения матричной аппроксимации оператора дифференцирования необходимо брать производные от интерполяций (1.3), (1.29) и подставлять в полученные формулы  $x = x_j^{\text{ch}}$  и  $x = x_j$ ,  $j = \overline{1, N}$ , соответственно. При такой подстановке возникает неопределённость типа «ноль разделить на ноль», поэтому целесообразно переходить к пределам  $x \rightarrow x_j^{\text{ch}}$  или  $x \rightarrow x_j$  и искать их, используя, например, правило Лопиталья.

**Краевая задача Дирихле.** Прделаем описанные операции для полинома (1.3), (1.6). Положим  $s = \sqrt{1 - x^2}$ ,  $u_j = u(x_j^{\text{ch}})$ . Дифференцируя полином по  $x$ , получаем

$$\tilde{p}_N'(u, x) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{1}{\omega_j} \left\{ \frac{2xx_j^{\text{ch}} - x^2 - 1}{(x - x_j^{\text{ch}})^2} T_N(x) + \frac{s^2}{x - x_j^{\text{ch}}} T_N'(x) \right\} u_j, \quad (1.37)$$

$$\tilde{p}_N'' = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{1}{\omega_j} \left\{ \frac{2\omega_j^2 - N^2(x - x_j^{\text{ch}})^2}{(x - x_j^{\text{ch}})^3} T_N(x) - \frac{x^2 - 3xx_j^{\text{ch}} + 2}{(x - x_j^{\text{ch}})^2} T_N'(x) \right\} u_j. \quad (1.38)$$

Переходя в (1.37), (1.38) к пределу при  $x \rightarrow x_i^{\text{ch}}$  и используя правило Лопиталья, находим

$$\begin{aligned} \tilde{p}_N'(u, x_i^{\text{ch}}) &= \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{\omega_i}{\omega_j(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})} u_j - \frac{3x_i^{\text{ch}}}{2\omega_i^2} u_i, \\ \tilde{p}_N''(u, x_i^{\text{ch}}) &= - \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{2\omega_i^2 + 3x_i^{\text{ch}}(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})}{\omega_j \omega_i (x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})^2} u_j - \frac{(N^2 + 5)\omega_i^2 + 3(x_i^{\text{ch}})^2}{3\omega_i^4} u_i. \end{aligned}$$

Для приближения функции  $\mathbf{u}(x)$  с неоднородными граничными условиями используем (1.12), введём обозначения:

$$\mathbf{a}_{ij} = \frac{\omega_i}{\omega_j(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})}, \quad a_{ij} = - \frac{2\omega_i^2 + 3x_i^{\text{ch}}(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})}{\omega_j \omega_i (x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})^2}, \quad i, j = \overline{1, N}, \quad i \neq j, \quad (1.39)$$

$$\mathbf{n}_i = -3x_i^{\text{ch}}/(2\omega_i^2), \quad \nu_i = -((N^2 + 5)\omega_i^2 + 3(x_i^{\text{ch}})^2)/(3\omega_i^4), \quad i = \overline{1, N}, \quad (1.40)$$

$$U = \begin{pmatrix} u(x_1^{\text{ch}}) \\ u(x_2^{\text{ch}}) \\ \vdots \\ u(x_N^{\text{ch}}) \end{pmatrix}, \quad \mathfrak{U}_x = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_x(x_1^{\text{ch}}) \\ \mathbf{u}_x(x_2^{\text{ch}}) \\ \vdots \\ \mathbf{u}_x(x_N^{\text{ch}}) \end{pmatrix}, \quad \mathfrak{U}_{xx} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{xx}(x_1^{\text{ch}}) \\ \mathbf{u}_{xx}(x_2^{\text{ch}}) \\ \vdots \\ \mathbf{u}_{xx}(x_N^{\text{ch}}) \end{pmatrix}$$

и сформируем  $N \times N$  матрицы

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1 & \mathbf{a}_{12} & \dots & \mathbf{a}_{1N} \\ \mathbf{a}_{21} & \mathbf{n}_2 & \dots & \mathbf{a}_{2N} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \mathbf{a}_{N1} & \mathbf{a}_{N2} & \dots & \mathbf{n}_N \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} \nu_1 & a_{12} & \dots & a_{1N} \\ a_{21} & \nu_2 & \dots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \dots & \nu_N \end{pmatrix}. \quad (1.41)$$

**Замечание 1.4.** Отметим, что узлы  $x_j^{\text{ch}}, j = \overline{1, N}$ , упорядочены по убыванию. Приведённые в этом пункте выражения для элементов матриц  $\mathcal{A}, A$  не изменятся, если узлы упорядочить по возрастанию, т. е. задать  $x_j^{\text{ch}} = -\cos \frac{(2j-1)\pi}{2N}$ ,  $j = \overline{1, N}$ . Именно так мы поступали при реализации алгоритма, описанного в гл. 2. Однако в некоторых случаях изменение порядка узлов приводит к изменению формул элементов матриц, см. приложение III.

**Замечание 1.5.** Для поиска решений краевых задач на отрезке длины  $L$  матрицу  $\mathcal{A}$  следует умножить на число  $(-2/L)$ , а матрицу  $A$  – на  $(4/L^2)$ . Это же касается матриц  $\mathcal{A}_g$  и  $A_g$ , полученных ниже на основе ДРБИ (1.29). Возникновение знака « $-$ » в множителе для  $\mathcal{A}$  связано с изменением порядка узлов, см. предыдущее замечание.

Для аппроксимации производных получим формулы

$$\mathfrak{U}_x \approx \mathcal{A}U + \mathcal{V}_x, \quad \mathfrak{U}_{xx} \approx AU + \mathcal{V}_{xx}, \quad (1.42)$$

где  $\mathcal{V}_x, \mathcal{V}_{xx}$  – вектора с компонентами  $v(x_i^{\text{ch}}), v_{xx}(x_i^{\text{ch}}), i = \overline{1, N}$ .

Матрицы  $\mathcal{A}, A$  представляют конечномерные аппроксимации операторов дифференцирования первого и второго порядков для функций, удовлетворяющих однородным условиям Дирихле. Оценка погрешности построенных приближений производных в случае высокой гладкости функции  $\mathbf{u}(x)$  получена в [169, § 1].

**Задача Коши.** Рассмотрим отдельно приближение (1.3), (1.11) на отрезке  $[0, T]$ , которое далее будем использовать для решения задач Коши. В данном случае потребуется линейная замена переменных  $x = \mathcal{L}_{[0, T]}(\tilde{x})$ , переводящая точку  $\tilde{x} \in [-1, 1]$  в точку  $x \in [0, T]$ :

$$\tilde{p}_N(u, x) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j^6(\tilde{x}) \frac{\omega_j T_N(\tilde{x})}{\tilde{x} - x_j^{\text{ch}}} u(\mathcal{L}_{[0, T]}(x_j^{\text{ch}})), \quad \sigma_j^6(\tilde{x}) = \frac{1 + \tilde{x}}{1 + x_j^{\text{ch}}}. \quad (1.43)$$

Дифференцируя полином по  $x$ , получаем

$$\tilde{p}_N'(u, x) = \frac{1}{N} \frac{d\mathcal{L}_{[0, T]}^{-1}(x)}{dx} \sum_{j=1}^N \omega_j \left\{ -\frac{T_N(x)}{(x - x_j^{\text{ch}})^2} + \frac{\sigma_j^6(x)}{x - x_j^{\text{ch}}} T_N'(x) \right\} u_j,$$

где  $u_j = u(\mathcal{L}_{[0, T]}(x_j^{\text{ch}}))$ ,  $\mathcal{L}_{[0, T]}(\tilde{x}) = T/2(\tilde{x} + 1)$ ,  $\mathcal{L}_{[0, T]}^{-1}(x) = T/2(x + 1) = 2x/T - 1$ . Переходя к пределу  $x \rightarrow x_i^{\text{ch}}$  и используя правило Лопиталья, получаем

$$\tilde{p}_N'(u, x_i^{\text{ch}}) = \frac{2}{T} \left\{ \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{(1 + x_i^{\text{ch}})\omega_j}{\omega_i(1 + x_j^{\text{ch}})(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})} u_j + \left( \frac{1}{1 + x_i^{\text{ch}}} + \frac{x_i^{\text{ch}}}{2\omega_i^2} \right) u_i \right\}.$$

Обозначая

$$\mathbf{a}_{ij} = \frac{2(1 + x_i^{\text{ch}})\omega_j}{T\omega_i(1 + x_j^{\text{ch}})(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})}, \quad \mathbf{n}_i = \frac{2}{T} \left( \frac{1}{1 + x_i^{\text{ch}}} + \frac{x_i^{\text{ch}}}{2\omega_i^2} \right), \quad i, j = \overline{1, N}, \quad (1.44)$$

составим по образцу (1.41) матрицу  $\mathcal{A}$ , которую будем использовать для аппроксимации производной в задачах Коши на отрезке  $[0, T]$ .

**Задача на окружности.** Аналогичным способом можно приближать производные в задачах с условием периодичности решения. Например, дифференцируя полином с ядром Дирихле (1.17) и переходя к пределу при  $t \rightarrow t_i$ ,  $i = \overline{0, 2N}$ , получаем

$$s'_N(u, t_i) = \frac{1}{2} \sum_{j=0, j \neq i}^{2N} (-1)^{j-i+1} \sin^{-1} \frac{\pi(j-i)}{2N+1} u(t_j),$$

$$s''_N(u, t_i) = \frac{1}{2} \sum_{j=0, j \neq i}^{2N} (-1)^{j-i+1} \cos \frac{\pi(j-i)}{2N+1} \left/ \sin^2 \frac{\pi(j-i)}{2N+1} \right. u(t_j) - \frac{N(N+1)}{3} u(t_i).$$

Таким образом, элементы матриц, аппроксимирующих первую и вторую производные, есть

$$\mathbf{a}_{ij} = (-1)^{j-i+1} \sin^{-1} \frac{\pi(j-i)}{2N+1}, \quad \mathbf{n}_i = 0, \quad (1.45)$$

$$a_{ij} = (-1)^{j-i+1} \cos \frac{\pi(j-i)}{2N+1} \Big/ \sin^2 \frac{\pi(j-i)}{2N+1}, \quad \nu_i = -\frac{N(N+1)}{3}, \quad (1.46)$$

где  $i, j = \overline{1, 2N+1}$ ,  $i \neq j$ . Матрицы  $\mathcal{A}$  и  $A$  в данном случае имеют размер  $(2N+1) \times (2N+1)$ .

**Другие типы задач.** Матрицы, аппроксимирующие первые и вторые производные в задачах с краевыми условиями всех девяти типов, описанных в п. 1.1.1, 1.1.2, приведены в приложении III. Отметим, что в случае модифицированных ДРБИ (1.29) удобно пользоваться формулами из [19], обозначить  $x_0 = -1$ ,  $x_{N+1} = 1$  и сразу записать производные в виде

$$\tilde{r}_N'(u, x_i) = \sum_{j=0}^{N+1} D^{(1)}(x_i, x_j) u_j, \quad \tilde{r}_N''(u, x_i) = \sum_{j=0}^{N+1} D^{(2)}(x_i, x_j) u_j, \quad (1.47)$$

где

$$D^{(1)}(x_i, x_j) = \begin{cases} \zeta_j^*(x_i) \frac{\omega_j}{\omega_i(x_i - x_j)}, & i \neq j, \\ (\zeta_i^*)'(x_i) - \sum_{k=1, k \neq i}^N \frac{\omega_k}{\omega_i(x_i - x_k)}, & i = j, \end{cases}$$

при  $i, j = \overline{1, N}$ ;

$$D^{(1)}(x_0, x_j) = (\zeta_j^*)'(-1) \frac{J_j(-1)}{\mathfrak{D}_N(-1)}, \quad D^{(1)}(x_{N+1}, x_j) = (\zeta_j^*)'(1) \frac{J_j(1)}{\mathfrak{D}_N(1)} \quad \text{при } j = \overline{1, N};$$

$$D^{(1)}(x_i, x_0) = \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta_{-1}'(x), \quad D^{(1)}(x_i, x_{N+1}) = \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta_{+1}'(x) \quad \text{при } i = \overline{0, N+1}.$$

$$D^{(2)}(x_i, x_j) = \begin{cases} 2(\zeta_j^*)'(x_i) \frac{\omega_j}{\omega_i(x_i - x_j)} + \zeta_j^*(x_i) \gamma_{ij}, & i \neq j, \\ (\zeta_i^*)''(x_i) - 2(\zeta_i^*)'(x_i) \sum_{k=1, k \neq i}^N \frac{\omega_k}{\omega_i(x_i - x_k)} - \sum_{k=1, k \neq i}^N \gamma_{ik}, & i = j, \end{cases}$$

при  $i, j = \overline{1, N}$ , где  $\gamma_{ik} = -\frac{2\omega_k}{\omega_i(x_i - x_k)} \left( \sum_{l=1, l \neq i}^N \frac{\omega_l}{\omega_i(x_i - x_l)} + \frac{1}{x_i - x_k} \right)$ ;

$$D^{(2)}(x_0, x_j) = (\zeta_j^*)''(-1) \frac{J_j(-1)}{\mathfrak{D}_N(-1)} + 2(\zeta_j^*)'(-1) \Lambda_j^-,$$

$$D^{(2)}(x_{N+1}, x_j) = (\zeta_j^*)''(1) \frac{J_j(1)}{\mathfrak{D}_N(1)} + 2(\zeta_j^*)'(1) \Lambda_j^+$$



при  $j = \overline{1, N}$ , где  $\Lambda_j^\pm = \frac{\omega_j}{\mathfrak{D}_N^2(\pm 1)(1 \mp x_j)} \sum_{k=1, k \neq j} \frac{\omega_k x_k}{(1 \mp x_k)^2}$ ;

$$D^{(2)}(x_i, x_0) = \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta_{-1}''(x), \quad D^{(2)}(x_i, x_{N+1}) = \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta_{+1}''(x) \quad \text{при } i = \overline{0, N+1}.$$

Запишем матрицы, аппроксимирующие операторы первых и вторых производных по переменной  $x$ , в виде

$$A_g = (D^{(1)}(x_i, x_j)), \quad A_g = (D^{(2)}(x_i, x_j)). \quad (1.48)$$

Нижний индекс « $g$ » в обозначениях матриц подчёркивает зависимость значений элементов матриц от отображения  $g$ , так как  $x_j = g(x_j^{\text{ch}})$ . Отметим также, что в случае краевых условий Дирихле и Коши, см. типы  $1_r$  и  $6_r$  из § 1.2, строки и столбцы этих матриц с индексами 0 и  $N+1$  исключаются, и матрицы имеют размер  $N \times N$ . В случае, когда на одной границе задаётся смешанное краевое условие или условие Неймана, на другой – условие Дирихле, возможны 2 варианта. Если значение функции задаётся в точке  $x = -1$  (тип  $4_r$  из § 1.2), а смешанное условие – в точке  $x = 1$ , то из матриц исключаются столбец и строка с индексами 0. В противном случае (тип  $5_r$  из § 1.2) исключаются строка и столбец с индексом  $N+1$ . В итоге для любого из указанных вариантов матрицы имеют размер  $(N+1) \times (N+1)$ . В случае краевых условий Неймана или смешанных краевых условий, строки и столбцы из матриц не исключаются, и матрицы имеют размер  $(N+2) \times (N+2)$ .

Подчеркнём, что разложение приближаемой функции  $\mathbf{u}$  на два слагаемых,  $u(x)$  и  $v(x)$ , см. (1.12), и учёт однородных условий непосредственно в приближении  $\tilde{p}_N(u, x)$  обеспечивают хорошие с вычислительной точки зрения свойства матрицы  $A$ , но не только. Далее для минимизации числа операций при поиске приближённых решений краевых задач (см. свойство II, анонсированное в § 0.3 введения) потребуются спектральные разложения

$$A = R_A D_A R_A^{-1}, \quad (1.49)$$

где  $R_A$  – матрица собственных векторов  $A$ ;  $D_A$  – диагональная матрица, содержащая собственные значения  $d_A^j$  матрицы  $A$  на диагонали,  $j = \overline{1, N}$ . Использование разработанных приближений  $\tilde{p}_N(u, x)$ ,  $\tilde{r}_N(u, x)$  и  $s_N(u, t)$  обеспечивает важные свойства разложений (1.49), а именно, то, что все  $d_A^j$  являются отрицательными и хорошо отделимыми, а матрицы  $R_A$  имеют малую обусловленность.

**Замечание 1.6.** При реализации алгоритмов решения краевых задач на основе полиномиальных приближений (1.3) матрицы  $\mathcal{A}$ ,  $A$ ,  $R_A$ ,  $D_A$ ,  $R_A^{-1}$  для разных значений  $N$  были занесены в базу данных, поэтому их использование в алгоритмах не требовало дополнительных операций.

### 1.3.2. Анализ спектральных разложений и обусловленностей матриц, аппроксимирующих операторы дифференцирования

Анализ собственных чисел матрицы  $A$  и чисел обусловленности и норм матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$  и  $R_A$  был проведён с помощью интервальных методов [121, 213]. Пакет INTLAB позволяет проводить расчёты с гарантией точности, иными словами, вычислять радиусы интервалов, в которые гарантированно попадают значения собственных чисел или чисел обусловленности матриц.

В табл. 1 приведены значения центров  $d_A^j$  и радиусов  $\text{rad}_j$  интервалов, в которые гарантированно попадают значения первых десяти собственных чисел матрицы  $A$  с элементами (1.39), (1.40) для случая условий Дирихле. Отметим, что несколько минимальных по модулю собственных чисел совпадают с высокой точностью с собственными числами  $\lambda_j = -(\pi j/2)^2$ ,  $j = 1, 2, \dots$ , соответствующей задачи Штурма–Лиувилля:

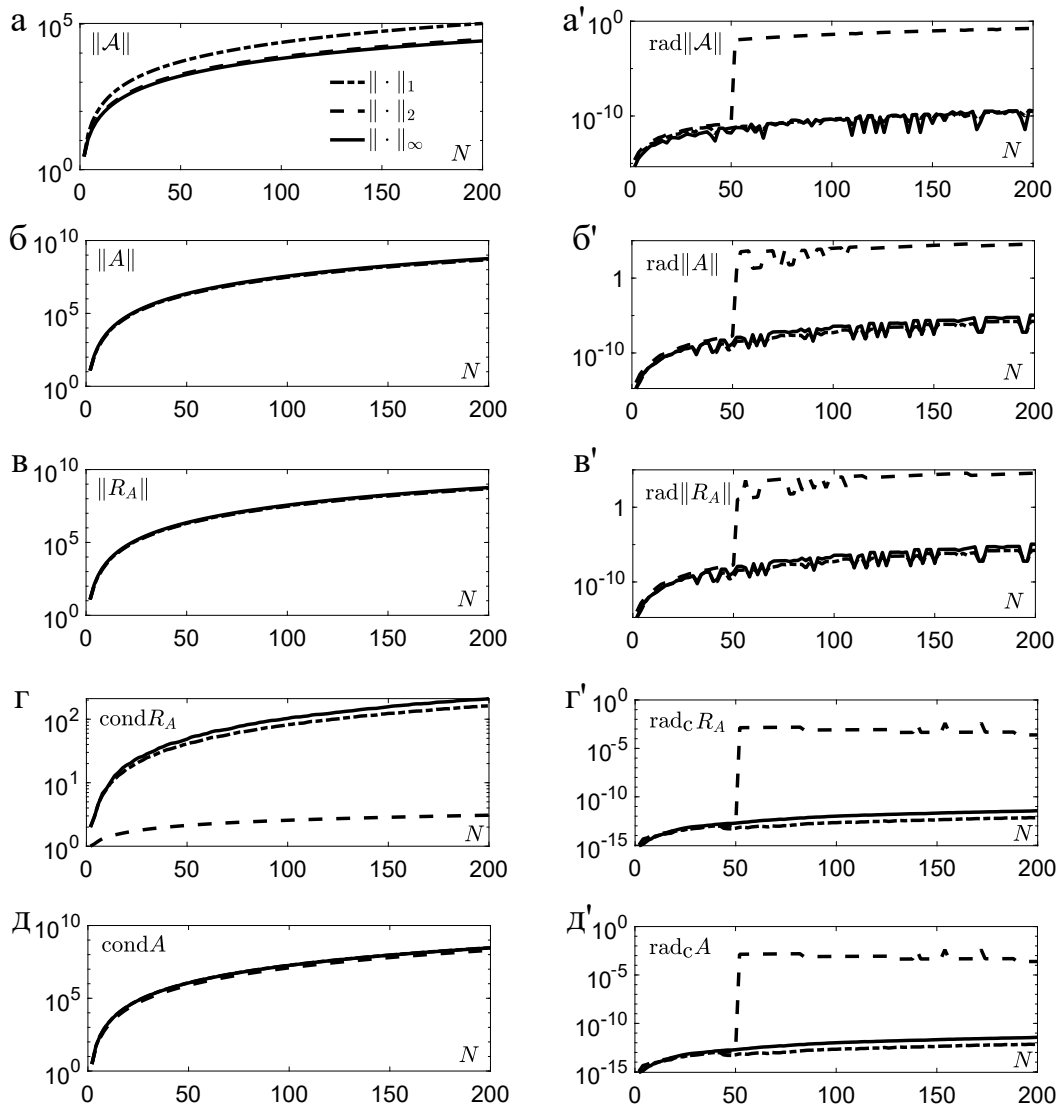
$$d^2u/dx^2 = \lambda u, \quad u(-1) = u(1) = 0, \quad x \in [-1, 1].$$

В табл. 1 приведены относительные отклонения  $\text{dev}_j = |d_A^j - \lambda_j|/|\lambda_j|$ . С ростом  $j$  эти отклонения растут и при  $j = N/2$  превышают 1%. Это типичная ситуация для матриц, аппроксимирующих вторые производные, полученных из (1.3), см. табл. 32–34 приложения III.

**Таблица 1.** Значения собственных чисел  $d_A^j$  матрицы  $A$  для условий Дирихле при  $N = 10$ , радиусы интервалов  $\text{rad}_j$ , гарантированно содержащих  $d_A^j$ , и отклонения  $\text{dev}_j$

$j$	$d_A^j$	$\text{rad}_j$	$\text{dev}_j$	$j$	$d_A^j$	$\text{rad}_j$	$\text{dev}_j$
1	-2.467401100161171	2.62e-14	4.51e-11	6	-84.264388535869259	2.84e-14	5.14e-2
2	-9.869604101936462	3.2e-14	3.03e-8	7	-178.5341309646625	5.68e-14	0.477
3	-22.20689893823786	2.13e-14	1.3e-5	8	-196.4915419758914	8.53e-14	0.244
4	-39.4538717953786	2.13e-14	6.22e-4	9	-3034.196464055917	4.55e-13	14.18
5	-62.59510494101414	3.55e-14	1.48e-2	10	-3169.920593590917	9.09e-13	11.85

На рис. 1.4, а–д в логарифмической шкале приведены значения верхних границ норм ( $\|\cdot\|$ ) и обусловленностей ( $\text{cond}$ ) матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$  и  $R_A$  в зависимости от числа узлов  $N$ , а на рис. 1.4, а'–д' – соответствующие значения радиусов интервалов ( $\text{rad}\|\cdot\|$ ,  $\text{rad}_c$ ), гарантированно содержащих значения норм и обусловленностей. В расчётах использованы первые (штрих-пунктир), вторые (пунктир) и бесконечные (сплошная линия) матричные нормы. Заметим, что в § 2.4 построены апостериорные оценки погрешности алгоритмов, включающие эти нормы и обусловленности матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$  и  $R_A$ .



**Рис. 1.4.** Зависимости норм матриц  $\mathcal{A}$  (а),  $A$  (б),  $R_A$  (в) и чисел обусловленности матриц  $R_A$  (г) и  $A$  (д) от числа узлов интерполяции  $N$  в логарифмической шкале; соответствующие значения радиусов интервалов, гарантированно содержащих значения норм и обусловленностей (а'–д'). Матрицы построены для задачи Дирихле

Отметим, что норма матрицы  $\mathcal{A}$  растёт пропорционально  $N^2$ , а норма  $A$  – пропорционально  $N^3$ . Это несложно доказать, используя (1.39), (1.40) и учитывая, что  $x_{N-1}^{\text{ch}} - x_N^{\text{ch}} = O(1/N^2)$  при  $N \rightarrow \infty$ . Из рис. 1.4, б, в видно, что скорость роста норм  $R_A$  близка к скорости роста норм  $A$ .

*ВАЖНО.* Особое внимание нужно уделить рис. 1.4, г, д, откуда видно, что обусловленности  $A$  растут достаточно медленно с ростом  $N$ , что позволяет гарантировать высокую численную устойчивость алгоритмов, основанных на обращении  $A$ , при умеренных значениях  $N$ . Однако обусловленности  $R_A$  на 7–9 порядков ниже обусловленностей  $A$  (максимальные значения обусловленности  $R_A$ , посчитанной с применением второй матричной нормы, не превышают значение 4). Это свидетельствует о принципиально лучшем качестве алгоритмов, основанных на применении спектральных разложений аппроксимирующих матриц. Именно такие алгоритмы разрабатываются в гл. 2.

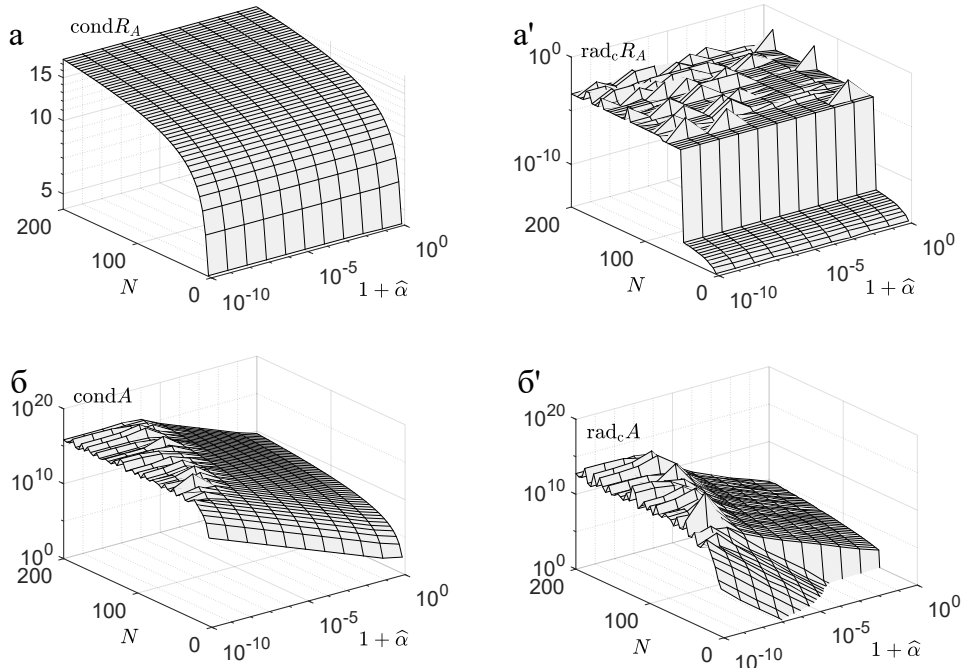
Отметим также, что радиусы интервалов, гарантированно содержащих рассчитанные значения норм и обусловленностей, как правило, на 14–15 порядков меньше значений норм и обусловленностей, т. е. можно гарантировать точность, близкую к точности машинной арифметики (вычисления проводились в формате `double` с 16-значной мантиссой). Исключение составляют расчёты, использующие вторую матричную норму при  $N > 50$ , в которых значения радиусов интервалов на 4–10 порядков меньше соответствующих значений норм и обусловленностей. Эта ситуация характерна для результатов, представленных здесь и в приложении III, она связана с высокой сложностью расчётов сингулярных чисел несимметричных матриц высокой размерности.

В приложении III получены матрицы, аппроксимирующие производные для чистой задачи Неймана и задач Неймана–Дирихле. Добавление смешанных условий (см. типы 3–5 из п. 1.1.1) не приводит к осязаемому изменению норм и обусловленностей матриц по сравнению со значениями, представленными в приложении III, за исключением случаев

- 1)  $\widehat{\alpha}\widehat{\gamma}L = \widehat{\gamma}\widehat{\beta} - \widehat{\alpha}\widehat{\theta}$  для условий типа 3;
- 2)  $\widehat{\alpha}L = -\widehat{\beta}$  для условий типа 4;
- 3)  $\widehat{\gamma}L = -\widehat{\theta}$  для условий типа 5,

где  $L$  – длина отрезка, на котором строится интерполяция (для стандартного отрезка  $[-1, 1]$  имеем  $L = 2$ ).

**Замечание 1.7.** В указанных случаях соответствующие задачи являются некорректными, а их решения на отрезке определяются с точностью до линейных слагаемых. Отметим также, что чистая задача Неймана (условия типа 2) и задача с периодическим решением без дополнительных условий на чётность/нечётность (см. п. 1.1.2) тоже являются некорректными: их решения определены с точностью до постоянного слагаемого. Такая некорректность приводит к появлению в спектре матриц  $A$ , аппроксимирующих вторые производные в этих задачах, нулевого собственного числа и одного соответствующего собственного вектора, см. табл. 3, 32, 35. В п. 2.1.1 с применением метода установления и специальных регуляризаций описан алгоритм, позволяющий решать такие задачи (конечно, при этом требуется дополнительно задать значение решения в одной точке области задачи, см. замечание 2.1).



**Рис. 1.5.** Зависимости чисел обусловленности матриц  $R_A$  (а) и  $A$  (б), посчитанных во второй норме, от  $N$  и от разности  $-1$  и значения  $\hat{\alpha}$ ; соответствующие значения радиусов интервалов, гарантированно содержащих значения обусловленностей ( $a'$ ,  $b'$ ). Матрицы построены для смешанной краевой задачи типа 3 из п. 1.1.1 при  $\hat{\beta} = \hat{\gamma} = \hat{\theta} = 1$

В окрестности значений  $\hat{\alpha}$ ,  $\hat{\beta}$ ,  $\hat{\gamma}$ ,  $\hat{\theta}$ , удовлетворяющих случаям 1)–3), нормы матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$  и  $R_A$  практически не зависят от этих значений. От них зависят только числа обусловленности матрицы  $A$ , но не обусловленности  $R_A$ . На

рис. 1.5 дан анализ этих чисел для случая 1) фиксированных  $\widehat{\beta} = \widehat{\gamma} = \widehat{\theta} = 1$  и  $\widehat{\alpha} > -1$  меняющегося в малой окрестности  $-1$ . Эти результаты подтверждают, что при разработке алгоритмов поиск обратной матрицы  $A$  нежелателен, нужно пользоваться спектральным разложением  $A$  вида (1.49).

**Задача Коши.** Для случая матричной аппроксимации в задаче Коши с элементами (1.44) имеет место несколько иная ситуация (рис. 1.6). Обусловленность  $\mathcal{A}$  демонстрирует умеренную скорость роста, но  $\text{cond}R_{\mathcal{A}}$  растёт слишком быстро и при  $N = 25$  превышает  $10^{10}$ . Кроме того, значения радиусов интервалов, гарантированно содержащих  $\text{cond}R_{\mathcal{A}}$ , приближаются к  $\text{cond}R_{\mathcal{A}}$ , что не позволяет гарантировать, что спектр матрицы рассчитан верно. Для удобства на рис. 1.7 значения обусловленности и радиуса изображены на одной координатной плоскости. В табл. 2 приведены значения центров и радиусов интервалов, в которые гарантированно попадают значения собственных чисел матрицы  $\mathcal{A}$  при  $N = 10$ .

**Таблица 2.** Значения собственных чисел  $d_{\mathcal{A}}^j$  матрицы  $\mathcal{A}$  с элементами (1.44) при  $T = 2$  и  $N = 10$  и радиусы интервалов  $\text{rad}_j$ , гарантированно содержащих  $d_{\mathcal{A}}^j$

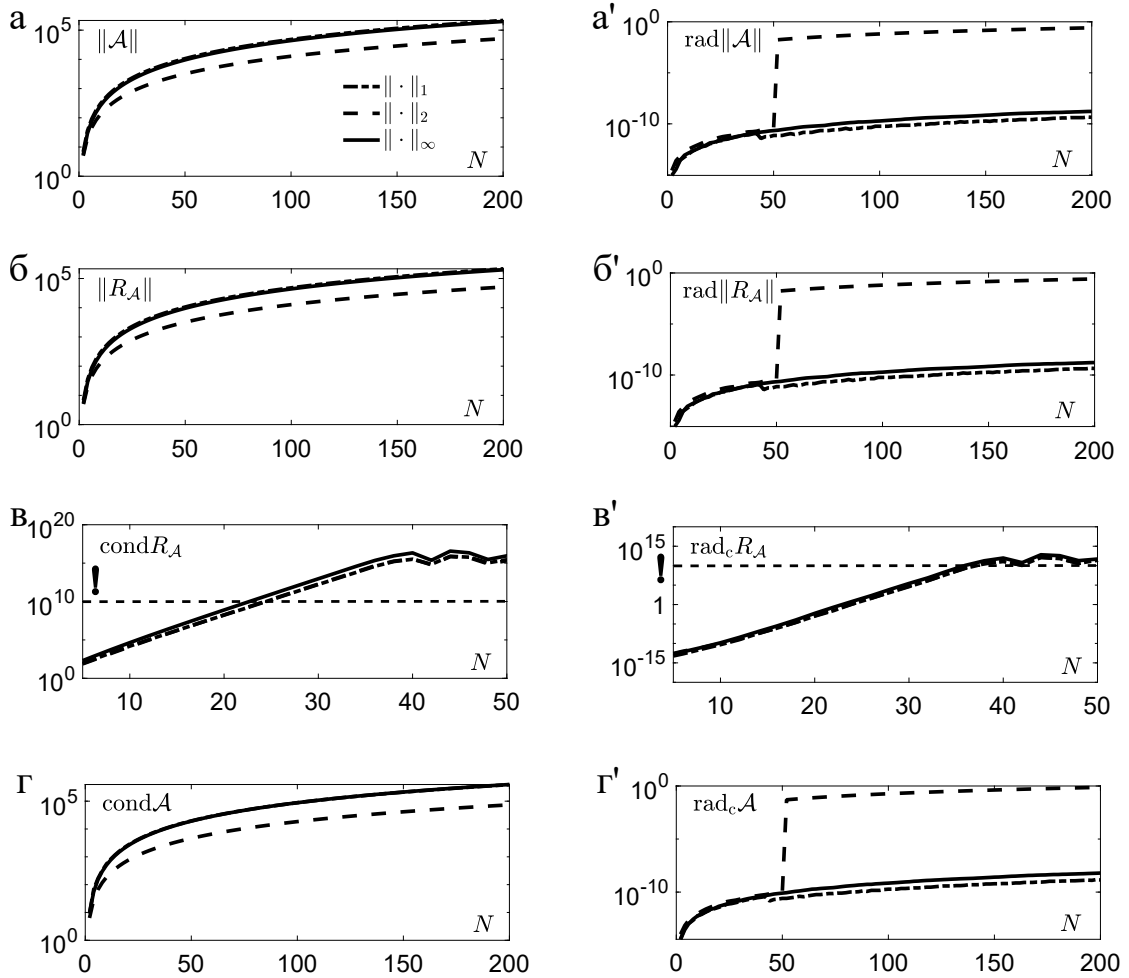
$j$	$d_{\mathcal{A}}^j$	$\text{rad}_j$
1	58.651955985441816	7.11e-15
2,3	$2.999445156055363 \pm 7.96046273340461i$	9.55e-15
4,5	$4.26941311045503 \pm 6.062577061672625i$	1.49e-14
6,7	$5.028785289672468 \pm 3.933803674349112i$	3.43e-14
8	5.695873617901074	1.34e-13
9,10	$5.52844164214539 \pm 1.9302196040513i$	7.96e-14

В значениях  $d_{\mathcal{A}}^j$  символом « $i$ » обозначена мнимая единица. Благодаря проведённому анализу удаётся сделать следующие выводы.

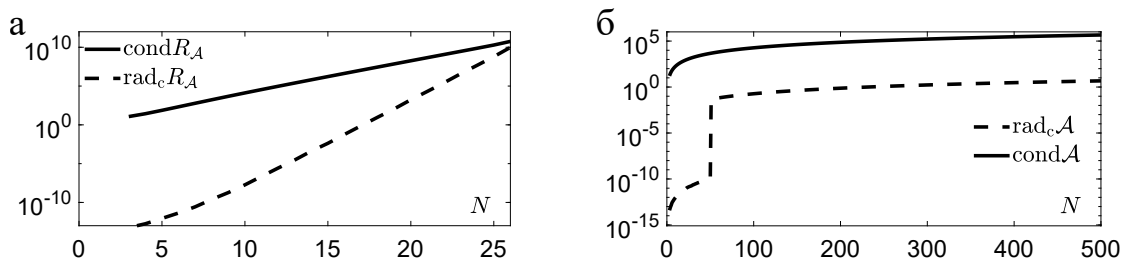
1. Все собственные числа матрицы  $\mathcal{A}$  достаточно далеко отстоят друг от друга и от нуля и лежат в комплексной плоскости.

2. Обусловленность матрицы  $\mathcal{A}$  с ростом числа узлов растёт достаточно медленно, что обеспечивает численную устойчивость алгоритмов, основанных на обращении матрицы  $A$ .

3. Обусловленность матрицы  $R_{\mathcal{A}}$  с ростом числа узлов растёт быстро и при  $N = 25$  превышает  $10^{10}$ , поэтому алгоритм, основанный на спектральном разложении (1.49), будет численно устойчивым только при небольших  $N$ .



**Рис. 1.6.** Зависимости норм матриц  $\mathcal{A}$  (а),  $R_{\mathcal{A}}$  (б) и чисел обусловленности матриц  $R_{\mathcal{A}}$  (в) и  $\mathcal{A}$  (г) от  $N$  в логарифмической шкале; соответствующие значения радиусов интервалов, гарантированно содержащих значения норм и обусловленностей (а'–г'). Матрицы построены для задачи Коши



**Рис. 1.7.** Зависимости обусловленностей (сплошная линия), посчитанных во второй норме, и радиусов интервалов, в которых гарантированно лежат эти значения (пунктир), от числа узлов  $N$  для матриц  $R_{\mathcal{A}}$  (а) и  $\mathcal{A}$  (б), построенных для задачи Коши, с применением (1.44) при  $T = 2$

Дальнейший анализ (1.49), основанный на методах дихотомии матричного спектра [214], показал, что при больших  $N$  используемой 16-значной арифметики `double` не достаточно, чтобы локализовать с высокой точностью собственные числа матрицы  $A$ . Это связано с наличием собственных подпространств, очень близких к вырожденным. Эксперименты показали, что в расчётах указанный эффект начинает проявляться при  $N > 20$ .

**Задача на окружности.** Численная аппроксимация производных в задаче с периодическими граничными условиями выгодно отличается от случая задач на отрезке тем, что матрица  $A$  с элементами (1.46) очевидно является симметричной, а её спектр в точности совпадает со спектром соответствующего дифференциального оператора. Этот факт следует из того, что приближения функций  $\sin kt$ ,  $\cos kt$ ,  $k = \overline{0, N}$ , полиномом с ядром Дирихле (1.17) точны и совпадают с частичной суммой ряда Фурье  $S_N(u, t)$  и  $S_N''(\sin kt, t) = S_N((\sin kt)'', t)$ ,  $S_N''(\cos kt, t) = S_N((\cos kt)'', t)$ , поэтому спектр  $A$  содержит ноль и пары чисел  $-k^2$ ,  $k = \overline{0, N}$ . В расчётах эти числа определяются с точностью до погрешности машинной арифметики (табл. 3).

**Таблица 3.** Значения собственных чисел  $d_A^j$  матрицы  $A$  для периодических функций при  $N = 8$  и отклонения  $\text{dev}_j$

$j$	$d_A^j$	$\text{dev}_j$	$j$	$d_A^j$	$\text{dev}_j$
1	1.526888493125437e-13	—	9	-15.999999999999879	7.55e-15
2	-0.999999999999910	8.97e-14	10, 11	-24.99999999999776	8.95e-15
3	-0.999999999999916	8.36e-14	12, 13	-35.99999999999651	9.67e-15
4, 5	-3.999999999999936	1.6e-14	14	-48.99999999999481	1.06e-14
6, 7	-8.999999999999898	1.13e-14	15	-48.99999999999658	6.96e-15
8	-15.99999999999783	1.35e-14	16	-63.99999999999623	5.88e-15
			17	-63.99999999999772	3.55e-15

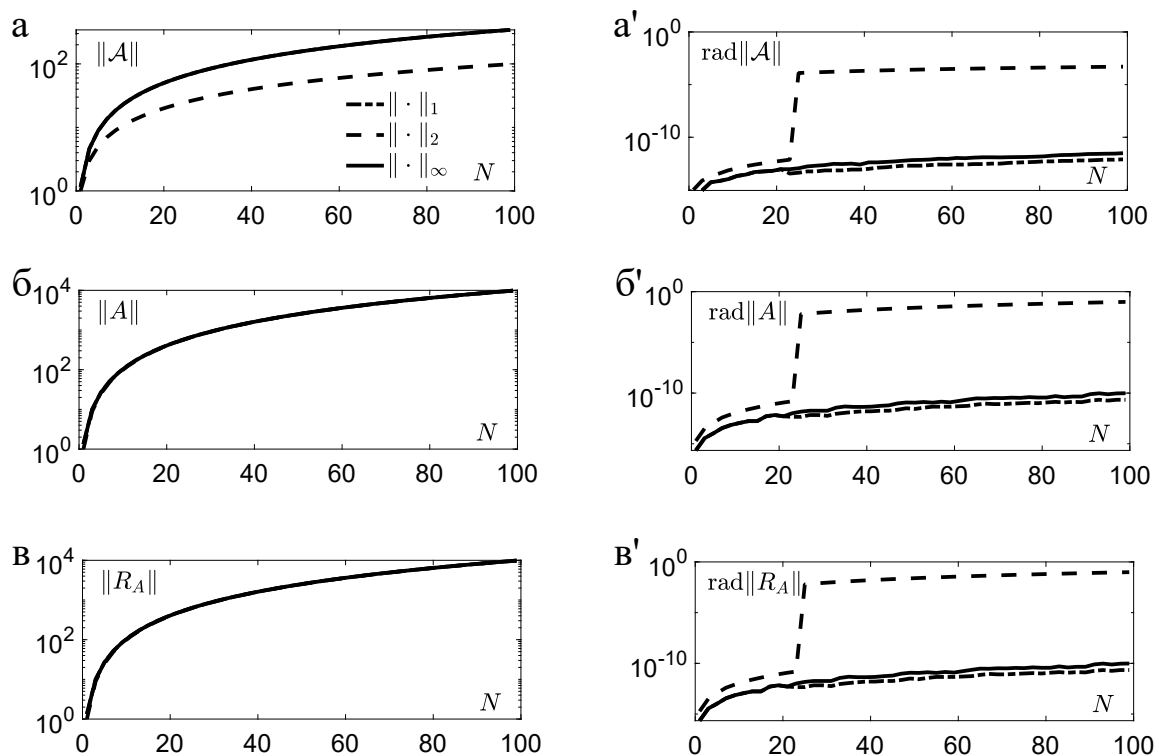
В силу симметрии  $A$ , в разложении (1.49) матрица  $R_A$  является ортогональной,  $R_A^{-1} = R_A^T$  и  $\text{cond}R_A=1$  для любых  $N$ , т. е. алгоритм на основе такого разложения не увеличивает вычислительную погрешность и является оптимальным с точки зрения свойства III из § 0.3. Заметим, что аналогичные преимущества демонстрируют и аппроксимации на основе тригонометрических полиномов (1.18), (1.19), см. приложение III.

Нужно подчеркнуть эффективность этих аппроксимаций в спектральных задачах на отрезке. Мы уже видели, что первые собственные числа матриц



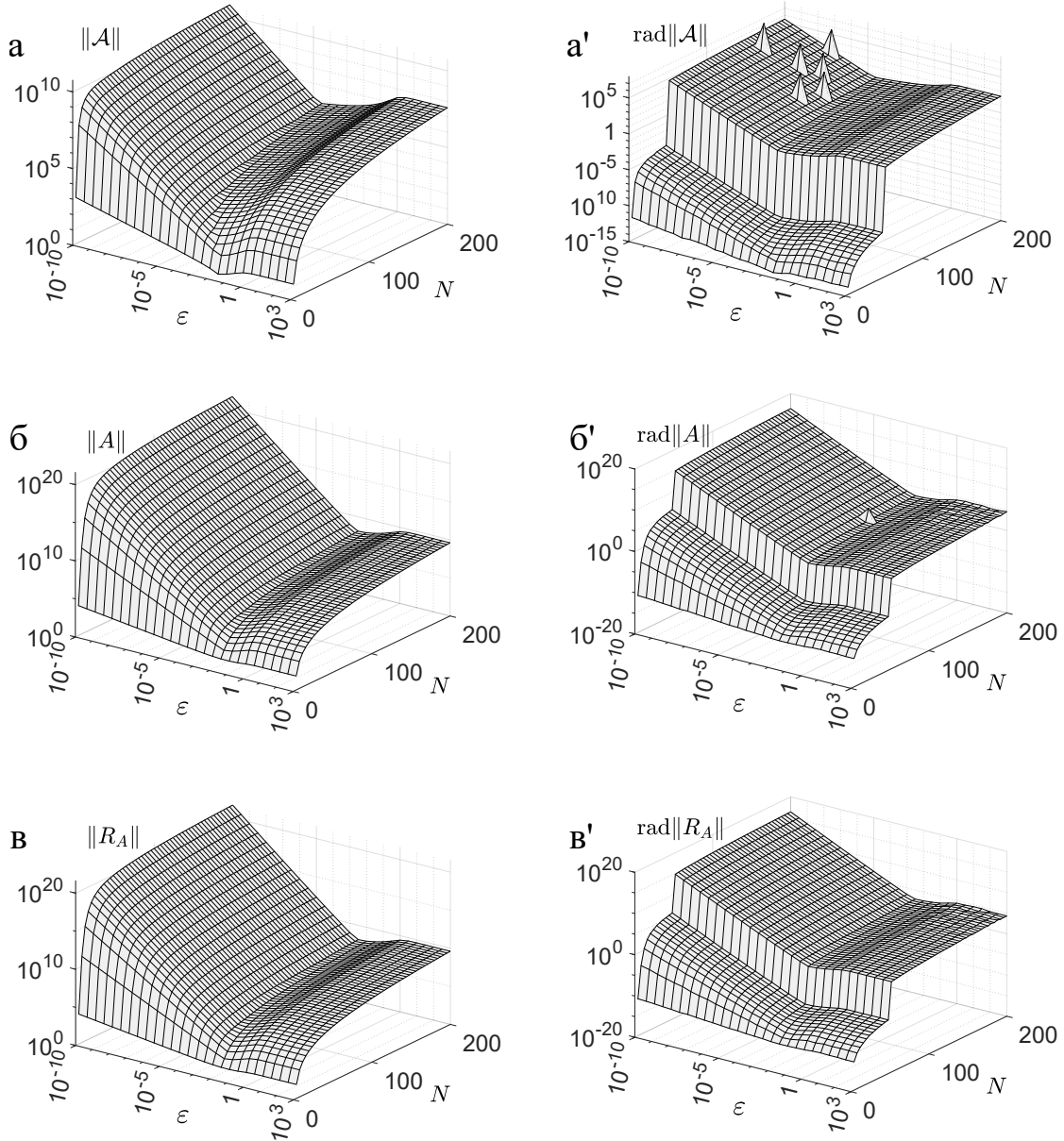
$A$ , построенных на основе (1.3), приближают собственные числа соответствующих задач Штурма–Лиувилля с высокой точностью. Однако при  $j > N/2$  это приближение уже становится неудовлетворительным (см. табл. 1 и 32–34). Однако, как следует из табл. 35, спектр матриц  $A$ , полученных на основе (1.18), (1.19), совпадает с первыми  $N$  собственными числами задач Штурма–Лиувилля с условиями Дирихле и Неймана с точностью до погрешности машинной арифметики. Это связано с тем, что функции « $\cos(Nt)$ » и « $\sin((N+1)t)$ », стоящие в (1.18), (1.19), являются собственными для этих задач Штурма–Лиувилля. Автором установлено, что при подстановке в (1.18) вместо « $\cos(Nt)$ » собственных функций других спектральных задач полученный полином приближает решения краевых задач с соответствующими условиями, а спектр матрицы  $A$ , построенной на базе этого полинома, в точности совпадает с первыми  $N$  собственными числами спектральной задачи.

Значения норм матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$  и  $R_A$ , характеризующие в соответствии с п. 2.4.1 вычислительную погрешность алгоритма, приведены на рис. 1.8.

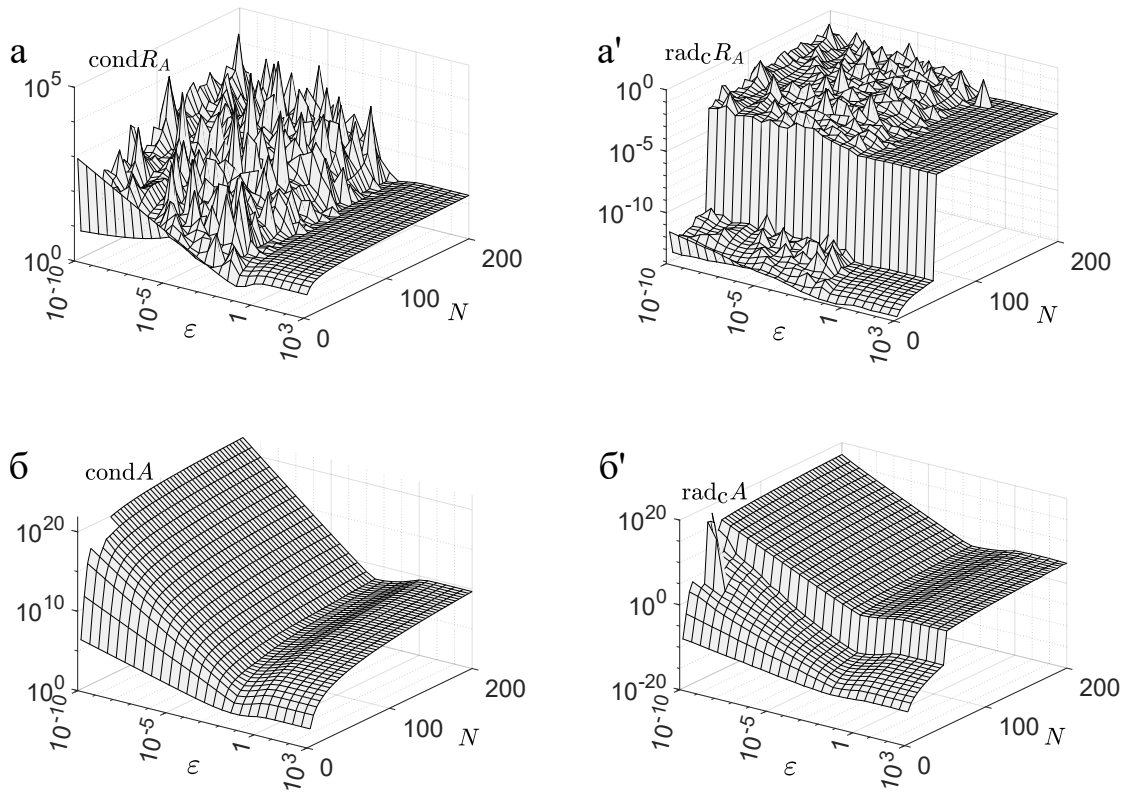


**Рис. 1.8.** Зависимости норм матриц  $\mathcal{A}$  (а),  $A$  (б) и  $R_A$  (в) от  $N$  в логарифмической шкале; соответствующие значения радиусов интервалов, гарантированно содержащих значения норм (а'–в'). Матрицы построены для задачи на окружности

Анализ норм и обусловленностей матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$  и  $R_A$ , полученных на основе дробно-рациональных приближений (1.29), (1.30), показал существенную зависимость только от параметра сгущения сетки  $\varepsilon$  (рис. 1.9, 1.10): чем ближе  $\varepsilon$  к нулю, тем больше значения норм и обусловленности матрицы  $A$ , но не  $R_A$ . В этих экспериментах второй параметр (1.30) –  $\delta = 0$ .



**Рис. 1.9.** Зависимости норм матриц  $\mathcal{A}$  (а),  $A$  (б) и  $R_A$  (в), посчитанных во второй норме, от  $N$  и от параметра  $\varepsilon$  отображения (1.30); соответствующие значения радиусов интервалов, гарантированно содержащих значения норм (а'–в'). Матрицы построены для смешанной задачи типа 3, п. 1.1.1, при  $\widehat{\alpha} = \widehat{\beta} = \widehat{\gamma} = \widehat{\theta} = 1$  на основе дробно-рациональной интерполяции (1.29)



**Рис. 1.10.** Зависимости обусловленностей матриц  $A$  (а) и  $R_A$  (б), посчитанных во второй норме, от  $N$  и от параметра  $\varepsilon$ ; соответствующие значения радиусов интервалов, гарантированно содержащих значения обусловленностей (а', б'). Матрицы построены для смешанной задачи типа 3, п. 1.1.1, при  $\hat{\alpha} = \hat{\beta} = \hat{\gamma} = \hat{\theta} = 1$  на основе (1.29)

Из графиков видно, что при уменьшении  $\varepsilon$  от  $10^3$  до значений 0.1 для малых  $N$  или  $10^{-4}$  для больших  $N$  наблюдается уменьшение обусловленности на полтора – два порядка при  $N > 30$ . Это позволяет сформулировать идею о регуляризации приближений дифференциальных операторов за счёт применения (1.29), (1.30) при  $\delta = 0$  и  $\varepsilon = 10^{-4} - 0.1$ . При дальнейшем уменьшении  $\varepsilon$  нормы матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$ ,  $R_A$  и обусловленность  $A$  растут приблизительно пропорционально  $1/\varepsilon$ . Однако обусловленность матрицы  $R_A$  не растёт и демонстрирует хаотичное поведение в диапазоне  $\text{cond} R_A \in [10, 10^5]$ , что ещё раз демонстрирует высокую эффективность применения разложения (1.49).

### 1.3.3. Аппроксимация оператора интегрирования

Для аппроксимации интеграла с переменным пределом  $I(x) = \int_a^x u(\xi) d\xi$ ,  $x \in (a, b]$ , также удобно использовать формулы вида (1.42). Для этого пред-

ставим фундаментальные многочлены интерполяции с узлами Чебышёва в виде [6, с. 370]:

$$l_{Nk} = \frac{T_N(x)}{(x - x_k^{\text{ch}})T'_N(x_k^{\text{ch}})} = \frac{2}{N} \sum_{m=0}^{N-1} ' \cos(m\theta_k) T_m(x), \quad k = \overline{1, N}; \quad \theta_k = \frac{(2k-1)\pi}{2N},$$

где штрих у знака суммы означает, что первое слагаемое берётся с коэффициентом  $1/2$ . Тогда, интегрируя интерполяционный полином  $\sum_{k=1}^N l_{Nk} u(x_k^{\text{ch}})$ , получаем выражение для элементов матрицы  $\mathcal{I}$ , которую будем использовать для аппроксимации интеграла:

$$\mathcal{I} = (\iota)_{kj}, \quad \iota_{kj} = \frac{b-a}{N} \sum_{m=0}^{N-1} ' \cos(m\theta_k) \alpha_{jm}, \quad \alpha_{jm} = \int_{-1}^{x_j^{\text{ch}}} T_m(x) dx, \quad (1.50)$$

где  $\alpha_{jm} = x_j^{\text{ch}} \left( \frac{T_{m+1}(x_j^{\text{ch}})}{m^2-1} - \frac{T_m(x_j^{\text{ch}})}{m-1} + \frac{2(-1)^m(2+m)}{m^2-1} \right)$  при  $m \neq 1$  и  $\alpha_{j1} = [(x_j^{\text{ch}})^2 - 1]/2$ . Таким образом, используя приближение (1.1) функции  $u(x)$ , интегрируя его и обозначая  $U = (u(x_1^{\text{ch}}), \dots, u(x_N^{\text{ch}}))^T$ ,  $U_{\text{int}} = (I(x_1^{\text{ch}}), \dots, I(x_N^{\text{ch}}))^T$ , получаем

$$U_{\text{int}} = \mathcal{I}U. \quad (1.51)$$

В случае, если необходимо найти интеграл на всём отрезке  $[a, b]$ , полезно также иметь формулы  $\int_{-1}^1 T_m(x) dx = \frac{1+(-1)^m}{1-m^2}$  при  $m \neq 1$  и  $\int_{-1}^1 T_1(x) dx = 0$ .

### 1.3.4. Аппроксимация операторов в задачах размерности 2 и выше

В п. 1.1.3 описаны методы приближения функций нескольких переменных на основе прямых (тензорных) произведений одномерных интерполяций. Такой метод можно строить с применением любых из интерполяций, описанных в п. 1.1.1, 1.1.2, в зависимости от геометрии области задачи и от типов граничных условий. Для конкретики рассмотрим двумерный случай и задачу Дирихле в квадратной области ( $d = 2$ ,  $D = [-1, 1]^2$ ,  $\mathbf{u}(y, z) \in C^2(D)$  – искомая функция). В таком случае применим приближение (1.20) при  $\tilde{y} = y$ ,  $\tilde{z} = z$ . Для этого в области  $D$  введём сетку с узлами  $(y_j, z_k)$ , где  $y_j = y_j^{\text{ch}} = \cos \frac{2j-1}{2N}\pi$ ,  $z_k = z_k^{\text{ch}} = \cos \frac{2k-1}{2K}\pi$ ,  $j = \overline{1, N}$ ,  $k = \overline{1, K}$ . Далее используем обозначения:  $u_{jk} = u(y_j, z_k)$ ,  $(\mathbf{u}_\mu)_{jk} = \mathbf{u}_\mu(y_j, z_k)$ , где  $\mu$  обозначает операцию

дифференцирования:  $\mu \in \{y, z, yu, zz, yz\}$ ,  $u = \mathbf{u} - v$ , см. (1.12). Пусть  $U = (u_{jk})$ ,  $\mathfrak{U}_\mu = ((\mathbf{u}_\mu)_{jk}) - N \times K$  матрицы. Аппроксимация  $\mathbf{u}(y, z)$  с применением прямого произведения интерполяционных полиномов (1.20) имеет вид

$$\mathbf{u}(y, z) \approx \mathcal{P}(u, y, z) + v(y, z).$$

Здесь  $\mathcal{P}(u, y, z)$  удовлетворяет нулевым граничным условиям, а  $v(y, z)$  реализует заданные ненулевые граничные значения. Для расчёта функции  $v(y, z)$  следует использовать методы, указанные в замечании 2.1. Однако при решении краевых задач для УЧП (конкретно, задачи Дирихле) итерационными методами мы воспользуемся следующим представлением:  $v = v^y + v^z$ , где

$$v^y(y, z) = \alpha_y(z)y + \beta_y(z), \quad v^z(y, z) = \alpha_z(y)z + \beta_z(y), \quad v^y|_{z=\pm 1} = v^z|_{y=\pm 1} = 0. \quad (1.52)$$

Величины  $(\alpha_y, \beta_y)$ ,  $(\alpha_z, \beta_z)$  рассчитываются исходя из условий на границах  $y = \pm 1$ ,  $z = \pm 1$  соответственно. Равенство (1.52) обеспечивает для функции  $v(y, z)$  выполнение необходимых условий на границе  $D$  при суммировании  $v = v^y + v^z$ . В случае других типов краевых задач при записи  $v^y(y, z)$  как функции переменной  $y$  и  $v^z(y, z)$  как функции переменной  $z$  будем использовать также квадратичные и кубические представления.

При дифференцировании  $\mathcal{P}(u, y, z)$  используем следующее свойство фундаментальных многочленов интерполяции:

$$\sum_{m=1}^N \frac{\omega_m}{x_s^{\text{ch}} - x_m^{\text{ch}}} T_N(x_s^{\text{ch}}) = \delta_{sm}, \quad s, m = \overline{1, N},$$

где  $\delta_{sm}$  – символ Кронекера. Из него следует, что при  $y = y_j^{\text{ch}}$ ,  $j = \overline{1, N}$ , полином  $\mathcal{P}(u, y, z)$  как функция переменной  $z$  совпадает с (1.3), (1.6), аналогичное свойство имеет место при  $z = z_k^{\text{ch}}$ ,  $k = \overline{1, K}$ . Таким образом, при  $y = y_j^{\text{ch}}$ ,  $z = z_k^{\text{ch}}$  можно воспользоваться выкладками (1.37)–(1.41). В итоге получаем матрицы, служащие для аппроксимации производных  $\mathbf{u}(y, z)$  по  $y$ :  $\mathcal{A}$ ,  $A$  размера  $N \times N$  и по  $z$ :  $\mathcal{B}$ ,  $B$  размера  $K \times K$ :

$$\begin{aligned} \mathfrak{U}_y \approx \mathcal{A}U + \mathcal{V}_y, \quad \mathfrak{U}_z \approx UB^T + \mathcal{V}_z, \quad \mathfrak{U}_{yy} \approx AU + \mathcal{V}_{yy}, \quad \mathfrak{U}_{zz} \approx UB^T + \mathcal{V}_{zz}, \\ \mathfrak{U}_{yz} \approx AUB^T + \mathcal{V}_{yz}. \end{aligned} \quad (1.53)$$

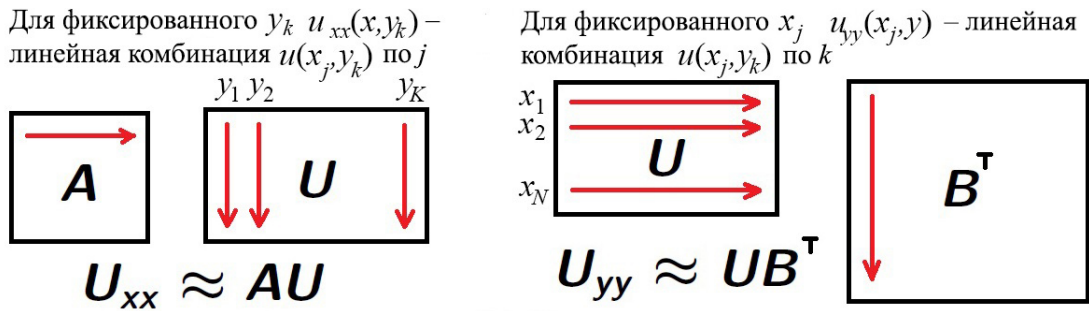
Здесь  $\mathcal{V}_\mu$  представляют матрицы значений производных  $v_\mu(y, z)$  на сетке  $(y_j, z_k)$ . Эти значения рассчитываются следующим образом:

$$\mathcal{V}_y = \mathcal{V}_y^y + \mathcal{A}\mathcal{V}_z^z, \quad \mathcal{V}_z = \mathcal{V}_y^y \mathcal{B}^T + \mathcal{V}_z^z, \quad \mathcal{V}_{yz} = \mathcal{V}_y^y \mathcal{B}^T + \mathcal{A}\mathcal{V}_z^z, \quad (1.54)$$

где  $\mathcal{V}_\mu^{y,z}$  – матрицы значений  $v_\mu^{y,z}(y_j, z_k)$ .

**Замечание 1.8.** Функции  $\alpha_y, \beta_y, \alpha_z, \beta_z$  за счёт условия (1.52) могут иметь разрывы в точках  $z = \pm 1$  и  $y = \pm 1$  соответственно. В экспериментах установлено, что осцилляции, возникающие из-за этого при аппроксимации производных функции  $v(y, z)$  по формулам (1.54), подавляются в итерационном процессе метода установления (см. п. 2.1.1) и не увеличивают порядок погрешности полученных решений.

На рис. 1.11 показана схема аппроксимации вторых производных по  $y$  и по  $z$  для функции  $u(y, z)$ , удовлетворяющей однородным граничным условиям.



**Рис. 1.11.** Схема аппроксимации вторых производных на основе произведений матриц

В случае произвольной размерности задачи  $d$  рассмотрим задачу Дирихле в гиперкубе  $D = [-1, 1]^d$ . Пусть  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) \in C^2(D)$  – искомая функция,  $\mathbf{x} = (x^1, x^2, \dots, x^d)$ . Введём в  $D$  сетку с узлами  $(x_{j_1}^1, \dots, x_{j_d}^d)$ . Здесь  $x_{j_\delta}^\delta = (x_{j_\delta}^{\text{ch}})^\delta = \cos \frac{2j_\delta - 1}{2N_\delta} \pi$ ,  $j_\delta = \overline{1, N_\delta}$ ,  $N_\delta$  – число узлов по направлению  $\delta$ ,  $\delta = \overline{1, d}$ . Обозначим  $u\langle j_1 j_2, \dots, j_d \rangle = u(x_{j_1}^1, x_{j_2}^2, \dots, x_{j_d}^d)$ ,  $\mathbf{u}_\mu\langle j_1 j_2, \dots, j_d \rangle = \mathbf{u}_\mu(x_{j_1}^1, x_{j_2}^2, \dots, x_{j_d}^d)$  – одна из производных,  $\mu \in \{x^1, \dots, x^d, x^1 x^1, x^1 x^2, \dots, x^d x^d\}$ ,  $u = \mathbf{u} - v$ , см. (1.12). Пусть  $U = (u\langle j_1 j_2, \dots, j_d \rangle)$ ,  $\mathbf{u}_\mu = (\mathbf{u}_\mu\langle j_1 j_2, \dots, j_d \rangle)$  –  $d$ -мерные массивы размера  $N_1 \times N_2 \times \dots \times N_d$ . Для аппроксимации решения  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  используем прямое произведение полиномов (1.3), (1.6):

$$\mathcal{P}(u, \mathbf{x}) = \mathcal{P}(u, x^1, \dots, x^d) = \sum_{j_1=1}^{N_1} \dots \sum_{j_d=1}^{N_d} u\langle j_1 j_2, \dots, j_d \rangle \prod_{k=1}^d \frac{\zeta(x^k, x_{j_k}^k) T_{N_k}(x^k)}{(x^k - x_{j_k}^k) T'_{N_k}(x_{j_k}^k)}. \quad (1.55)$$

Тогда  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) \approx P_d(u, \mathbf{x}) + v(\mathbf{x})$ ,  $P_d$  удовлетворяет однородным, а  $v(\mathbf{x})$  – неоднородным граничным условиям и строится аналогично 2D случаю. По аналогии с (1.37)–(1.41), получаем матрицы размеров  $N_1 \times N_1; \dots; N_d \times N_d$ , служащие для аппроксимации производных  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  по переменным  $x^1, \dots, x^d$ . Обозначим эти матрицы  $\mathcal{A}_1, A_1; \dots; \mathcal{A}_d, A_d$ .

**Определение 1.1.**  $\delta$ -произведением матрицы  $A_\delta = (a_{js})_{N_\delta \times N_\delta}$ , аппроксимирующей производную, и массива  $U$  будем называть массив  $\alpha_\delta = A_\delta \times^\delta U$ , элементы которого определяются по формуле

$$\alpha_\delta \langle j_1, \dots, j_{\delta-1}, k, j_{\delta+1}, \dots, j_d \rangle = \sum_{s=1}^{N_\delta} a_{ks} u \langle j_1, \dots, j_{\delta-1}, s, j_{\delta+1}, \dots, j_d \rangle,$$

$$k = \overline{1, N_\delta}, \quad \delta = \overline{1, d}.$$

Графическая интерпретация введённого определения в частном трёхмерном случае на основе операций со слоистыми 3D массивами дана в [172].

Введённая операция  $\delta$ -произведения позволяет представить аппроксимацию операций дифференцирования в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathfrak{U}_{x^1} &\approx \mathcal{A}_1 \times^1 U + \mathcal{V}_{x^1}, \dots, \mathfrak{U}_{x^d} \approx \mathcal{A}_d \times^d U + \mathcal{V}_{x^d}, \\ \mathfrak{U}_{x^1 x^1} &\approx A_1 \times^1 U + \mathcal{V}_{x^1 x^1}, \dots, \mathfrak{U}_{x^d x^d} \approx A_d \times^d U + \mathcal{V}_{x^d x^d}, \\ \mathfrak{U}_{x^1 x^2} &\approx \mathcal{A}_1 \times^1 \mathcal{A}_2 \times^2 U + \mathcal{V}_{x^1 x^2}, \dots, \mathfrak{U}_{x^{d-1} x^d} \approx \mathcal{A}_{d-1} \times^{d-1} \mathcal{A}_d \times^d U + \mathcal{V}_{x^{d-1} x^d}. \end{aligned} \quad (1.56)$$

Несложно проверить (см. [172] для случая  $d = 3$ ), что введённые операции  $\delta$ -произведения являются ассоциативными, в том смысле, что, например,

$$\mathcal{A}_1 \times^1 \mathcal{A}_2 \times^2 U = \mathcal{A}_2 \times^2 \mathcal{A}_1 \times^1 U.$$

Кроме того, эти произведения можно комбинировать со спектральными разложениями аппроксимирующих матриц (см. (1.49)):

$$\mathcal{A}_1 \times^1 U = R_{A_1} \times^1 [D_{A_1} \times^1 (R_{A_1}^{-1} \times^1 U)].$$

Отметим, что если выражение содержит несколько операций  $\delta$ -произведения, то эти операции должны выполняться справа налево.

## § 1.4. Квадратурные формулы для функций с особенностями у границы области интегрирования

Последний параграф этой главы посвящён решению задачи, возникающей как при анализе течений полимерной жидкости с пограничными слоями, так и при вычислении интеграла столкновений в задачах волновой турбулентности. Конкретно, исследуем проблему расчёта интегралов вида

$$I^h = I^h(u) = \int_{-1}^1 h(x)u(x)dx, \quad (1.57)$$

где  $h(x)$  имеет точки ветвления или другие особенности на границах отрезка  $[-1, 1]$  либо в непосредственной близости от границ отрезка,  $u(x)$  – функция высокого порядка гладкости. Далее будем рассматривать случаи  $h(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$  и  $h(x) = ((1+\epsilon)-x)^\alpha$ , где  $\alpha > -1$ ,  $\beta > -1$  – априори неизвестные действительные числа,  $0 < \epsilon \ll 1$ . Будем иметь в виду также, что при решении эволюционной задачи  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\epsilon$  могут изменяться. Возможны также ситуации, когда  $h(x)$  имеет логарифмическую особенность или существенно особую точку при  $x = \pm 1$ , см., например, замечание 4.1 и обсуждение результатов в конце п. 4.4.4.

Для решения проблемы интегрирования используем фундаментальные результаты теории ортогональных функций (квадратурные формулы максимального алгебраического порядка точности), теории меры (обобщённое неравенство Маркова–Стильтьеса) и теории разностных аппроксимаций (формула Эйлера–Маклорена). Конкретно, используем следующие результаты.

**1. Квадратурные формулы Гаусса–Якоби.** Пусть в формуле (1.57)  $h(x) = \gamma(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$ ,  $\alpha > -1$ ,  $\beta > -1$ . Построим последовательность многочленов Якоби, ортонормированных на отрезке  $[-1, 1]$  с весом  $\gamma(x)$ :  $p_0(x), p_1(x), \dots$ , таких что

$$\int_{-1}^1 \gamma(x)p_n(x)p_m(x)dx = \delta_{mn},$$

где  $\delta_{mn}$  – символ Кронекера. Пусть  $\lambda_n > 0$  – коэффициент при старшей степени полинома  $p_n$ , а  $x_1^q, \dots, x_n^q$  – корни  $p_n$ , которые являются попарно различными, принадлежащими отрезку  $[-1, 1]$ , числами (о свойствах ортогональных



многочленов и их корней см. [215, гл. 1, 2]). Тогда для расчёта интеграла (1.57) имеет место квадратурная формула:

$$I^h(u) \approx I_n^\gamma = I_n^\gamma(u) = \sum_{k=1}^n \omega_k^q u(x_k^q), \quad \omega_k^q = -\frac{\lambda_{n+1}}{\lambda_n} \frac{1}{p_{n+1}(x_k^q)p_n'(x_k^q)}. \quad (1.58)$$

Числа  $x_k^q$  и  $\omega_k^q$  называются соответственно узлами и весами квадратурной формулы  $I_n^\gamma$ ,  $k = \overline{1, n}$ . Для весов имеет место более удобное представление:  $\omega_j^q = \left[ \sum_{k=0}^n (p_k(x_j^q))^2 \right]^{-1}$ , см. [216, р. 48]. Имеются также алгоритмы быстрого вычисления узлов и весов с помощью построения матрицы Якоби (см. [203, sec. 2.7.5] и [193, ch. 12, gauss.m]).

Рассмотрим функционал погрешности формулы (1.58):  $E_n^\gamma(u) = I^\gamma - I_n^\gamma$ . Для  $E_n^\gamma(u)$  имеется классическая оценка через супремум норму  $\|u^{(2n)}\|$ , см. теорему I.18 приложения I. Однако в случае ограниченной гладкости  $u(x)$  или при наличии у её аналитического продолжения особых точек в комплексной плоскости, величина  $\|u^{(2n)}\|$  может не существовать либо расти слишком быстро, чтобы гарантировать сходимость. В связи с этим целесообразно применять более общую оценку погрешности из теоремы I.19, дающую связь скорости сходимости квадратурной формулы и гладкости  $u(x)$ .

**Замечание 1.9.** Несмотря на то, что формулы Гаусса–Якоби при вычислении интегралов (1.57) обладают максимальным алгебраическим порядком точности, в экспериментах п. 2.2.1 с подынтегральными функциями, возникающими в реальных приложениях, показано, что даже при известных  $\alpha, \beta$  эти формулы существенно уступают формулам, предложенным ниже.

**2. Формулы Гаусса для функций с разрывами второго рода.** Квадратурная формула, описанная выше, при поиске интегралов (1.57) с функцией  $u(x)$  высокой гладкости является оптимальной (имеет наивысшую алгебраическую степень точности), если известно, что функция  $h(x)$  имеет вид  $h(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$ . Однако, как отмечено выше, числа  $\alpha, \beta$  могут меняться, а также возможны случаи, когда вид функции  $h(x)$  неизвестен, но известно, что  $h(x)$  либо её производные терпят разрыв второго рода в окрестностях точек  $\pm 1$ . В таком случае полезным является результат, полученный

с применением обобщённого неравенства Маркова–Стильтьеса – лемма I.1 приложения I, в которой дана оценка погрешности приближения интеграла от  $\psi(x) = h(x)u(x)$  с помощью классической квадратурной формулы Гаусса, КФГ. Из этой леммы можно получить следующий результат.

**Лемма 1.3.** *Если в (1.57)  $u(x) \in C^{\nu-1}[-1, 1]$ ,  $\nu \geq 1$ ,  $h(x) = (1-x)^\alpha$ ,  $\alpha$  – нецелое число,  $-1 < \alpha < \nu/2 - 1$ , и  $\psi \in \mathcal{M}_{2n}^+(-1, 1)$  (см. обозначения леммы I.1), то*

$$|E_n^1(\psi)| \leq M \frac{j_1^{2(\alpha+1)}}{2^{\alpha+1}(1+\alpha)} n^{-2(1+\alpha)} \text{ при всех } n = 1, 2, \dots, \quad (1.59)$$

где  $M = \|u\|$ ,  $j_1 \approx 2.4048$  – первый положительный ноль функции Бесселя нулевого порядка. Кроме того, если  $M > \pi(1+\alpha)$ , то при  $n \rightarrow \infty$

$$|E_n^1(\psi)| \sim C_{\alpha, M} n^{-2(1+\alpha)}, \text{ где } \frac{j_1^{2(\alpha+1)}}{2^{\alpha+1}} \left( \frac{M}{1+\alpha} - \pi \right) \leq C_{\alpha, M} \leq \frac{M j_1^{2(\alpha+1)}}{2^{\alpha+1}(1+\alpha)}. \quad (1.60)$$

Если в условиях леммы  $\nu/2 - 1 \geq \alpha$ , то выполнены оценки вида (I.11) при  $\gamma(x) = 1$ , в которых  $E_{2n}^b(u)$  оценивается с использованием теоремы I.15.

На практике достаточно требовать монотонность подынтегральной функции и её производных в малой окрестности точки  $x = 1$ , т.е. нужно, чтобы  $\psi \in \mathcal{M}_{2n}^+(1-\delta, 1)$ , где  $\delta > 0$  – малое число. При этом если в точке  $x = 1 - \delta$  условие монотонности нарушается, то область интегрирования можно разбить на два отрезка  $[-1, 1] = [-1, 1 - \delta] \cup [1 - \delta, 1]$ , и в каждом отрезке строить КФГ.

Результат, аналогичный лемме 1.3, имеет место при  $h(x) = (1+x)^\beta$ , где  $-1 < \beta$  – нецелое число.

В диссертации предложена и проверена численно идея об улучшении оценок (1.59), (1.60) за счёт замен переменной интегрирования в (1.57) вида  $x = \varkappa(y)$ , где  $\varkappa(y)$  – аналитическое отображение отрезка  $[-1, 1]$  в себя,  $\varkappa(-1) = -1$ ,  $\varkappa(1) = 1$ . Такая замена приводит к интегралу

$$I^h(u) = \int_{-1}^1 h(\varkappa(y)) u(\varkappa(y)) \varkappa'(y) dy. \quad (1.61)$$

Далее для расчёта (1.61) будем применять КФГ с узлами  $y_1, \dots, y_n$  и рассмотрим три вида функций  $\varkappa(y)$ .

**Теорема 1.4.** Пусть  $u(x) \in C^{\nu-1}[-1, 1]$ ,  $\nu \geq 1$ , интегранд (1.57) имеет особенность в одной из точек  $x = \pm 1$ ,  $h(x) = (1 \mp x)^\alpha$ ,  $\alpha$  – нецелое число,  $-1 < \alpha < \nu/2 - 1$ , и  $\psi \in \mathcal{M}_{2n}^\pm(-1, 1)$ .

1. Зададим

$$\varkappa(y) = \varkappa_\pm(y) = \pm 1 + \varepsilon \sinh \left[ \frac{y \mp 1}{2} \sinh^{-1} \frac{2}{\varepsilon} \right], \quad (1.62)$$

где  $\varepsilon > 0$  – малое число,  $\sinh^{-1}$  – обратная функция к  $\sinh$ . Тогда погрешность КФГ при вычислении (1.61) удовлетворяет оценке:

$$|E_n^1(\psi)| \leq \frac{M\tilde{\varepsilon}}{2^{\alpha+1}} \frac{j_1^{2(\alpha+1)}}{2^{\alpha+1}(1+\alpha)} n^{-2(1+\alpha)}, \quad \tilde{\varepsilon} \sim \varepsilon \ln[1/\varepsilon] \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (1.63)$$

2. Пусть

$$\varkappa(y) = \sin(\pi y/2). \quad (1.64)$$

Тогда погрешность КФГ при вычислении (1.61) удовлетворяет оценке:

$$|E_n^1(\psi)| \leq M \frac{(j_1^2 \pi)^{2(\alpha+1)}}{2^{5(\alpha+1)}(1+\alpha)} n^{-4(1+\alpha)}. \quad (1.65)$$

3. Если функция  $u(x)$  аналитична на отрезке  $[-1, 1]$  и

$$\varkappa(y) = \tanh \left[ A \sinh \frac{2By}{1-y^2} \right], \quad (1.66)$$

то скорость сходимости КФГ выше степенной и ниже экспоненциальной. Здесь  $A, B$  – положительные параметры, их рекомендуемые значения  $A = \pi/2$ ,  $B = \pi/4$ , (см. [152] и [203, sec. 2.9.2]).

**Замечание 1.10.** Замены переменной (1.64), (1.66) приводят к симметричному сгущению узлов в окрестности точек  $\pm 1$ , поэтому могут быть использованы, когда интегранд имеет особенности в окрестностях обеих точек  $x = -1$  и  $x = 1$ . Замену (1.62) можно обобщить для учёта двух таких особенностей:

$$\mathfrak{a}(y) = [(\mathfrak{a}_+^{-1} + \mathfrak{a}_-^{-1})/2]^{-1}, \quad (1.67)$$

где верхний индекс “−1” обозначает обратную функцию. Причём за счёт наличия параметра  $\varepsilon$  замена (1.67) обеспечивает более гибкую адаптацию к особенностям, чем (1.64), (1.66). Замены переменной (1.62), (1.67) являются частным случаем отображения (1.30) и его обобщения (2.32), описанного в § 2.2. Отметим также, что поскольку, как правило,  $\psi = hu \notin \mathcal{M}_{2n}^+(-1, 1) \cap \mathcal{M}_{2n}^-(-1, 1)$ , то применение леммы I.1 для анализа сходимости при наличии двух указанных особенностей невозможно.

**Замечание 1.11.** Оценка погрешности для (1.64) основана на равенствах  $\mathfrak{a}'(-1) = \mathfrak{a}'(1) = 0$ . В качестве обобщения можно рассмотреть функцию  $\mathfrak{a}(y)$ , удовлетворяющую условиям  $\mathfrak{a}^{(j)}(-1) = \mathfrak{a}^{(j)}(1) = 0$  при  $j = \overline{1, r-1}$ ,  $r \geq 2$ . Повторяя рассуждения из доказательства теоремы 1.4 при использовании такой замены, получаем оценку погрешности

$$|E_n^1(\psi)| \sim \tilde{C}_{\alpha, M} n^{-2r(1+\alpha)} \text{ при } n \rightarrow \infty,$$

где  $\tilde{C}_{\alpha, M}$  зависит только от  $M$  и  $\alpha$ . Из этой оценки видно, что порядок сходимости увеличивается пропорционально  $r$ . Указанные обобщения можно получить, если, например, возвести функцию (1.64) в степень  $r$  или использовать в качестве  $\mathfrak{a}(y)$  полиномиальную функцию из [210].

**Замечание 1.12.** Тот факт, что при использовании (1.66) скорость сходимости становится выше степенной, связан со свойством  $\mathfrak{a}^{(j)}(-1) = \mathfrak{a}^{(j)}(1) = 0$ , где  $j \in \mathbb{N}$ . Замена переменной  $\mathfrak{a}(y)$ , удовлетворяющая таким требованиям, была впервые предложена в [217]. Однако в этой работе мы воспользовались известным отображением из [152].

**3. Формулы Мори для функций с особенностями.** Применение замен переменной  $\mathfrak{a}(y)$ , таких что  $\mathfrak{a}^{(j)}(\pm 1) = 0$  при  $j = \overline{1, r-1}$ , и формулы трапеций с равномерным распределением узлов на отрезке  $[-1, 1]$  по переменной  $y$  даёт высокоточную квадратурную формулу для расчёта интегралов с особенностями в окрестностях точек  $\pm 1$ . Оценки погрешности таких приближений строятся на основе формулы Эйлера–Маклорена (общий подход

описан, например, в [203, сес. 2.9]). В работе [152] на основе такой идеи и замены (1.66) предложена так называемая двуэкспоненциальная квадратурная формула «double exponential formula»:

$$I_n^{\text{DE}}(hu) = \frac{2}{n+1} \sum_{k=1}^n h(\mathfrak{ae}(-1+ks))u(\mathfrak{ae}(-1+ks))\mathfrak{ae}'(-1+ks), \quad s = \frac{2}{n+1}.$$

Оценка погрешности этой формулы характеризуется теоремой I.20.

Аналогичную идею мы будем использовать для приближения интегралов по неограниченным областям, см. теорему I.21.

**4. Модификации формул Clenshaw–Curtis**, см. определение I.13. Рассмотрим интеграл (1.57), в котором  $h(x) = (1 \pm x)^\alpha$ . Приближим функцию  $u(x)$  частичной суммой ряда Фурье:  $h(x) \approx \pi_M(u, x) = \sum_{m=0}^M a_m T_m(x)$ . Тогда

$$I^h \approx I_M^h = \sum_{m=0}^M a_m \int_{-1}^1 (1 \pm x)^\alpha T_m(x) dx = \sum_{m=0}^M a_m \mathcal{T}_m^\alpha, \quad (1.68)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_m^\alpha &= \int_{-1}^1 (1 \pm x)^\alpha T_m(x) dx = \frac{(\pm 1)^m}{2^{1+\alpha}(p^2 - m^2)((1 + \alpha)^2 - m^2)} \times \\ &\times \{4^{\alpha+1}\alpha(m^2 + \alpha + \alpha^2) + m(1 + 2\alpha)[-(m + \alpha)G_\alpha^{-m} + (\alpha - m)G_\alpha^m]\}, \end{aligned} \quad (1.69)$$

$G_\alpha^m := {}_2F_1(m - \alpha - 1, -2\alpha; m - \alpha; -1)$  – гипергеометрическая функция. Здесь  ${}_2F_1(a, b; c; x) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n x^n}{(c)_n n!}$ ,  $(a)_n = (a + 1) \dots (a + n)$  – символ Похгаммера.

Отметим, что при  $\alpha = 1/2$  формула (1.69) существенно упрощается:

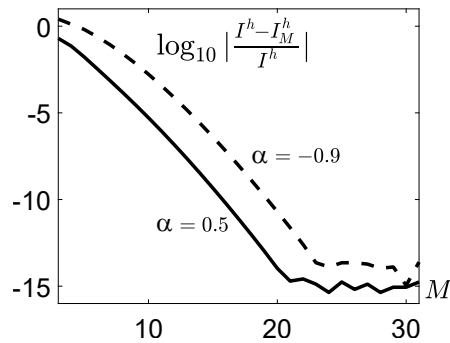
$$\mathcal{T}_m^{\frac{1}{2}} = 4\sqrt{2}(\pm 1)^m \frac{3 - 4m^2}{(1 - 4m^2)(9 - 4m^2)}.$$

Имеет место следующий результат.

**Теорема 1.5.** *Погрешность аппроксимации (1.68) определяется формулой*

$$|I^h - I_M^h| \leq 3 \frac{2^{1+\alpha}}{1 + \alpha} E_M^b(u).$$

Привлекая теоремы I.1, I.3, I.4 для случая, когда функция  $u(x)$  имеет конечный порядок гладкости, или является аналитической на отрезке  $[-1, 1]$ , или целой, получаем соответствующие оценки погрешности для  $I_M^h$ . Доказательство теоремы 1.5 приведено в приложении II. На рис. 1.12 показана погрешность интегрирования по формуле (1.68) в логарифмической шкале при  $u(x) = u_1(x) = \exp(10x)$ ,  $\alpha = 0.5$  и  $\alpha = -0.9$ .



**Рис. 1.12.** Десятичный логарифм относительной погрешности интегрирования функций  $\sqrt{1+x} u_1(x)$  (сплошная линия) и  $(1+x)^{-0.9} u_1(x)$  (пунктир) при  $u_1(x) = \exp(10x)$

**5. Расчёт интеграла (1.57) при  $h(x) = ((1 + \epsilon) - x)^\alpha$ , где  $\alpha > -1$ ,  $0 < \epsilon \ll 1$ .** Сделаем в интеграле (1.57) замену переменной  $x = g^{-1}(y)$ , где  $g(x)$  определяется по формуле (1.30). Далее в выражении для  $g(x)$  осуществим предельный переход  $\epsilon \rightarrow 0$ ,  $\delta \rightarrow 1 + \epsilon$ . Получаем

$$x = 1 + \epsilon - (1 + 2/\epsilon)^{y/2} \sqrt{\epsilon^2 + 2\epsilon}.$$

Якобиан замены

$$J_\epsilon(y) = -\frac{1}{2} \sqrt{\epsilon^2 + 2\epsilon} \left(1 + \frac{2}{\epsilon}\right)^{y/2} \ln \left(1 + \frac{2}{\epsilon}\right).$$

Для расчёта интеграла, полученного после замены, используем КФГ.

Итак, **основные результаты главы** состоят в следующем.

1. Разработаны модификации интерполяционных полиномов с узлами Чебышёва и ДРБИ для приближения функций, являющихся решениями краевых задач и задач Коши. Для разработанных методов приближения получены оценки погрешностей. Реализованы обобщения методов для приближения функций нескольких переменных.

2. Получены матричные аппроксимации операторов дифференцирования и интегрирования в краевых и начальных задачах с особенностями. С гарантией точности рассчитаны числа обусловленности, нормы и спектральные разложения этих матриц.
3. Предложены новые быстросходящиеся методы интегрирования функций с особыми точками в окрестности границы области интегрирования, получены оценки их погрешности.

## Глава 2

# Нелокальный метод без насыщения для решения краевых и начально-краевых задач

Методы, предложенные в гл. 1, позволяют существенно уменьшить объёмы памяти, требуемые для приближения решений задач с особенностями. Можно сказать, что количество информации, необходимое для восстановления решения с заданной точностью в классе полиномиальных и дробно-рациональных функций, ДРФ, является асимптотически близким к минимальному (по поводу ДРФ см., например, результаты на рис. 1.3). Глава 2 диссертации направлена на использование этих методов приближения для разработки одного подхода к численному решению краевых и начально-краевых задач для нелинейных дифференциальных уравнений и задач Коши для интегродифференциальных кинетических уравнений, эффективного с точки зрения свойств II и III, анонсированных в § 0.3 введения; а также на обоснование и тестирование алгоритмов, созданных на основе этого подхода. Отметим, что с точки зрения минимизации числа операций (свойство II) при решении задач размерности 2 и выше принципиальной является возможность приближения неизвестной функции прямым (тензорным) произведением одномерных интерполяций. Как мы увидим, такие приближения позволяют строить вычислительные схемы, близкие к экономичным (порядок числа операций близок к числу узлов), сохраняя при этом порядок сходимости, характерный для наилучших приближений. Конечно, эти прямые произведения возможно построить лишь в областях специального вида (в диссертации такие области называются каноническими), однако, как показано в п. 1.1.3, множество областей можно существенно расширить, используя различные системы координат и замены переменной. В областях сложной геометрии будем использовать комбинацию предложенного подхода и методов декомпозиции, см. § 2.7. С точки зрения уменьшения вклада вычислительной погрешности (свойство III из § 0.3) важным является достаточно медленный рост чисел обусловленности и норм матриц алгоритма. В п. 1.3.2 показано, что использование в этом контексте спектральных разложений матричных аппроксимаций операторов



дифференцирования обеспечивает существенные преимущества.

Структура главы следующая. В § 2.1 описана схема алгоритма решения задач произвольной размерности, основанная на применении метода коллокаций и приближений, описанных в гл. 1; получены СЛАУ в форме уравнений Сильвестра и их тензорных обобщений; построены быстрые методы решения этих уравнений. В § 2.2 описан вариант алгоритма для решения задач Коши для КУ: разработаны и протестированы быстросходящиеся кубатурные формулы для расчёта интеграла столкновений, а также методы поиска приближенного решения с учётом его особенностей. § 2.3 посвящён тестированию алгоритма в задачах с решениями различной гладкости. Численно установлено, что алгоритм не имеет насыщения. В § 2.4 получены апостериорные оценки погрешности метода приближения и вычислительной погрешности алгоритма. § 2.5 содержит описания модификаций алгоритма для решения краевых задач с особыми точками. Дальнейшие исследования (см. § 2.6) посвящены сравнению точности и быстродействия разработанного алгоритма, метода конечных элементов и метода коллокаций и наименьших квадратов в модельной задаче о течении полимерной жидкости в канале с эллиптическим сечением. В § 2.7 описаны комбинации предложенного подхода, методов декомпозиции и альтернирующего метода Шварца для решения краевых задач в областях, допускающих разбиения на подобласти канонических форм.

Основой предложенного метода является применение единого (нелокального) приближения неизвестной функции полиномом/ДРФ (1D случай) либо прямым произведением полиномов/ДРФ (задачи размерности 2 и выше). Скорости сходимости используемых приближений определяются гладкостью искомой функции, что соответствует определению метода без насыщения. В связи с этим разработанный метод будем именовать далее *нелокальным методом без насыщения*<sup>1</sup>, *НМБН*, а соответствующие алгоритмы – *нелокальными алгоритмами без насыщения*, *НАБН*. Детали реализации НАБН в виде комплексов программ для ЭВМ см. в § 2.8.

---

<sup>1</sup>Большинство методов, в оценках погрешности которых наблюдается строгая связь с гладкостью искомых функций (методов без насыщения), априори основаны на нелокальных приближениях. Однако имеются примеры локальных методов приближения – квадратурные формулы трапеций для интегрирования периодических функций, двуэкспоненциальные формулы Мори для приближения интегралов по отрезку [152], [203, sec. 2.9], – которые не имеют насыщения.

## § 2.1. Итерационный алгоритм решения нелинейных задач с особенностями

В данном разделе будут описаны алгоритмы решения краевых и начально-краевых задач для квазилинейных уравнений эллиптического типа второго порядка вида

$$\sum_{i,j=1}^d \tilde{a}_{ij}(\mathbf{u}, \mathbf{x}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^i \partial x^j} + \sum_{k=1}^d b_k(\mathbf{u}, \mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x^k} = f_0(\mathbf{u}, \mathbf{x}) \quad (2.1)$$

и уравнений параболического типа вида

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \sum_{i,j=1}^d \tilde{a}_{ij}(\mathbf{u}, t, \mathbf{x}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^i \partial x^j} + \sum_{k=1}^d b_k(\mathbf{u}, t, \mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x^k} = f_0(\mathbf{u}, t, \mathbf{x}). \quad (2.2)$$

Здесь  $d$  – размерность задачи,  $t \geq 0$  – время,  $\mathbf{x} = (x^1, \dots, x^d) \in D \subset \mathbb{R}^d$  – пространственные переменные,  $\tilde{a}_{ij}$ ,  $b_k$ ,  $f_0$  – заданные функции ( $\tilde{a}_{ij}$  будем называть главными коэффициентами уравнения);  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  – решение (2.1) и  $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$  – решение (2.2) имеют достаточную степень гладкости в областях  $D$  и  $\mathbb{R}^+ \cup D$  вплоть до их границ. Предполагается, что собственные числа матрицы главных коэффициентов  $\tilde{A} = (\tilde{a}_{ij})$  имеют один знак при любых  $t \geq 0$  и  $\mathbf{x} \in D$ .

Для создания алгоритмов будет удобно записать уравнения (2.1) и (2.2) в виде

$$\Delta \mathbf{u} = f(\mathbf{u}, \mathbf{x}), \quad \mathbf{u}_t + \Delta \mathbf{u} = f(\mathbf{u}, t, \mathbf{x}) \quad (2.3)$$

соответственно, где  $\Delta \mathbf{u} = \sum_{k=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial (x^k)^2}$  – оператор Лапласа, нижний индекс « $t$ » означает дифференцирование по времени,

$$f = f_0 - \sum_{i,j=1, i \neq j}^d \tilde{a}_{ij} \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^i \partial x^j} - \sum_{k=1}^d (\tilde{a}_{kk} - 1) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial (x^k)^2} - \sum_{k=1}^d b_k \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x^k}.$$

### 2.1.1. Алгоритм решения краевых задач для уравнений эллиптического типа

В этом пункте, имея в виду представление (2.3) для эллиптического уравнения, ограничимся случаем  $D = [-1, 1]^d = \{\mathbf{x} : -1 \leq x^1, \dots, x^d \leq 1\}$ ,  $d = 1, 2, \dots$ , переобозначим, где необходимо, переменные:  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  и займёмся разработкой алгоритма решения краевых задач для следующих уравнений:

$$\begin{aligned}
d = 1 : \mathbf{u}_{xx} &= f(\mathbf{u}, x), & d = 2 : \mathbf{u}_{yy} + \mathbf{u}_{zz} &= f(\mathbf{u}, y, z), \\
d\text{- произвольное} : & \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial (x^1)^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial (x^2)^2} + \dots + \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial (x^d)^2} &= f(\mathbf{u}, x^1, \dots, x^d).
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Граничные условия для уравнений (2.4) выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned}
d = 1 : \mathbf{u}(-1) &= a, \quad \mathbf{u}(1) = b, \quad a, b \in \mathbb{R}, \\
d = 2 : \mathbf{u}(\pm 1, z) &= \varphi_1^\pm(z), \quad \mathbf{u}(y, \pm 1) = \varphi_2^\pm(y), \\
d \text{ произвольное} : &
\end{aligned} \tag{2.5}$$

$$\mathbf{u}(x^1, \dots, x^{\delta-1}, \pm 1, x^{\delta+1}, \dots, x^d) = \psi_\delta^\pm(x^1, \dots, x^{\delta-1}, x^{\delta+1}, \dots, x^d), \quad \delta = \overline{1, d},$$

причём значения функций  $\varphi_{1,2}^\pm$  и  $\psi_{1,\dots,d}^\pm$  согласованы в угловых точках области  $[-1, 1]^2$  и на рёбрах области  $[-1, 1]^d$  соответственно. Для аппроксимации функции  $\mathbf{u}$  в работе будет использовано представление (см. замечание 2.1)

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x}) + v(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in D, \tag{2.6}$$

где функция  $u(\mathbf{x})$  принимает нулевые значения на границе  $D$ , а функция  $v(\mathbf{x})$  реализует заданные граничные условия.

После аппроксимации решения и его производных в уравнениях (2.4) приходим к нелинейным соотношениям, записанным для векторов ( $d = 1$ ), матриц ( $d = 2$ ) или  $d$ -мерных массивов. Будем искать решения этих нелинейных соотношений с помощью *метода установления* [6, гл. 10, § 5]. Для этого представим (2.4), (2.5) в общем виде:

$$\Delta \mathbf{u} = f(\mathbf{u}, \mathbf{x}), \quad \mathbf{u}|_{\partial D} = g_b(\mathbf{x}). \tag{2.7}$$

Метод установления использует дополнительную *фиктивную временную переменную*  $t$  и нестационарный оператор – *регуляризацию*  $B_t$  для организации итерационного процесса. Далее, осуществляется переход от задачи (2.4), (2.5) к начально-краевой задаче с неизвестной функцией  $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ :

$$B_t \mathbf{u} = \Delta \mathbf{u} - f(\mathbf{u}, \mathbf{x}), \quad \mathbf{u}(t, \mathbf{x})|_{x \in \partial D} = g_b(\mathbf{x}), \quad \mathbf{u}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}). \tag{2.8}$$

Решение задачи (2.7) ищется как предел решений (2.8) при  $t \rightarrow \infty$ . Для построения вычислительных схем рассмотрим *простую регуляризацию*  $B_t = \frac{\partial}{\partial t}$

и регуляризацию Соболева  $B_t = (k_1 - k_2 \Delta) \frac{\partial}{\partial t}$ , где  $k_1, k_2 > 0$  – параметры. Введём дискретизацию по переменной  $t$  с постоянным шагом  $\tau$  и узлами  $t_k = \tau k$ ,  $k = 1, 2, \dots$ . Обозначим  $\widehat{u}$ ,  $u$  – значения решений, полученные на  $k$ -м и  $(k - 1)$ -м шагах по времени, удовлетворяющие однородным краевым условиям, см. (2.6). Используя разностное представление производной  $\frac{\partial}{\partial t} u \approx \frac{\widehat{u} - u}{\tau}$ , выведем соотношения для расчёта значений  $\widehat{u}$  по значениям  $u$  для случая простой регуляризации:

$$\widehat{u} - \tau \Delta \widehat{u} = u - \tau f(\mathbf{u}, \mathbf{x}) + \tau \Delta v \quad (2.9)$$

и для случая регуляризации Соболева:

$$k_1 \widehat{u} - (k_2 + \tau) \Delta \widehat{u} = (k_1 - k_2 \Delta) u - \tau f(\mathbf{u}, \mathbf{x}) + \tau \Delta v. \quad (2.10)$$

Ниже для упрощения выкладок слагаемое  $\tau \Delta v$ , стоящее в правых частях (2.9), (2.9), будем опускать. Сходимость полученного итерационного процесса для каждой конкретной задачи может быть исследована на основе теорем о неподвижных точках нелинейных операторов [218, гл. VIII]. Условие останова процесса

$$\|B_t \mathbf{u}\| = \|\Delta \mathbf{u} - f(\mathbf{u}, \mathbf{x})\| \leq \varepsilon_S \quad (2.11)$$

даёт приближённое решение задачи (2.7) с невязкой установления  $\varepsilon_S$ . В качестве начальных данных  $\mathbf{u}_0(\mathbf{x})$  во многих задачах можно использовать нулевые значения.

Далее рассмотрим пример построения алгоритма с использованием простой регуляризации. В соответствии с (2.9) для решения (2.4), (2.5) получим:

$$\begin{aligned} d = 1 : & \left(1 - \tau \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \widehat{u} = u - \tau f(\mathbf{u}, x), \\ d = 2 : & \left(1 - \tau \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\right) \widehat{u} = u - \tau f(\mathbf{u}, y, z), \\ d \text{ произвольное} : & \left(1 - \tau \left(\frac{\partial^2}{\partial (x^1)^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial (x^d)^2}\right)\right) \widehat{u} = u - \tau f(\mathbf{u}, \mathbf{x}). \end{aligned} \quad (2.12)$$

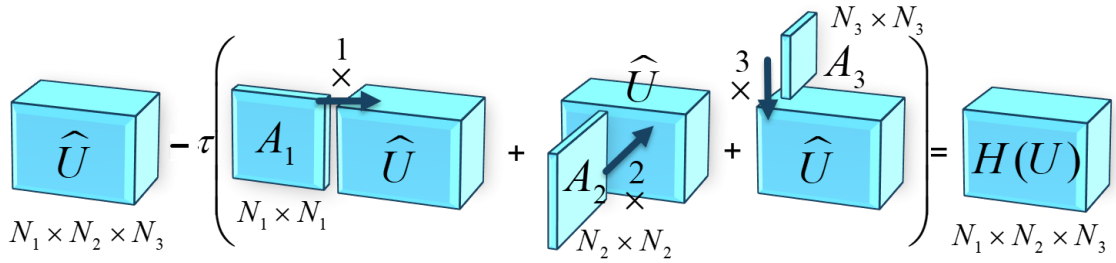
Используя представления (1.42), (1.53), (1.56) для приближения вторых производных в уравнениях (2.12), приходим к задачам линейной алгебры на каждом шаге метода установления:

$$(E - \tau A)\widehat{U} = U - \tau F(U + \mathcal{V}) = H(U), \quad (2.13)$$

$$(\widehat{U} - \tau(A\widehat{U} + \widehat{U}B^T)) = U - \tau F(U + \mathcal{V}) = H(U), \quad (2.14)$$

$$(\widehat{U} - \tau(A_1 \overset{1}{\times} \widehat{U} + A_2 \overset{2}{\times} \widehat{U} + \dots + A_d \overset{d}{\times} \widehat{U})) = U - \tau F(U + \mathcal{V}) = H(U), \quad (2.15)$$

где  $E$  – единичная матрица,  $\widehat{U}$ ,  $U$  – вектора, матрицы или массивы (в зависимости от размерности задачи), содержащие значения функций  $u = \mathbf{u} - v$  в узлах интерполяции на текущем и предыдущем временных слоях,  $\mathcal{V}$  содержит значения добавочной функции, а  $F$  – значения правой части в узлах интерполяции. Уравнение (2.14) представляет собой матричное уравнение Сильвестра, а (2.15) – его тензорное обобщение (рис. 2.1 для случая  $d = 3$ ).



**Рис. 2.1.** Схема  $\delta$ -произведений матриц и массивов в уравнении (2.15) при  $d = 3$

Воспользуемся теперь спектральными разложениями (1.49) матриц, аппроксимирующих вторые производные. Умножим (2.13) слева на матрицу  $R_A^{-1}$ ; умножим (2.14) слева на матрицу  $R_A^{-1}$ , справа на матрицу  $R_B^{-1}$ ; а также запишем  $\delta$ -произведения матриц  $R_{A_\delta}^{-1}$  и выражений, стоящих в левых и правых частях (2.15) (см. определение 1.1). В итоге получим следующие выражения:

$$\begin{aligned} (E - \tau D_A)\widehat{V} &= G(U), & \widehat{V} - \tau(D_A\widehat{V} + \widehat{V}D_B) &= G(U), \\ \widehat{V} - \tau(D_{A_1} \overset{1}{\times} \widehat{V} + D_{A_2} \overset{2}{\times} \widehat{V} + \dots + D_{A_d} \overset{d}{\times} \widehat{V}) &= G(U), \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$\text{где при } d = 1: \quad \widehat{V} = R_A^{-1}\widehat{U}, \quad G(U) = R_A^{-1}H(U),$$

$$\text{при } d = 2: \quad \widehat{V} = R_A^{-1}\widehat{U}R_B^{-1}, \quad G(U) = R_A^{-1}H(U)R_B^{-1}, \quad (2.17)$$

$$\text{при } d \geq 3: \quad \widehat{V} = R_{A_1}^{-1} \overset{1}{\times} \dots R_{A_d}^{-1} \overset{d}{\times} \widehat{U}, \quad G(U) = R_{A_1}^{-1} \overset{1}{\times} \dots R_{A_d}^{-1} \overset{d}{\times} H(U).$$

Отметим, что в последней строке операции нужно выполнять справа налево. Решения (2.16) даются простыми формулами:

при  $d = 1$  компоненты вектора  $\widehat{V}$  выражаются равенствами  $\hat{v}_j = \frac{g_j}{1-\tau d_A^j}$ ;  
при  $d = 2$  элементы матрицы  $\widehat{V}$  определяются равенствами  $\hat{v}_{jk} = \frac{g_{jk}}{1-\tau(d_A^j+d_B^k)}$ ;  
при  $d = 3$  элементы  $d$ -мерного массива  $\widehat{V} - \hat{v}\langle j_1, \dots, j_d \rangle = \frac{g\langle j_1, \dots, j_d \rangle}{1-\tau(d_{A_1}^{j_1}+d_{A_2}^{j_2}+\dots+d_{A_d}^{j_d})}$ .

Здесь  $g_j, g_{jk}, g\langle j_1, \dots, j_d \rangle$  есть компоненты вектора, элементы матрицы или массива  $G$  (в зависимости от размерности),  $d_A^j, d_B^k, d_{A_\delta}^{j_\delta}$  – собственные числа матриц  $A, B, A_\delta, j = \overline{1, N}, k = \overline{1, K}, j_\delta = \overline{1, N_\delta}, \delta = \overline{1, d}$ . После вычисления  $\widehat{V}$  выполняем операции

$$d = 1: \widehat{U} = R_A \widehat{V}, \quad d = 2: \widehat{U} = R_A \widehat{V} R_B, \quad d = 3: \widehat{U} = R_{A_1} \times \dots R_{A_d} \times \widehat{V} \quad (2.18)$$

и находим решения на текущем шаге метода установления, прибавляя к компонентам  $\widehat{U}$  значения добавочной функции  $v(x^1, \dots, x^d)$  в соответствующих узлах. Далее, переходим на следующий шаг и выполняем те же операции до тех пор, пока не выполнится условие (2.11).

При решении необходимо следить, чтобы выполнялись условия

$$\tau \neq 1/d_A^j, \quad \tau \neq 1/(d_A^j + d_B^k), \quad \tau \neq 1/\sum_{\delta=1}^d d_{A_\delta}^{j_\delta} \quad \forall j, k, j_\delta. \quad (2.19)$$

**Схема поиска решения краевых задач (2.4), (2.5)**

**1. Инициализация.** Определяем начальные значения решения и его производных, присутствующих в задаче. В рамках этой работы указанные значения задавались нулевыми.

Задаём количество узлов  $N_\delta$  и считываем из базы данных (см. замечание 1.6) матрицы  $A_\delta, R_{A_\delta}, R_{A_\delta}^{-1}, D_{A_\delta}$ . В соответствии с (2.19) и теоремами о сходимости итерационного процесса (если таковые имеются) задаём параметры  $\tau, k_1, k_2$  и невязку  $\varepsilon_S$ .

**2. Шаг метода установления.** Используя выражения (2.13)–(2.15), (2.17), рассчитываем элементы массивов  $H(U)$  и  $G(U)$ .

По формулам (2.18) определяем значения элементов  $\widehat{V}$  и  $\widehat{U}$  и вычисляем приближённые значения производных решения, присутствующие в правой части  $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ , по формулам вида (1.42), (1.53), (1.56).

**3. Проверка условий сходимости.** Если  $\frac{\|\widehat{U}-U\|}{\|F(\widehat{U}+\mathcal{V})\|_\tau} \leq \varepsilon_S$ , то  $\widehat{U} + \mathcal{V}$  – массив, содержащий значения решения. Иначе, задаём  $U = \widehat{U}$  и переходим к шагу 2. Здесь  $\|\widehat{U}\|$  – максимальное по модулю значение элементов  $\widehat{U}$ .

Аналогичный алгоритм работает и при использовании регуляризации Соболева (2.10).

**Теорема 2.1.** *При решении линейных задач, когда правые части уравнений (2.4) не зависят от  $u$ , предложенная итерационная схема является устойчивой для любых  $\tau$  при использовании простой регуляризации и для  $\tau \geq k_2(M/m - 1)$  в случае регуляризации Соболева, где  $M = \sum_{\delta=1}^d \max_{j_\delta=1, N_\delta} |d_{A_\delta}^{j_\delta}|$ ,  $m = \sum_{\delta=1}^d \min_{j_\delta=1, N_\delta} |d_{A_\delta}^{j_\delta}|$ ,  $A_\delta$  – матрицы, аппроксимирующие вторые производные по переменным  $x^1, \dots, x^d$ ,  $d_{A_\delta}^{j_\delta}$  – их собственные числа.*

Доказательство этого утверждения проведено в приложении II с применением спектрального критерия устойчивости фон Неймана. Таким образом, в случае линейной задачи на основе теорем об аппроксимации (см. § 1.1 и п. 1.3.1) и теоремы 2.1 об устойчивости можно обосновать сходимость предложенного итерационного процесса. Для каждого нелинейного уравнения обоснование сходимости также связано с анализом зависимости спектрального радиуса оператора перехода (см. теорему 2.1) от итерационных параметров. В большинстве случаев для прикладных задач, строгие оценки получить не удаётся, однако, как показывает вычислительный опыт автора, удачный выбор шага  $\tau$  и параметров  $k_1, k_2$  позволяет не только добиться сходимости при решении нелинейных задач с малыми параметрами, но и уменьшить число итераций в десятки и даже сотни раз. Именно этим объясняется возникновение термина «регуляризация» при определении операторов  $B_t$  метода установления. При анализе регуляризационных свойств спектральный портрет аппроксимирующих матриц играет ключевую роль [219, 220]. Интересные соображения по этому поводу читатель может найти также в [14].

**Замечание 2.1.** Чистая задача Неймана, задачи на окружности и на сфере, в которых используются аппроксимации (1.17), а также задачи с условиями, указанным в замечании 1.7, являются некорректными: их решения определены с точностью до постоянных и линейных слагаемых, а у соответствующих матриц, аппроксимирующих вторые производные, имеются нулевые собственные числа. В этих задачах для вычисления решения необходимо до-

полнительно задать его значение  $\mathbf{u}_p = \mathbf{u}(\mathbf{x}_p)$  в какой-либо точке  $\mathbf{x}_p$  области задачи. Тогда с применением метода установления и описанных регуляризаций решения удаётся найти. Например, организовав в случае чистой задачи Неймана итерационный процесс метода установления по описанной схеме, но делая при переходе на следующий шаг корректировку решения:

$$\widehat{u}(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x}) - u(\mathbf{x}_p) + \mathbf{u}_p$$

и заменяя условия останковки (2.11) на  $\|B_t \frac{\partial u}{\partial x^k}\| \leq \varepsilon_S$ , где  $x^k$  – любая из переменных задачи, получаем решение задачи, удовлетворяющее указанному дополнительному условию в точке  $\mathbf{x}_p$ .

**Теорема 2.2.** *Положим для простоты, что при  $d = 2$ ,  $N = K$ , а для произвольных размерностей задачи  $d$ ,  $N_1 = N_2 = \dots = N_d = N$ . Описанный метод требует порядка  $p((2d + \tilde{\sigma}(d + 1))N^{d+1} + O(N^d))$  операций и  $s(n_1N^2 + N + \{\tilde{\sigma}(d + 1) + 5\}N^d + O(N^{d-1}))$  байт оперативной памяти, где  $\tilde{\sigma}$  – количество различных производных от неизвестной функции, присутствующих в уравнении (кратные производные считаются за одну),  $p$  – количество итераций метода установления,  $s$  – объём памяти в байтах, занимаемый одним действительным числом,  $n_1 = 4$ , если задача включает смешанные или первые производные,  $n_1 = 3$  в противном случае.*

В табл. 4 приведена сводная информация о порядке количества операций, совершаемых на каждой итерации, в том числе при наличии в правой части производных по одному направлению или смешанных производных.

**Таблица 4.** Количество операций на каждой итерации алгоритма

Размерность задачи	Число операций для вычисления			Порядок числа операций
	$G, \widehat{U}$	производной по одному направлению	смешанной производной	
$d$	$2dN^{d+1}$	$N^{d+1}$	$dN^{d+1}$	$O(N^{d+1})$

**Замечание 2.2.** Для любой размерности разработанный алгоритм требует приблизительно в  $N$  раз больше операций, чем экономичные схемы метода



конечных разностей, МКР. Тем не менее благодаря высокой скорости сходимости используемых приближений на решениях высокой гладкости число узлов  $N$  в алгоритме может быть значительно уменьшено по сравнению с МКР без потери точности, см. [169]. Это обеспечивает преимущества метода в задачах с гладкими решениями.

Подчеркнём также преимущества разработанного метода перед схемами метода коллокаций, которые традиционно используют при реализации спектральных методов [126, 193]. Такие схемы приводят к системам линейных уравнений  $A_S \mathbf{x} = \mathbf{b}$  с разреженной матрицей, где  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{b}$  – векторы размера  $N_1 \times \dots \times N_d$ , содержащие значения решения  $\widehat{u}(\mathbf{x})$  и значения правой части  $u(\mathbf{x}) - \tau f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$  в узлах коллокации. Для решения такой системы потребуется  $O(N^{3d})$  операций при  $N_1 = N_2 = \dots = N_d = N$ . В соответствии с теоремой 2.2 предложенная схема построения и решения матричных и тензорных уравнений Сильвестра (см. рис. 2.1) позволяет снизить число операций в  $O(N^{2d-1})$  раз, что уже в случае  $d = 2$  даёт существенное ускорение вычислений.

### 2.1.2. Методы решения задач Коши и начально-краевых задач для параболических уравнений

Постановка начально-краевой задачи для уравнения (2.2) состоит в задании краевых условий для функции  $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$  на границе области значений переменных  $\mathbf{x}$  – области  $D$  (например, условий Дирихле,  $\mathbf{u}|_{\partial D} = g_b(t, \mathbf{x})$ ) и начальных данных  $\mathbf{u}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{u}_0(t, \mathbf{x})$ . Далее будем считать, что граничные условия и начальные данные согласованы, что для сделанного примера означает, что  $g_b(0, \mathbf{x}) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x})$  при  $\mathbf{x} \in \partial D$ . Положим, как и выше, что область  $D$  является канонической, т. е. допускает приближение решения в виде прямого произведения интерполяций функции одной переменной.

Для решения начально-краевых задач будем использовать два подхода. Первый состоит в том, чтобы от (2.2) перейти ко второму уравнению (2.3), далее использовать для аппроксимации производной по времени конечные разности. Например, на равномерной сетке по времени с шагом  $\tau$  и узлами  $t_k = k\tau$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ , можем использовать асимптотические представления

$$\mathbf{u}_t = \frac{\mathbf{u}(t_{k+1}, \mathbf{x}) - \mathbf{u}(t_k, \mathbf{x})}{\tau} + O(\tau), \quad \mathbf{u}_{tt} = \frac{\mathbf{u}(t_{k+1}, \mathbf{x}) - \mathbf{u}(t_{k-1}, \mathbf{x})}{2\tau} + O(\tau^2),$$

при  $\tau \rightarrow 0$ . Для повышения порядка аппроксимации по времени можно воспользоваться многошаговыми разностными методами Гира и формулами дифференцирования назад [221, п. 9.5]. В итоге получаем схемы, аналогичные (2.9), но с дополнительными слагаемыми, содержащими  $\mathbf{u}(t_{k-1}, \mathbf{x})$ ,  $\mathbf{u}(t_{k-2}, \mathbf{x})$ , ... Таким образом, можем переходить с предыдущего на следующий временной шаг. На каждом шаге необходимо дополнительно выполнять итерации по нелинейности, чтобы добиться выполнения второго равенства в (2.3) с высокой точностью, а также учитывать, что граничные условия  $g_b(t, x)$  зависят от времени, поэтому добавочную функцию  $v(\mathbf{x})$  тоже нужно пересчитывать на каждом шаге по времени. Для этого в рамках итераций по нелинейности можно использовать идею алгоритма из п. 1.3.4.

Указанный подход удобно использовать, когда решение как функция времени не имеет существенных особенностей или больших градиентов и когда высокая точность аппроксимации по времени не требуется.

Остановимся немного подробнее на втором подходе, который мы также будем использовать при решении задач Коши для интегро-дифференциальных кинетических уравнений в гл. 4. В рамках этого подхода будем полагать, что  $t \in [0, T]$ . Далее введём фиктивную переменную  $s$ , предполагая, что  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(s, t, \mathbf{x})$ , и используем метод установления с регуляризирующими операторами, содержащими производные по  $s$ :

$$B_s = \partial/\partial s, \quad B_s = [k_1 - k_2(\partial/\partial t + \Delta)]\partial/\partial s, \quad k_1, k_2 > 0. \quad (2.20)$$

При этом решение начально-краевой задачи для (2.2) ищется как предел решений уравнения

$$B_s \mathbf{u} = \mathbf{u}_t + \Delta \mathbf{u} - f(\mathbf{u}, t, \mathbf{x})$$

с условиями  $\mathbf{u}(s, t, \mathbf{x}) = g_b(t, \mathbf{x})$ , при  $\mathbf{x} \in \partial D$ ,  $t \in [0, T]$ ;  $\mathbf{u}(s, 0, \mathbf{x}) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x})$  при  $\mathbf{x} \in D$ ,  $\mathbf{u}(0, t, \mathbf{x}) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x})$  при  $\mathbf{x} \in D$  и  $t \in [0, T]$ . Далее, вводится сетка по переменной  $s$  с постоянным шагом  $\sigma_s$ , используется разностная аппроксимация  $u_s \approx (\widehat{u} - u)/\sigma_s$ , где  $\widehat{u}$ ,  $u$  – решения на текущем и предыдущем шагах по переменной  $s$ . В итоге при применении простого оператора  $B_s = \partial/\partial s$  для задачи произвольной размерности получаем

$$\left(1 - \sigma_s \frac{\partial}{\partial t} - \sigma_s \left( \frac{\partial^2}{\partial (x^1)^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial (x^d)^2} \right)\right) \widehat{u} = u - \sigma_s f(\mathbf{u}, t, \mathbf{x}).$$

Используя описанные матричные аппроксимации для вторых производных по переменным  $\mathbf{x}$  и методы (1.43), (1.44) для приближения производной по времени, получаем

$$(\widehat{U} - \sigma_s \mathcal{A} \overset{1}{\times} \widehat{U} - \sigma_s (A_1 \overset{2}{\times} \widehat{U} + A_2 \overset{3}{\times} \widehat{U} + \dots + A_d \overset{d+1}{\times} \widehat{U})) = U - \sigma_s F(U + \mathcal{V}) = H(U),$$

где  $\mathcal{A}$  – матричная аппроксимация оператора дифференцирования по времени, массив  $\mathcal{V}$  содержит значения добавочной функции  $v(t, \mathbf{x})$ , удовлетворяющей неоднородным условиям по переменной  $\mathbf{x}$  и начальным данным по  $t$ .

Быстрый алгоритм решения последнего уравнения совпадает с алгоритмом, описанным в п. 2.1.1. Нужно только подчеркнуть, что собственные числа матрицы  $\mathcal{A}$  являются комплексными (см. табл. 2), поэтому для выражения элементов массива  $\widehat{V}$  необходимо либо оперировать с комплексными числами, либо решать системы уравнений  $2 \times 2$  (в действительной форме матрица  $D_{\mathcal{A}}$  спектрального разложения (1.49) будет блочно-диагональной, содержащей блоки размера  $2 \times 2$ ). Кроме того, при реализации указанного алгоритма необходимо учитывать спектральные свойства матрицы  $\mathcal{A}$ , зафиксированные на рис. 1.6, 1.7. В ходе вычислений значение числа узлов по временной переменной должно быть ограничено:  $N_1 \leq 20$ , см. рассуждения в п. 1.3.2.

Для высокоточной аппроксимации по времени с учётом этого ограничения имеет смысл либо разбить временной интервал на несколько подынтервалов:  $[0, T] = [0, T_1] \cup [0, T_2] \cup \dots$  и на каждом подынтервале решать задачу Коши по описанному алгоритму (так сделано в п. 4.2.2), либо использовать метод переменных направлений с разбиением шага метода установления на два подшага: на первом подшаге производная по времени переносится в правую часть, и решается краевая задача для уравнения с оператором Лапласа в левой части; на втором – оператор Лапласа переносится в правую часть, и решается задача Коши с помощью обращения непосредственно матрицы  $\mathcal{A}$ . В таком случае ограничение на число узлов  $N_1$  снимается.

В целом отметим, что преимущества второго из описанных подходов к решению начально-краевых задач состоят в высоком порядке сходимости схемы не только по пространственным, но и по временной переменным.

### 2.1.3. Локализация особой точки решения

Как указано в § 0.2 введения, у искомых решений нелинейных задач могут возникать особые точки, положения которых в комплексной плоскости могут изменяться при изменении параметров стационарных задач либо с течением времени при решении нестационарных уравнений. Для учёта положения особой точки в § 1.2 предложены модифицированные ДРБИ и применение отображения (1.30). На основе этих интерполяций в п. 1.3.1 и в приложении III получены матрицы, аппроксимирующие операторы дифференцирования. Однако, для использования этих аппроксимаций в задачах с особенностями, нужно построить отображение  $g(x) = g(\delta, \varepsilon, x)$ , а для этого необходимо знать координаты особой точки  $(\delta, \varepsilon)$  в комплексной плоскости.

В этом пункте для одномерной начально-краевой задачи описан адаптивный алгоритм локализации особой точки решения. Отметим, что этот алгоритм допускает обобщения на многомерный случай, а также он допускает модификации для лучшего поиска точек ветвления. Однако для краткости мы опишем только базовый вариант этого алгоритма. Следуя идее из [128], будем полагать, что для решения начально-краевой задачи для уравнения (2.2) при  $d = 1$  используется первый из подходов, описанных в п. 2.1.2, и  $\mathbf{u}^n = \mathbf{u}^n(x) = \mathbf{u}(t_n, x)$  – решение задачи на  $n$ -м шаге схемы по времени,  $x \in [-1, 1]$ . Для аппроксимации координат особенности используем на каждом шаге приближение Чебышёва–Паде неизвестной функции и вычислим нули его знаменателя. Это приближение имеет вид (см. [222, ч. 2, п. 1.6])

$$\mathbf{u}^n \approx r_{M,S}(x) = \frac{p(x)}{q(x)} = \frac{\sum_{k=0}^M b_k T_k(x)}{1 + \sum_{k=1}^S c_k T_k(x)}, \quad (2.21)$$

где  $T_k(x)$  – полином Чебышёва 1-го рода степени  $k$ ;  $b_k, c_k$  – коэффициенты, подлежащие определению;  $\mathbf{u}^n$  – решение, полученное на  $n$ -м шаге по времени на сетке  $x_j^{\text{ch}}$ ,  $j = \overline{1, N}$ . Следуя [128], здесь в качестве  $M$  мы выбирали  $N/2$ , округленное до целого числа, и задавали  $S = 2$ . Далее использовали разложение Фурье–Чебышёва функции  $\mathbf{u}^n(x)$ :

$$\mathbf{u}^n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k T_k(x). \quad (2.22)$$

Здесь коэффициенты  $a_k$  можно вычислить, зная значения  $\mathbf{u}^n(x)$  в узлах Чебышёва  $x_j^{\text{ch}}$ ,  $j = \overline{1, \nu}$ ,  $\nu = M+S+1$ , с помощью быстрого преобразования Фурье. Умножая (2.21) на  $q(x)$  и собирая подобные члены при  $T_k(x)$ , получаем

$$\mathbf{u}^n(x)q(x) - p(x) = O(T_{\nu+1}). \quad (2.23)$$

Подставляя сюда разложения Фурье–Чебышёва функций  $\mathbf{u}^n(x)$ ,  $q(x)$ ,  $p(x)$ , приходим к СЛАУ для определения коэффициентов  $b_k, c_k$ :

$$\begin{pmatrix} 1 & & -d_{0,1} & \dots & -d_{0,S} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & 1 & -d_{M,1} & \dots & -d_{M,S} \\ & & & -d_{M+1,1} & \dots & -d_{M+1,S} \\ & & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & -d_{M+S,1} & \dots & -d_{M+S,S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ \vdots \\ b_M \\ c_1 \\ \vdots \\ c_S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_M \\ a_{M+1} \\ \vdots \\ a_{M+S} \end{pmatrix}.$$

Элементы матрицы  $d_{j,k}$  находятся из условия  $\sum_{j=0}^{\infty} d_{j,k} T_j(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j T_j(x) T_k(x)$ .

Для приближённого вычисления координат особой точки необходимо найти только коэффициенты  $c_k$ ,  $k = \overline{1, S}$ , так как её положение определяется нулями знаменателя (2.21). В случае  $S = 2$  элементы матрицы СЛАУ для вычисления  $c_k$  можно выразить явно <sup>2</sup>:

$$d_{M+1,1} = a_{M+1}/2 + a_{M+3}/2, \quad d_{M+1,2} = a_M/2 + a_{M+4}/2,$$

$$d_{M+2,1} = a_{M+2}/2 + a_{M+4}/2, \quad d_{M+2,2} = a_{M+1}/2 + a_{M+5}/2.$$

После решения системы необходимо отыскать корни знаменателя (2.21). Они являются собственными числами сопровождающей матрицы [18, ch. 18]. Однако при  $S = 2$  несложно записать знаменатель в виде полинома второй степени и найти значения его корней. Отметим, что для более точной локализации особой точки в алгоритме используется информация о её положении на предыдущем шаге по времени [128, 143]. Пусть  $\hat{\delta}, \hat{\varepsilon}$  — координаты особой точки на предыдущем шаге, тогда разложение (2.22) на текущем шаге делается не на отрезке  $[-1, 1]$ , а на суженном отрезке  $[\max(\hat{\delta} - 10\hat{\varepsilon}, -1), \min(\hat{\delta} + 10\hat{\varepsilon}, 1)]$ .

<sup>2</sup>Приведённые формулы получены Л.С. Брындиным в рамках работы [223].

## Схема решения начально-краевой задачи с особенностью

**1. Инициализация.** Задаём количество узлов  $N$ , строим сетку из узлов Чебышёва  $x_j^{\text{ch}}$ ,  $j = \overline{1, N}$ , полагаем  $x_j = x_j^{\text{ch}}$ , задаём шаг по времени  $\tau$ . Определяем начальные значения решения и его производных, присутствующих в задаче, в узлах  $x_j^{\text{ch}}$ . Считываем из базы данных (см. замечание 1.6) матрицы  $\mathcal{A}$ ,  $A$ ,  $R_A$ ,  $R_A^{-1}$ ,  $D_A$ .

**2. Шаг схемы по времени.** Используя первый подход, описанный в п. 2.1.2, определяем значения элементов  $U^n$  на  $n$ -м шаге и вычисляем приближённые значения производных решения, присутствующие в правой части  $f(\mathbf{u}, t, \mathbf{x})$ , по формулам вида (1.42).

**3. Поиск особой точки.** Находим приближённо координаты  $(\delta, \varepsilon)$  особой точки функции  $\mathbf{u}(t_n, x)$  на текущем шаге с помощью аппроксимации Чебышёва – Паде (2.21).

**4. Адаптация алгоритма к особенности.** Если для числителя (2.21) имеет место  $|p(\delta + i\varepsilon)| \leq 10^{-8}$  или расстояние от особой точки до отрезка  $[-1, 1]$  больше единицы, то переходим к шагу 2.

Иначе адаптируем сетку к положению особенности, используя отображение  $x_j = g(\delta, \varepsilon, x_j)$ ,  $j = \overline{1, N}$ ; переинтерполируем текущее решение на новую сетку, используя (1.28); рассчитаем новые значения элементов матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$ ,  $R_A$ ,  $R_A^{-1}$ ,  $D_A$ .

**5. Проверка условий окончания итераций.** Повторяем шаги 2–4, пока не дойдем до заданного момента времени  $t_n = T$ .

## § 2.2. Алгоритм решения задачи Коши для четырёхволнового кинетического уравнения

Аппроксимации и методы решения задачи Коши, описанные выше, можно применить для численного анализа КУ (0.17). Напомним (см. § 0.2, п. 2), что задача Коши для КУ близка к вырожденной, что приводит к ряду существенных сложностей [109, 110] и требует разработки специальных алгоритмов.

Отметим, что КУ вида (0.17) возникает не только при рассмотрении 3D уравнения Гросса–Питаевского (УГП) (0.8), но и в ряде других приложений, например, при анализе 2D УГП, динамики волн на глубокой воде и излучения

случайного волоконного лазера (см. [224, 225], [59, ch. 5]). Типичной ситуацией для всех приложений является наличие у ядра  $\mathcal{P}_{\omega 23}$  особенностей (изломов и/или больших градиентов) в окрестности линий  $\omega_2 = \omega$ ,  $\omega_3 = \omega$  (пунктирные линии на рис. 0.1, а) и в окрестности границы  $\Delta_\omega$ :  $\omega_2 = 0$ ,  $\omega_3 = 0$  и  $\omega_2 + \omega_3 = \omega$ .

Характерное поведение решения (0.17) – степенная функция. В частности, точные решения (0.17), (0.16), спектры Колмогорова–Захарова, есть

$$n_\omega \sim \omega^{-7/6}, \quad n_\omega \sim \omega^{-3/2} \ln^{-1/3}(\omega/\omega_f), \quad \omega \gg \omega_f, \quad (2.24)$$

где  $\omega_f$  – частота накачки, см. п. 4.2.1. Как отмечено в § 0.1 введения, подобные решения реализуются, когда в системе имеются накачка и диссипация, НД, инвариантов, действующие на существенно разных масштабах (дистанция между ними в частотном пространстве может достигать десяти декад). Для учёта НД к уравнению (0.17) нужно добавить соответствующие члены:

$$\frac{dn_\omega}{dt} = \underbrace{St_\omega(n)}_{\text{накачка}} + \frac{c_f}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\omega - \omega_f}{\sigma}\right)^2\right] - \underbrace{[(\omega/\omega_L)^{-p} + (\omega/\omega_R)^q]n_\omega}_{\text{диссипация}}, \quad (2.25)$$

где  $c_f$ ,  $\sigma$ ,  $\omega_f$ ,  $\omega_L$ ,  $\omega_R$ ,  $p$ ,  $q$  – положительные параметры:  $\omega_L$ ,  $\omega_R$  – характерные значения частот низкочастотной диссипации (связанной, например, с потерей устойчивости) и высокочастотной диссипации (например, вязкой),  $\omega_L \ll \omega_f \ll \omega_R$ , числа  $p$ ,  $q$  определяют крутизну спектра в окрестности диссипации и соответствуют порядкам диссипативных членов в уравнениях динамики рассматриваемой среды;  $c_f$ ,  $\sigma$  характеризуют градиент спектра накачки. Отметим, что градиенты членов, описывающих НД, могут отличаться на несколько порядков.

Численное решение уравнений (0.17) и (2.25) предполагает постановку задач Коши для них на ограниченном частотном интервале  $\omega \in [0, \omega_{\max}]$  с условием  $\omega_L, \omega_f, \omega_R \in [0, \omega_{\max}]$ . В таком случае, как правило, предполагается, что значения  $n_\omega$  при  $\omega > \omega_{\max}$  пренебрежимо малы, а область интегрирования  $\Delta_\omega$  становится ограниченной областью сложной формы, которую далее мы будем представлять в виде совокупности подобластей  $\Delta_0$ – $\Delta_4$ ,  $\Pi_1$ ,  $\Pi_2$  (см. заштрихованную часть на рис. 0.1, а). Существенные проблемы, возникающие при разработке вычислительных алгоритмов решения уравнений (0.17) и (2.25) в указанной постановке, состоят в следующем.

**Проблема 1. Разработка быстросходящихся кубатурных формул в подобластях на рис. 0.1, а.** Ключевой здесь является проблема расчёта интегралов  $I^h$  вида (1.57). Действительно, подстановка степенных решений вида (2.24) в правую часть (0.17) и анализ задачи интегрирования вдоль переменной  $\omega_2$  в подобласти  $\Pi_2$  на рис. 0.1, а (или вдоль переменной  $\omega_3$  в подобласти  $\Pi_1$ ) приводят к (1.57), в котором  $h(x) = (1+x)^\beta$ ,  $\beta > -1$ . Причём, при поиске нестационарных решений  $\beta$  является априори неизвестной величиной и может изменяться со временем.

В то же время из-за наличия особенностей у ядра  $\mathcal{P}_{\omega_{23}}$  в окрестности линий  $\omega_2 = \omega$ ,  $\omega_3 = \omega$  при интегрировании вдоль переменной  $\omega_2$  в подобласти  $\Pi_2$  (вдоль переменной  $\omega_3$  в подобласти  $\Pi_1$ , а также при интегрировании по  $\Delta_0$ ) мы также можем прийти к выражению (1.57), где  $h(x)$  имеет особые точки в малых окрестностях  $x = -1$  или  $x = 1$ , тип которых (полюс, точка ветвления, существенно особая точка) неизвестен.

**Проблема 2. Высокоточная аппроксимация решения  $n(\omega, t)$  на отрезке  $\omega \in [0, \omega_{\max}]$ ,** градиенты которого могут отличаться на несколько порядков. Отметим, что помимо адаптации приближения к большим градиентам по переменной  $\omega$  (градиентам функций, задающих НД в (2.25) или градиентам спектра при взрывном росте его значений; по поводу последнего см. [79–81, 182] и § 4.4) возникает проблема построения устойчивой схемы для итераций по времени с шагом, существенно превышающим минимальное расстояние между узлами сетки по переменной  $\omega$ . В силу условий Куранта–Фридрихса–Леви явные схемы здесь не будут эффективными. Адаптивные схемы на основе методов Рунге–Кутты, апробированные авторами при получении решений из [89], также привели к неприемлемому уменьшению шага по  $t$  и большим временным затратам.

В этом параграфе займёмся конструированием алгоритмов решения задач Коши для КУ (0.17), (2.25) с учётом проблем 1,2.

### 2.2.1. Расчёт интеграла столкновений

Прежде всего отметим, что для перехода к расчёту интеграла вида (1.57) при интегрировании по треугольным подобластям  $\Delta_0$ – $\Delta_4$  необходимо применить отображения стандартного квадрата  $R_{sq} = \{(x_1, x_2) : -1 \leq x_1, x_2 \leq 1\}$  на



$\Delta_0$ – $\Delta_4$ , см. (1.24), (1.25), рис. 1.2 и [204]. К примеру, такое отображение для области  $\Delta_0$  и соответствующий Якобиан имеют вид

$$\omega_2(x_1, x_2) = -\frac{\omega}{8}[3x_1 - x_2(x_1 + 1) - 1] + \frac{\omega}{2}, \quad \omega_3(x_1, x_2) = \omega_2(x_2, x_1), \quad (2.26)$$

$$J(x_1, x_2) = (\omega^2/16)(2 - x_1 - x_2).$$

Таким образом, если  $\varphi(\omega_2, \omega_3)$  – подынтегральная функция (0.17), то интеграл по  $\Delta_0$  от  $\varphi(\omega_2, \omega_3)$  сводится к интегралу по  $R_{sq}$  от функции  $\tilde{\varphi}(x_1, x_2) = \varphi(\omega_2(x_1, x_2), \omega_3(x_1, x_2))$ :

$$\int_{\Delta_0} \varphi(\omega_2, \omega_3) d\omega_2 d\omega_3 = \frac{\omega^2}{16} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \tilde{\varphi}(x_1, x_2) (2 - x_1 - x_2) dx_1 dx_2.$$

Важным обстоятельством для нас является то, что при указанной замене граница треугольника переходит в границу  $R_{sq}$ , поэтому особенности  $\tilde{\varphi}(x_1, x_2)$  лежат на сторонах  $R_{sq}$ , т. е. на отрезках  $x_1 = \pm 1$  при  $x_2 \in [-1, 1]$  и на отрезках  $x_2 = \pm 1$  при  $x_1 \in [-1, 1]$ .

Интегралы по подобластям  $\Pi_1, \Pi_2$  сводятся к интегралам по  $R_{sq}$  с помощью линейных замен переменных. Задачу интегрирования по  $R_{sq}$  с помощью теоремы Фубини легко свести к нахождению повторных интегралов вида (1.57) по отрезку  $[-1, 1]$  с указанными особенностями в точках  $x = \pm 1$ . Для поиска этих интегралов используем методы, разработанные в § 1.4.

Для анализа эффективности предложенных методов расчёта интегралов с особенностями проведём экспериментальное исследование их сходимости. При этом будем исходить из того, что числа  $\alpha$  и  $\beta$  или даже вид функции  $h(x)$  нам неизвестны. Рассмотрим следующие тестовые задачи, имеющие непосредственное отношение к приложениям.

**Тест 1.** Интеграл от спектра обратного каскада в УГП при наличии накачки экспоненциального вида, см. уравнение (2.25), расположенной на высоких частотах  $\omega_f \sim \omega_{\max}$ :

$$I_1(\omega_f, \sigma) = \int_{-1}^1 (1 - \omega^2)^{-2/3} \exp \left[ -\frac{(\omega - \omega_f)^2}{2\sigma^2} \right] d\omega. \quad (2.27)$$

Рассмотрим два варианта этой тестовой задачи: вариант 1 – расчёт  $I_1(0, 0.1)$ . Интегралы такого вида возникают, когда правая часть  $St_\omega(n)$  рассчитывается при  $\omega \sim \omega_f \sim \omega_{\max}$ . Вариант 2 – расчёт  $I_1(0.9998, 10^{-4})$ . Такие задачи возникают, когда правая часть  $St_\omega(n)$  рассчитывается при  $\omega \ll \omega_f \sim \omega_{\max}$ .

$$I_1(0, 0.1) = I_{1,1} = \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(1/3) {}_1F_1(1/2, 5/6; -1/2\sigma^2)}{\Gamma(5/6)} \approx 0.252377677219947773,$$

$$I_1(0.9998, 10^{-4}) = I_{1,2} \approx 0.058481158415646,$$

где  ${}_1F_1$  – гипергеометрическая функция.

**Тест 2.** Интеграл от спектра прямого каскада в УГП (см. второй спектр в (2.24)), возникающий при расчёте правой части (0.17) (в прямом каскаде, как правило,  $0 \sim \omega_f \ll \omega_{\max}$ , поэтому верхний предел по  $\omega$  зададим в 1000 раз большим  $\omega_f$ ):

$$I_2 = \int_{\omega_f}^{1000\omega_f} \omega^{-1} \ln^{-1/3} \frac{\omega}{\omega_f} d\omega = \frac{3}{2} (\log 1000)^{2/3}. \quad (2.28)$$

**Тест 3.** Интеграл от спектра волн на поверхности глубокой воды:

$$I_3(p) = \int_0^1 \omega^p \exp\left[\frac{1}{\log(1-\omega)}\right] d\omega. \quad (2.29)$$

Отметим, что в этом приложении получить аналитическое выражение для ядра  $\mathcal{P}_{\omega 23}$  не удаётся, тем не менее удаётся рассчитать его приближённые значения и проанализировать особенности. В тесте 3 для моделирования свойств ядра  $\mathcal{P}_{\omega 23}$ , использована функция  $\exp[1/\log(1-\omega)]$  с существенно особыми точками на границах интервала интегрирования, скорость убывания которой в окрестности  $\omega = 0$  быстрее экспоненциальной. Рассмотрим два варианта этой тестовой задачи: вариант 1, расчёт  $I_3(0)$ , – задача, возникающая при вычислении интеграла  $St_\omega(n)$  на постоянном спектре, представляющем глобальное термодинамическое равновесие; вариант 2, расчёт  $I_3(-8)$ . Этот интеграл возникает при вычислении правой части КУ на спектре КЗ в прямом каскаде энергии  $n_\omega \sim \omega^{-8}$  (такое решение было получено в [226], где символ  $\omega$  использован не для частотной, а для волновой переменной, см. также [224]):  $I_3(0) = I_{3,1} = 2K_1(2) \approx 0.2797317636330448$ ,  $I_3(-8) = I_{3,2} \approx 1205.63842587396$ ,

где  $K_1(2)$  – модифицированная функция Бесселя второго рода.

Для организации расчётов в тестах 1–3, там, где необходимо, с помощью линейных замен переменной перейдём к стандартному отрезку интегрирования  $[-1, 1]$  и используем для сравнения различные методы: формулы Гаусса–Якоби (для краткости обозначим их GJ), классические формулы Гаусса (G), формулы Гаусса с заменами переменных (1.62), (1.67) ( $G_{\sinh}$ ), (1.64) ( $G_{\sin}$ ), (1.66) ( $G_{\tanh}$ ) и двуэкспоненциальные формулы из [152, § 3] (DE), оценка погрешности которых указана в теореме I.20. Пусть  $I_{n,a}$  – приближённое значение интеграла, рассчитанное на сетке из  $n$  узлов,  $a$  – номер теста. В экспериментах будем вычислять относительную погрешность

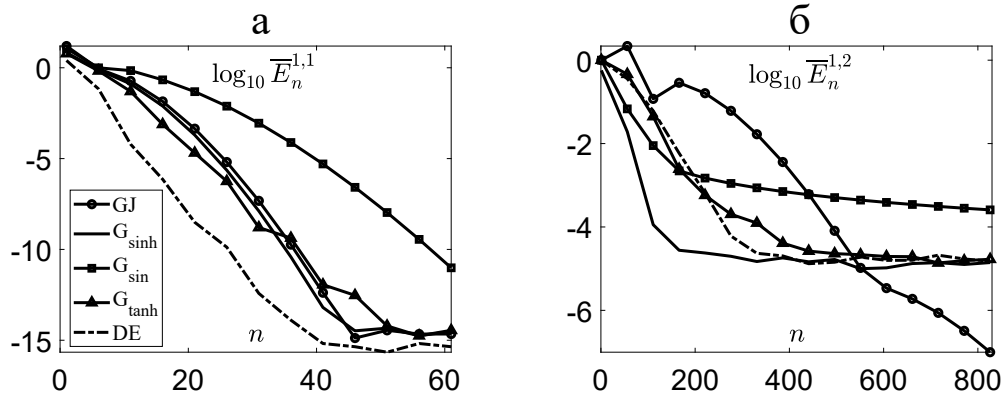
$$\overline{E}_n^a = |I_a - I_{n,a}|/|I_a|.$$

В расчётах замены (1.62), (1.67) и параметры  $\varepsilon$  и  $A, B$  варьировались для достижения максимальной скорости сходимости (максимального угла наклона графика  $\log_{10} \overline{E}_n^a$ ).

На рис. 2.2 показаны графики десятичных логарифмов погрешностей расчёта  $I_{1,1}$  (график а) и  $I_{1,2}$  (график б). При вычислении  $I_{1,1}$  в методе  $G_{\sinh}$  задано  $\varepsilon = 10^{0.3}$  и использовано сгущение (1.67), в методах  $G_{\tanh}$  и DE – параметры  $A = 0.6\pi/2$ ,  $B = 0.6\pi/4$ . При расчёте  $I_{1,2}$  в методе  $G_{\sinh}$  –  $\varepsilon = 10^{-12}$  и применена замена  $h_+(y)$  из (1.62), в методах  $G_{\tanh}$  и DE –  $A = 1.2\pi/2$ ,  $B = 1.2\pi/4$ .

Важное и неожиданное заключение, следующее из анализа рис. 2.2, состоит в том, что даже при известных значениях параметров  $\alpha$  и  $\beta$  функции  $h(x)$  в (1.57) формула GJ, имеющая максимальную алгебраическую степень точности, не обеспечивает максимальную скорость убывания погрешности: на рис. 2.2, а видно, что методы DE,  $G_{\sinh}$  и  $G_{\tanh}$  сходятся быстрее. Рекордные результаты демонстрирует DE (для достижения точности 0.1% DE требует примерно в 2 раза меньше узлов, чем GJ). На рис. 2.2, б видно, что при  $n < 400$  погрешность GJ больше, чем у всех других методов. Однако только GJ позволят получить повышенную точность (погрешность  $10^{-7}$  и ниже) при большом числе узлов. Погрешность других методов, достигнув значений порядка  $10^{-5}$ , не уменьшается при увеличении  $n$ . Отметим, что наилучшие результаты при расчёте  $I_{1,2}$  демонстрирует  $G_{\sinh}$ , позволяя получить максимальную точность уже на 200 узлах. В целом, тест  $I_{1,2}$  показывает, насколько

ресурсоёмкой является задача расчёта интеграла столкновений на практике – видно, что в подобластях  $\Delta_0$ – $\Delta_4$ ,  $\Pi_1$ ,  $\Pi_2$  требуется задавать сетки не менее, чем из  $200 \times 200$  узлов и адаптировать дополнительно параметры методов интегрирования. Если же адаптировать параметры не удаётся, могут потребоваться сетки из  $500 \times 500$  узлов и более.



**Рис. 2.2.** Логарифмы относительных погрешностей при расчёте  $I_{1,1}$  (а)  $I_{1,2}$  (б)

На рис. 2.3 приведены значения погрешностей, полученные при расчёте  $I_2$ . В методе  $G_{\sinh}$  использована замена переменной  $h_-(y)$  из (1.62) и задано  $\varepsilon = 10^{-15}$ ; в методах  $G_{\tanh}$  и DE заданы  $A = 1.5\pi/2$ ,  $B = 1.5\pi/4$ . Подынтегральная функция, включающая логарифм, имеет точки ветвления на границе отрезка,  $\omega = \omega_f$ , и в малой окрестности границы,  $\omega = 0$ . Формула GJ в таком случае неприменима, поэтому для сравнения используется классическая формула G, которая демонстрирует самое медленное убывание погрешности с ростом  $n$ . По скорости сходимости лидирует метод  $G_{\sinh}$ . Хорошие результаты демонстрирует DE.

Отметим, что здесь и в других расчётах методы DE и  $G_{\tanh}$ , основанные на применении одной и той же замены переменной (1.66), имеют близкую скорость сходимости. Однако DE, как правило, даёт погрешность на 2–4 порядка меньше, чем  $G_{\tanh}$ . Это связано с тем, что сетка  $G_{\tanh}$  сильно разрежена в центре отрезка интегрирования, что ведёт к снижению точности аппроксимации при наличии минимальных градиентов интегранда внутри отрезка.

На рис. 2.4 показаны графики десятичных логарифмов погрешностей расчёта  $I_{3,1}$  (график а) и  $I_{3,2}$  (график б). В обоих экспериментах при реализации метода  $G_{\sinh}$  использована замена переменной (1.67). При этом в расчёте  $I_{3,1}$

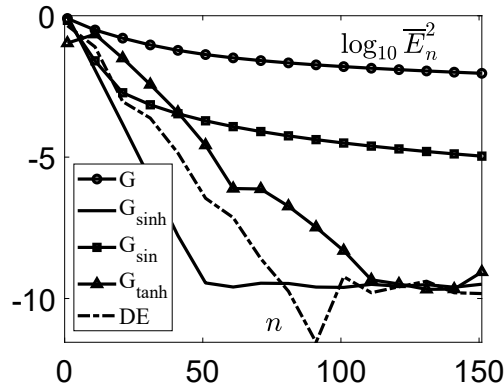


Рис. 2.3. Логарифм относительной погрешности при расчёте интеграла  $I_2$

задано  $\varepsilon = 10^{-8}$ , в расчёте  $I_{3,2} - \varepsilon = 10^{-1}$ . В обоих экспериментах при реализации  $G_{\tanh}$  и DE заданы  $A = 1.2\pi/2$ ,  $B = 1.2\pi/4$ .

Результаты на рис. 2.4 показывают, что при изменении параметра подынтегральной функции скорость сходимости любого метода в сравнении с другими может сильно измениться. Действительно, при расчёте  $I_3(0)$  методы DE и  $G_{\tanh}$  сходятся значительно быстрее других, а метод  $G_{\sinh}$  существенно отстаёт от них. При расчёте  $I_3(-8)$  максимальную скорость сходимости при малых  $n$  демонстрирует  $G_{\sinh}$ ; методы G и  $G_{\sin}$  близки по скорости сходимости к  $G_{\sinh}$ . При этом  $G_{\sin}$  даёт повышенную точность (погрешность порядка  $10^{-13}$  при  $n = 100$ ). Методы DE и  $G_{\tanh}$  в этой задаче сходятся медленнее других. Отсюда можно сделать вывод, что моделирование того или иного режима эволюции решения КУ требует предварительных расчётов на сходимость для выбора подходящего метода интегрирования и настройки его параметров.

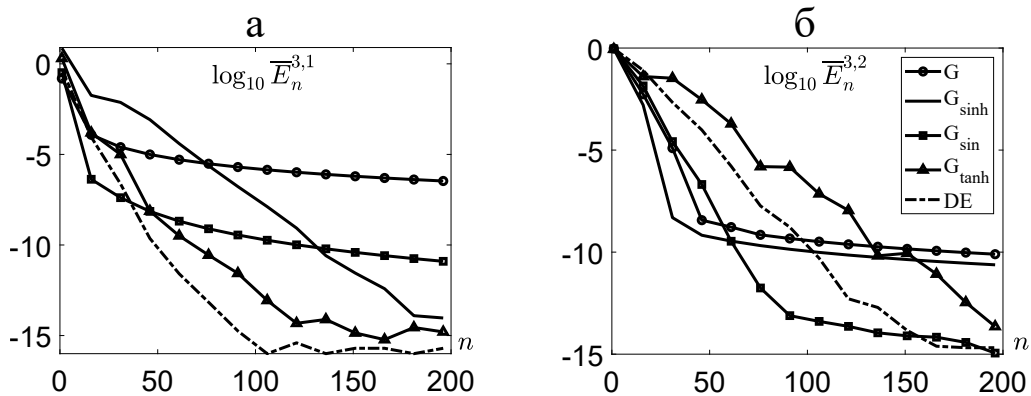


Рис. 2.4. Логарифмы относительных погрешностей при расчёте  $I_{3,1}$  (а)  $I_{3,2}$  (б)

Следует заметить, что наблюдаемый характер убывания погрешностей соответствует теоретическим оценкам, представленным в § 1.4. Методы  $G$ ,  $G_{\sin}$  при больших  $n$  демонстрируют степенной характер убывания погрешности (см. рис. 2.3, 2.4), причём порядок сходимости  $G_{\sin}$  примерно в два раза выше  $G$ . Эти результаты соответствуют оценкам (1.59), (1.65). На рис. 2.2, б, 2.3, 2.4, б погрешность метода  $G_{\sinh}$  быстро убывает при увеличении  $n$  от единицы (такое почти скачкообразное падение погрешности возникает из-за малого значения множителя  $\tilde{\varepsilon}$  в оценке (1.63)), затем характер убывания меняется на степенной, и асимптотика сходимости  $G_{\sinh}$  совпадает с асимптотикой  $G$ , что соответствует оценкам (1.59), (1.63). Дополнительные исследования влияния параметров  $\varepsilon$ ,  $A$ ,  $B$  на точность методов  $G_{\sinh}$  и DE проведены в [167].

**Замечание 2.3.** Наряду с описанными формулами после перехода к стандартному квадрату  $R_{sq}$  для расчёта интегралов по отрезку  $[-1, 1]$  использовались формулы Clenshaw–Curtis с узлами Чебышёва (CC), см. определение I.13, и их модификации, см. п. 4 в § 1.4. Суть таких формул в том, что сначала нужно найти значения подынтегральной функции в узлах Чебышёва, затем, используя быстрое преобразование Фурье, рассчитать коэффициенты ряда Фурье–Чебышёва (I.7) и, наконец, применяя приближения (I.8) или (1.68), найти значение интеграла. В своём стандартном виде CC аналогичны методу из п. 1.3.3. Преимущества такого подхода над классическими квадратурами Гаусса,  $G$ , состоят в том, что позиции узлов известны априори; недостатки – в меньшей скорости сходимости (см. оценки теорем I.17 и I.19, I.16 при  $\gamma = 1$ ). Однако во многих практических задачах при умеренном числе узлов формулы CC дают бóльшую точность, чем  $G$ , более подробный анализ см. в [18, ch. 19].

Из полученных результатов можно заключить следующее: 1) формулы  $GJ$  в рассмотренных задачах не являются оптимальными даже при известных степенях  $\alpha$  и  $\beta$ ; 2) при отсутствии оптимизации параметров рекомендуется использовать метод DE с параметрами  $A = \pi/2$ ,  $B = \pi/4$ , если есть возможность оптимизировать метод под задачу, лучше использовать  $G_{\sinh}$ ; 3) для обоснованного выбора метода интегрирования в каждой конкретной задаче необходимы предварительные эксперименты на сходимость.

### 2.2.2. Приближение спектра

Далее для уравнения (2.25) будем рассматривать задачу Коши

$$\frac{\partial n_\omega}{\partial t} = St_\omega(n) + \mathfrak{F}(\omega) - \mathfrak{D}(\omega)n_\omega, \quad n_\omega(0) = n_I(\omega). \quad (2.30)$$

где

$$\mathfrak{F}(\omega) = \frac{c_f}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\omega - \omega_f}{\sigma}\right)^2\right], \quad \mathfrak{D}(\omega) = [(\omega/\omega_L)^{-p} + (\omega/\omega_R)^q]n_\omega$$

суть члены, задающие НД соответственно. Поскольку правая часть (2.30) и сама неизвестная функция могут обращаться в бесконечность в точке  $\omega = 0$ , при разработке численного метода целесообразно ввести малое число  $\omega_{\min} \in [0, \omega_L]$  и искать решение (2.30) на отрезке  $\omega \in \bar{\omega} = [\omega_{\min}, \omega_{\max}]$ , а для расчёта интеграла  $St_\omega(n)$  использовать аналитическое или непрерывное продолжение решения в область  $[0, \omega_{\min}]$ , см. § 4.4 и (4.54), а также [182]. Будем полагать, что при  $\omega > \omega_{\max}$  решение пренебрежимо мало. Далее зададим в качестве начального данного  $n_I(\omega) \equiv 0$  и опишем метод поиска решения задачи (2.30) – функции  $n_\omega(t)$  при  $\omega \in \bar{\omega}$ ,  $t \geq 0$ .

Как отмечено в начале § 2.2, при наличии НД, действующих на разных частотных масштабах, градиенты решения КУ по переменной  $\omega$  могут отличаться на несколько (вплоть до 10) порядков. Для аппроксимации функции с такими особенностями при фиксированном  $t$  применим ДРБИ (1.28):

$$n(\omega, t) \approx r_M(n_\omega, \mathcal{L}^{-1}(\omega)) = r_M[n_\omega](\omega), \quad (2.31)$$

где  $\mathcal{L}(\omega)$  – линейное отображение отрезка  $\bar{\omega}$  на  $[-1, 1]$ . Для адаптации приближения (2.31) к указанным особенностям используем модификацию отображения (1.30) на случай, когда у аналитического продолжения  $n(\omega, t)$  имеется несколько особых точек:  $\omega_1^*, \dots, \omega_S^* \in \mathbb{C}$ . Такие модификации обсуждались в [130, 143, 227]. Было показано, что эффективной модификацией  $g(x)$  в таком случае является

$$g = \left( \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S g_s^{-1} \right)^{-1}, \quad (2.32)$$

где индекс "–1" означает обратную функцию;  $g_1, \dots, g_S$  имеют вид (1.30), где  $\delta = \delta_1, \dots, \delta_S$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_S$  являются действительной и мнимой координатами особых точек  $\mathcal{L}(\omega_1^*), \dots, \mathcal{L}(\omega_S^*)$  соответственно.

Более того, эксперименты показывают, что отображения вида (1.30), (2.32) можно использовать при построении приближений (2.31) как для целых функций с экспоненциальными пиками (моделирование накачки), так и для функций со степенными погранслоями на отрезке  $\bar{\omega}$  (моделирование диссипации). При этом в качестве  $\delta$  выбирается  $\mathcal{L}(\omega_f)$  (для накачки) и  $\mathcal{L}(0)$ ,  $\mathcal{L}(\omega_{\max})$  (для диссипации), а в качестве  $\varepsilon$  – малое число, значение которого можно связать с градиентами членов НД.

Для демонстрации высокой точности (2.31), (2.32) рассмотрим задачу о приближении функции  $F(\omega) = n_\omega + \mathfrak{F}(\omega) - \mathfrak{D}(\omega)n_\omega$  при  $n_\omega = \omega^{-7/6}$  (спектр Колмогорова–Захарова из (2.24)),  $\omega_L = 10^{-8}$ ,  $\omega_R = 1$ ,  $\omega_f = 10^{-4}$ ,  $\sigma = 10^{-5}$ ,  $c_f = 10^4$ ,  $p = q = 2$  на отрезке  $\bar{\omega} = [10^{-8}, 1]$ .

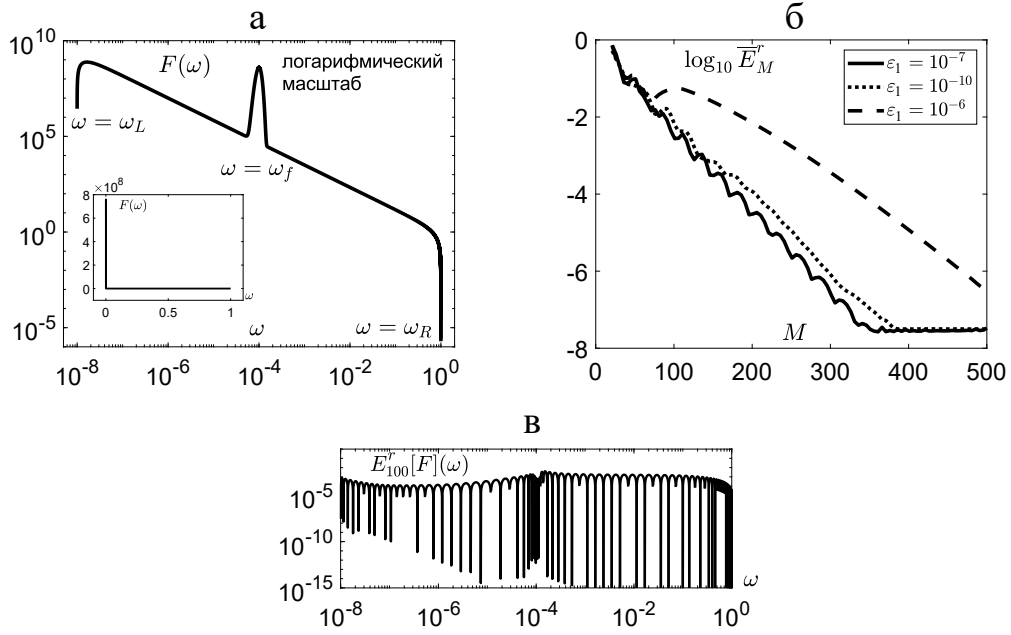
Для приближения  $F(\omega)$  используем формулу (2.31), в которой зависимость от  $t$  отсутствует:  $r_M[F](\omega)$ . Для построения отображения  $g(x)$  используем (2.32) и учтём, что  $F(\omega)$  имеет особенности в окрестности точек  $\omega = \omega_{\min}, \omega_f, \omega_{\max}$  (рис. 2.5, а), поэтому положим  $S = 3$ ,  $\delta_1 = \mathcal{L}(\omega_{\min}) = -1$ ,  $\delta_2 = \mathcal{L}(\omega_f)$ ,  $\delta_3 = \mathcal{L}(\omega_{\max}) = 1$ . Значения  $\varepsilon_1 = 10^{-7}$ ,  $\varepsilon_2 = 10^{-5}$ ,  $\varepsilon_3 = 10^{-1}$ , обеспечивающие максимальную скорость убывания относительной погрешности приближения (2.31) с ростом  $M$ , были подобраны экспериментально. Наибольшее влияние на убывание погрешности имеет параметр  $\varepsilon_1$ , см. рис. 2.5, б. Относительная погрешность в этом эксперименте определялась по формуле:

$$\bar{E}_M^r = \max_{\omega \in \Omega_M} E_M^r[F](\omega), \quad E_M^r[F](\omega) = |F(\omega) - r_M[F](\omega)|/\mu, \quad \mu = \max_{\omega \in \bar{\omega}} |F(\omega)|.$$

Здесь множество точек  $\Omega_M = \bigcup_{m=1}^{M-1} \{\tilde{\omega}_m + q(\tilde{\omega}_{m+1} - \tilde{\omega}_m)/Q, q = \overline{1, Q}\}$ ,  $Q = 50$ , т. е.  $\Omega_M$  – объединение равномерных подсеток на  $[\tilde{\omega}_m, \tilde{\omega}_{m+1}]$ ,  $m = \overline{1, M}$ .

Из рис. 2.5, а видно, что в линейном масштабе правая часть и решение КУ визуализируются в виде скачка в нуле. Однако реальная картина поведения решения, которую видно в логарифмическом масштабе, намного богаче. Для аппроксимации такого поведения классические методы не годятся, а формулы (2.31), (2.32) дают высокую точность на достаточно малом количестве узлов, см. рис. 2.5, б, в.





**Рис. 2.5.** Функция  $F(\omega)$  в логарифмическом масштабе и в линейном масштабе на внутреннем графике (а); логарифмы  $\overline{E}_M^r$  при различных значениях  $\varepsilon_1$  (б); график отклонения  $r_M[F](\omega)$  от  $F(\omega)$  при  $M = 100$ ,  $\varepsilon_1 = 10^{-7}$  в логарифмическом масштабе (в)

### 2.2.3. Реализация итераций по временной переменной

Пусть требуется вычислить эволюцию решения  $n(\omega, t)$  задачи (2.30) на отрезке  $t \in [0, T]$ . Используем второй из подходов, описанных в п. 2.1.2, и применим метод установления и две регуляризации (2.20) уравнения (2.30). В итоге получаем

$$\left(1 - \sigma_s \mathcal{D}(\omega) - \sigma_s \frac{\partial}{\partial t}\right) \widehat{n} = n - \sigma_s (St_\omega(n) + \mathfrak{F}(\omega)) = f_1(n, \omega), \quad (2.33)$$

$$\left(k_1 - \sigma_s \mathcal{D}(\omega) - (k_2 + \sigma_s) \frac{\partial}{\partial t}\right) \widehat{n} = \left(k_1 - k_2 \frac{\partial}{\partial t}\right) n - \sigma_s (St_\omega(n) + \mathfrak{F}(\omega)) = f_2(n, \omega). \quad (2.34)$$

Для сведения (2.33), (2.34) к задачам линейной алгебры используем метод коллокаций с узлами  $(\omega_m, t_k)$ , лежащими в прямоугольнике  $\Omega = [\omega_{\min}, \omega_{\max}] \times [0, T]$ , где  $\omega_m$  и  $t_k$  – узлы интерполяций (2.31) и (1.43),  $m = \overline{1, M}$ ,  $k = \overline{1, K}$ . Для приближения решения в  $\Omega$  применим прямое (тензорное) произведение (2.31) и (1.43). Пусть  $\mathcal{N}$ ,  $\mathcal{N}_t$  есть  $M \times K$ -матрицы, составленные из значений функций  $n(\omega, t)$  и  $n_t(\omega, t)$  на текущем шаге метода установления соответственно;

$\widehat{\mathcal{N}}$  есть  $M \times K$ -матрица значений  $n(\omega, t)$  на следующем шаге;  $\mathcal{A}$  суть  $K \times K$ -матрица, аппроксимирующая производную по времени, см. (1.44),  $\mathcal{N}_t \approx \mathcal{N}\mathcal{A}^T$ ;  $F_{1,2}(\mathcal{N})$  – матрицы значений  $f_{1,2}(n, \omega)$ ;  $D_\omega$  – диагональная матрица со значениями  $\mathfrak{D}(\omega_1), \dots, \mathfrak{D}(\omega_M)$  на диагонали. Используя метод коллокаций и следуя идее п. 2.1.2, получаем из (2.33), (2.34) задачи линейной алгебры для перехода с предыдущего на следующий шаг метода установления:

$$\widehat{\mathcal{N}} - \sigma_s(D_\omega \widehat{\mathcal{N}} + \widehat{\mathcal{N}}\mathcal{A}^T) = F_1(\mathcal{N}), \quad (2.35)$$

$$k_1 \widehat{\mathcal{N}} - \sigma_s D_\omega \widehat{\mathcal{N}} - (k_2 + \sigma_s) \widehat{\mathcal{N}}\mathcal{A}^T = F_2(\mathcal{N}). \quad (2.36)$$

Используем спектральное разложение  $\mathcal{A} = R_{\mathcal{A}} D_{\mathcal{A}} R_{\mathcal{A}}^{-1}$ ,  $D_{\mathcal{A}} = \text{diag}(d_1, \dots, d_K)$ , умножим (2.35), (2.36) на  $R_{\mathcal{A}}^{-1}$  справа и положим  $\widehat{\mathcal{V}} = \widehat{\mathcal{N}} R_{\mathcal{A}}^{-1}$ ,  $G_{1,2} = F_{1,2}(\mathcal{N}) R_{\mathcal{A}}^{-1}$ . В итоге получаем системы с диагональными матрицами

$$\widehat{\mathcal{V}} - \sigma_s(D_\omega \widehat{\mathcal{V}} + \widehat{\mathcal{V}} D_{\mathcal{A}}) = G_1, \quad k_1 \widehat{\mathcal{V}} - \sigma_s D_\omega \widehat{\mathcal{V}} - (k_2 + \sigma_s) \widehat{\mathcal{V}} D_{\mathcal{A}} = G_2,$$

решения которых даются элементарными формулами:

$$v_{ij} = \frac{g_{1ij}}{1 - \sigma_s[\mathfrak{D}(\omega_i) + d_j]}, \quad v_{ij} = \frac{g_{2ij}}{k_1 - \sigma_s \mathfrak{D}(\omega_i) - (k_2 + \sigma_s) d_j},$$

соответственно. Здесь  $v_{ij}$  – элементы матрицы  $\widehat{\mathcal{V}}$ ;  $g_{1ij}$ ,  $g_{2ij}$  – элементы матриц  $G_1$ ,  $G_2$ . Параметры метода установления  $\sigma_s$ ,  $k_1$ ,  $k_2$  следует выбирать таким образом, чтобы для всех  $i$  и  $j$  имели место соотношения

$$\mathfrak{D}(\omega_i) + d_j \neq 1/\sigma_s, \quad \sigma_s \mathfrak{D}(\omega_i) + (k_2 + \sigma_s) d_j \neq k_1.$$

Решения (2.35), (2.36) даются формулой  $\widehat{\mathcal{N}} = \widehat{\mathcal{V}} R_{\mathcal{A}}$ . Затем осуществляется следующий шаг и т. д. до тех пор, пока решение не установится. Критерий остановки итерационного процесса, см. (2.11):

$$\|\widehat{\mathcal{N}} - \mathcal{N}\|/\sigma_s \leq \varepsilon_S.$$

Отметим, что в знаменателе  $v_{ij}$  возникла комбинация, включающая собственные числа нестационарного оператора,  $d_j$ , значения диссипативной функции  $\mathfrak{D}(\omega_i)$ , задающей большой градиент в спектральном пространстве, и параметры метода установления  $\sigma_s$ ,  $k_1$ ,  $k_2$ . Балансируя эти параметры, удаётся снизить влияние больших пространственных градиентов на точность схемы по времени и получить решение в тех задачах, где методы Рунге–Кутты и многоточечные методы решения жёстких систем уравнений не сработали.

### § 2.3. Численный анализ насыщенности метода решения краевых задач

Отметим, что в случае линейной задачи Дирихле на отрезке вопрос о насыщенности алгоритма на основе аппроксимаций (1.3), (1.6) и (1.38)–(1.41) исследован строго в [6, гл. 9, § 5]. Можно утверждать что оценка, приведённая в указанном источнике, является аналогом шаудеровской оценки для данного алгоритма. Для её получения применены формула Грина и аппроксимации интеграла, аналогичные описанным в п. 1.3.3. Важным фактом, использованным при этом, являются ограничения обусловленности матрицы алгоритма, см. [6, следствие к предложению 5, гл. 9, § 5]. Используя анализ обусловленностей матриц из п. 1.3.2, предложенную технику несложно обобщить для строгого обоснования отсутствия насыщения алгоритма, описанного в § 2.1 в линейных задачах. Однако наша работа в большей мере нацелена на решение нелинейных задач, в которых получение таких оценок (а значит, и строгое обоснование отсутствия насыщения) существенно затруднено.

Тем не менее вопрос о соответствии точности численных решений и скорости убывания погрешности наилучших приближений точного решения задачи (если оно существует) является важным, как с точки зрения реализации свойства I, заявленного в § 0.3 введения, так и для апостериорного анализа свойств гладкости полученного решения: если алгоритм не имеет насыщения, то мы можем воспользоваться обратными теоремами теории приближений (см. § I.2 в приложении I). В § 2.4 апостериорный анализ использован для построения оценок погрешности в задачах, где точное решение неизвестно.

Исследуем численно вопрос о насыщенности разработанного метода. С этой целью рассмотрим ряд тестовых задач, имеющих различные порядки гладкости решений: одномерные нелинейные задачи

$$\begin{cases} u'' = \frac{2u^3}{x^6}, & \begin{cases} v'' = 6\sqrt[3]{|u|}, \\ v(\pm 1) = 1, \end{cases} & \begin{cases} w'' = 12x\sqrt[4]{|u|}, \\ w(\pm 1) = \pm 1 \end{cases} \end{cases} \quad (2.37)$$

с соответствующими решениями

$$u(x) = \begin{cases} -x^2, & x \in [-1, 0], \\ x^2, & x \in (0, 1], \end{cases} \quad v(x) = \begin{cases} -x^3, & x \in [-1, 0], \\ x^3, & x \in (0, 1], \end{cases} \quad w(x) = \begin{cases} -x^4, & x \in [-1, 0], \\ x^4, & x \in (0, 1]. \end{cases}$$

Отметим, что  $u, v, w$  являются 1, 2 и 3 раза непрерывно дифференцируемыми функциями соответственно. Кроме того,  $u' = v'' = w''' = |x|$ , модуль непрерывности  $\omega(|x|; q) = q$ . Поэтому в аналогах оценки (I.1), полученных для приближения функции на отрезке,  $\omega(u'; \frac{1}{N}) = \omega(v''; \frac{1}{N}) = \omega(w'''; \frac{1}{N}) = \frac{1}{N}$ , т. е. в оценках (I.2) для этих функций  $\tilde{\alpha} = 1$ . Значит, порядки аппроксимации их наилучших полиномиальных приближений есть 2, 3 и 4 соответственно.

В дополнение к одномерным задачам (2.37) рассмотрим еще двумерную и трехмерную нелинейные задачи

$$\begin{cases} \tilde{u}_{xx} + \tilde{u}_{yy} = 12xy(x^2 + y^2)\sqrt{|\tilde{u}|}, \\ \tilde{u}(\pm 1, y) = \pm \operatorname{sgn}(y)y^4, \\ \tilde{u}(x, \pm 1) = \pm \operatorname{sgn}(x)x^4, \end{cases} \quad \begin{cases} \tilde{v}_{xx} + \tilde{v}_{yy} + \tilde{v}_{zz} = G_b(x, y, z)\sqrt{|\tilde{v}|} + \frac{2\tilde{v}}{z^2}, \\ \tilde{v}(\pm 1, y, z) = \pm \operatorname{sgn}(yz)y^4z^2, \\ \tilde{v}(x, \pm 1, z) = \pm \operatorname{sgn}(xz)x^4z^2, \\ \tilde{v}(x, y, \pm 1) = \pm \operatorname{sgn}(xy)x^4y^4, \end{cases} \quad (2.38)$$

где  $G_b(x, y, z) = 12z \operatorname{sgn}(xy)(x^2 + y^2)$ , с решениями

$$\tilde{u}(x, y) = \begin{cases} -x^4, & x \in [-1, 0] \\ x^4, & x \in (0, 1] \end{cases} \times \begin{cases} -y^4, & y \in [-1, 0] \\ y^4, & y \in (0, 1] \end{cases}$$

$$\tilde{v}(x, y, z) = \tilde{u}(x, y) \times \begin{cases} -z^2, & z \in [-1, 0] \\ z^2, & z \in (0, 1]. \end{cases}$$

Функции  $\tilde{u}, \tilde{v}$  являются 3 и 1 раз непрерывно дифференцируемыми. Обобщения оценок (I.1), (I.2) (см. [6, с. 159–166] и теорему I.2) для наилучшего приближения  $\tilde{u}, \tilde{v}$  прямыми произведениями полиномов гарантируют порядки не ниже третьего и первого соответственно.

Пусть  $\mathbf{u}_{\text{ex}}(\mathbf{x})$  – точное решение рассматриваемой задачи (одна из функций  $u, v, w$  или  $\tilde{u}, \tilde{v}$ ),  $\mathbf{x} = (x^1, \dots, x^d)$  – переменные,  $(x_{i_1}^1, \dots, x_{i_d}^d)$  – координаты узлов интерполяции метода,  $i_k = \overline{1, N_k}$ ,  $k = \overline{1, d}$ ,  $\mathcal{I} = (i_1, \dots, i_d)$  – мультииндекс,  $\mathfrak{I}$  – всевозможные значения  $\mathcal{I}$ ,  $d$  – размерность задачи,  $\mathbf{u}_{\mathcal{I}}$  – значения решения, рассчитанные в узлах интерполяции. Обозначим

$$\mathbf{u}_{\text{ex}, \mathcal{I}} = \mathbf{u}_{\text{ex}}(x_{i_1}^1, \dots, x_{i_d}^d), \quad \varepsilon_{\text{spec}} = \mathcal{M}^{-1} \max_{\mathcal{I} \in \mathfrak{I}} |\mathbf{u}_{\text{ex}, \mathcal{I}} - \mathbf{u}_{\mathcal{I}}|, \quad \mathcal{M} = \max_{\mathcal{I} \in \mathfrak{I}} \mathbf{u}_{\text{ex}, \mathcal{I}}. \quad (2.39)$$

В одномерном случае приведённые выражения несколько упрощаются:

$$\mathbf{u}_{ex,j} = \mathbf{u}_{ex}(x_j), \quad \varepsilon_{\text{spec}} = \mathcal{M}^{-1} \max_{j=\overline{1,N}} |\mathbf{u}_{ex,j} - \mathbf{u}_j|, \quad \mathcal{M} = \max_{j=\overline{1,N}} \mathbf{u}_{ex,j}. \quad (2.40)$$

Для дву- и трёхмерных задач будем использовать обозначения:  $\mathbf{x} = (x, y)$ ,  $\mathbf{u}_{jk} = \mathbf{u}(x_j, y_k)$  и  $\mathbf{x} = (x, y, z)$ ,  $\mathbf{u}_{jk}^m = \mathbf{u}_{jk}(x_j, y_k, z_m)$  соответственно, где  $x_j, y_k, z_m$  – узлы интерполяции,  $j = \overline{1, N}$ ,  $k = \overline{1, K}$ ,  $m = \overline{1, M}$ .

Задачи (2.37), (2.38) решены численно с помощью разработанного метода, найдены относительные погрешности решений по формулам вида (2.39) и порядки аппроксимации. Для этого сделаны расчеты на последовательности сеток с двукратным увеличением числа узлов  $N = (K = M) = 4, 8, 16, \dots, 128$ . Пусть  $\varepsilon_{\text{spec}} = \varepsilon_{\text{spec}}^N(u)$  – относительная погрешность численного решения  $u$  на  $N$  узлах. Порядок аппроксимации алгоритма на  $N$  узлах найдем по формуле

$$R_N(u) = \log_2(\varepsilon_{\text{spec}}^{N/2} / \varepsilon_{\text{spec}}^N), \quad N = 8, 16, \dots, 128.$$

В табл. 5 приведены значения погрешностей  $\varepsilon_{\text{spec}}^N$ , в табл. 6 – значения порядков  $R_N$  для пяти рассмотренных задач.

**Таблица 5.** Погрешности численных решений

$N$	$\varepsilon_{\text{spec}}(u)$	$\varepsilon_{\text{spec}}(v)$	$\varepsilon_{\text{spec}}(w)$	$\varepsilon_{\text{spec}}(\tilde{u})$	$\varepsilon_{\text{spec}}(\tilde{v})$
4	6.686e-03	1.731e-02	4.745e-03	2.945e-03	6.100e-04
8	2.473e-03	1.901e-03	3.33e-04	1.63e-04	2.895e-04
16	5.372e-04	2.323e-04	1.893e-05	9.403e-06	1.294e-04
32	1.282e-04	2.89e-05	1.179e-06	7.803e-07	6.297e-05
64	3.165e-05	3.608e-06	7.365e-08	5.754e-08	2.559e-05
128	7.888e-06	4.509e-07	4.602e-09	3.993e-09	—

**Таблица 6.** Порядки аппроксимации метода

$N$	$R_N(u)$	$R_N(v)$	$R_N(w)$	$R_N(\tilde{u})$	$R_N(\tilde{v})$
8	1.4349	3.1867	3.8329	4.1753	1.0753
16	2.2026	3.0323	4.1369	4.1158	1.1617
32	2.0674	3.0071	4.0044	3.591	1.0391
64	2.0178	3.0017	4.0012	3.7614	1.299
128	2.0045	3.0004	4.0003	3.8491	—
Среднее	1.9454	3.0456	3.9951	3.8985	1.1438

Из приведенных данных видно строгое соответствие полученных порядков оценкам точности наилучших полиномиальных приближений. Этот факт

свидетельствует об отсутствии насыщения предложенного алгоритма на основе метода коллокаций в рассмотренных нелинейных задачах.

## § 2.4. Апостериорный анализ погрешности и численные эксперименты

Одним из значительных преимуществ нелокального алгоритма без насыщения является возможность решения сложных вычислительных проблем с контролем погрешности. Контроль основан на оценках двух компонент погрешности  $\epsilon$  численного решения – погрешности использованного метода приближения  $\epsilon_M$  и вычислительной погрешности  $\epsilon_R$ , связанной с округлением действительных чисел в памяти ЭВМ:  $\epsilon = \epsilon_M + \epsilon_R$ . В рамках этого параграфа получены оценки компонент погрешности решений нелинейных краевых задач. Верификация полученных оценок в тестовых задачах с известными решениями, подтверждающая высокую скорость сходимости метода, содержится в работе соискателя [171]. В п. 3.6.1 описанные оценки погрешности использованы для анализа решения задачи о неизотермическом течении полимерной жидкости между двумя соосными цилиндрами, см. также [177].

### 2.4.1. Оценка вычислительной погрешности

При решении задач на ЭВМ, имеющих арифметику с плавающей точкой, необходимо помнить, что длина мантиссы действительного числа в памяти машины ограничена  $l$  знаками (в арифметике `float`  $l = 8$ , `double` –  $l = 16$ , `quadruple` –  $l = 32$  и т. д.). Все знаки, которые не укладываются в такие рамки, отбрасываются, и в связи с этим при записи числа  $a$  в память ЭВМ  $a \rightarrow a + \delta_a$  возникает погрешность  $\delta_a$ , точное значение которой неизвестно. Однако известна оценка  $|\delta_a| \leq \delta|a|$ , где  $\delta$  – относительная погрешность округления – строго фиксирована для каждого типа действительных чисел  $\delta = 10^{-l+1}$ . В ходе расчётов вычислительные погрешности многократно суммируются (накапливаются), что может приводить к катастрофической потере точности.

Аналізу накопления вычислительной погрешности посвящено множество работ. Подход, развитый С.М. Румпом [121] и использованный при анализе норм и обусловленностей матриц алгоритма в п. 1.3.2, состоит в построе-

нии апостериорных оценок погрешности решений задач линейной алгебры с последовательным «раздутием» интервала, гарантированно содержащего решение. Такой подход основан на методах интервального анализа, теореме Брауэра о неподвижной точке и теореме Миранды, см. презентацию [228]. Другие принципы, приводящие к априорным оценкам решений задач линейной алгебры и дифференциальных уравнений, сформулированы С.К. Годуновым и развиты в работах [229, 230]. Оценки вычислительной погрешности, приведённые ниже, основаны на анализе матричных операторов задач линейной алгебры (2.13)–(2.16), которые требуется решать на каждом шаге метода установления. Подобный подход восходит к работам Дж. Деммеля [231].

Положим, что решение (2.4) найдено с помощью метода установления, как решение задач (2.13)–(2.15) с невязкой установления  $\varepsilon_S$ . Учтём следующие факторы.

**1.** Обозначим  $\delta_X$  массив, элементы которого суть возмущения элементов некоторого массива  $X$ ,  $\|\delta_X\|$  – максимальное из этих возмущений. Для массива правой части  $F$  имеем  $F \rightarrow F + \delta_F$ , где  $\delta_F = \delta_F^S + \delta_F^*$ ,  $\|\delta_F^S\| \leq \varepsilon_S$ , т. е. невязку  $\varepsilon_S$  можно трактовать как компоненту возмущения правой части (см. (2.11)). Оценка  $\delta_F^*$  приведена ниже.

**2.** Элементы массива данных  $U$  заданы с погрешностями  $U \rightarrow U + \delta_U$ .

**3.** При поиске значений производных от  $U$  погрешность возрастает. Положим, что относительная погрешность элементов матриц, аппроксимирующих производные, равна  $\delta$ , погрешность  $U$  может быть произвольной. В случае  $d = 1$ , если  $A = (a_{ij})_{N \times N}$  – матрица, аппроксимирующая производную,

$$AU \rightarrow (A + \delta_A)(U + \delta_U) = AU + \delta_{AU}, \quad (2.41)$$

где  $\|\delta_{AU}\| \leq \|\delta_A \cdot U\| + \|A \cdot \delta_U\| + \|\delta_A \cdot \delta_U\|$ .

$$\|\delta_A \cdot U\| \leq \max_{i=1, \overline{N}} \sum_{j=1}^N |(\delta_A)_{ij} u_j| \leq \delta \max_{i=1, \overline{N}} \sum_{j=1}^N |a_{ij}| \max_{j=1, \overline{N}} |u_j| \leq \delta N_A^\infty \|U\|.$$

$$\|A \cdot \delta_U\| \leq \max_{i=1, \overline{N}} \sum_{j=1}^N |a_{ij} (\delta_U)_j| \leq \max_{i=1, \overline{N}} \sum_{j=1}^N |a_{ij}| \max_{j=1, \overline{N}} |(\delta_U)_j| \leq N_A^\infty \|\delta_U\|.$$

Здесь  $(\delta_A)_{ij}$  – возмущение элементов  $A$ ,  $(\delta_U)_j$  – возмущения компонент  $U$ ,  $N_A^\infty = \|A\|_\infty = \max_{i=1, \overline{N}} \sum_{j=1}^N |a_{ij}|$ . Слагаемое  $\|\delta_A \cdot \delta_U\|$  в формуле (2.41) име-

ет вторую степень малости по  $\delta$ , поэтому им пренебрегаем. Таким образом,  $\|\delta_{AU}\| \leq N_A^\infty(\delta\|U\| + \|\delta_U\|)$ .

Повторяя рассуждения, приведённые выше, при  $d = 2$  получаем

$$AU \rightarrow AU + \delta_{AU}, \text{ где } \delta_{AU} \leq N_A^\infty(\delta\|U\| + \|\delta_U\|);$$

$$UB \rightarrow UB + \delta_{UB}, \text{ где } \delta_{UB} \leq N_B^1(\delta\|U\| + \|\delta_U\|), \quad N_B^1 = \|B\|_1 = \max_{j=1, \overline{K}} \sum_{i=1}^K |b_{ij}|,$$

$B = (b_{ij})_{K \times K}$  – аппроксимирующая матрица;

$$AUB \rightarrow AUB + \delta_{AUB}, \quad \delta_{AUB} \leq \|\delta_A \cdot U \cdot B\| + \|A \cdot \delta_U \cdot B\| + \|A \cdot U \cdot \delta_B\| \leq N_A^\infty N_B^1(2\delta\|U\| + \|\delta_U\|).$$

В случае  $d = 3$  имеем

$$A \overset{1}{\times} U \rightarrow A \overset{1}{\times} U + \delta_{AU}, \text{ где } \delta_{AU} \leq N_A^\infty(\delta\|U\| + \|\delta_U\|);$$

$$A \overset{1}{\times} B \overset{2}{\times} U \rightarrow A \overset{1}{\times} B \overset{2}{\times} U + \delta_{ABU}, \text{ где } \delta_{ABU} \leq N_A^\infty N_B^\infty(2\delta\|U\| + \|\delta_U\|);$$

$$A \overset{1}{\times} B \overset{2}{\times} C \overset{3}{\times} U \rightarrow A \overset{1}{\times} B \overset{2}{\times} C \overset{3}{\times} U + \delta_{ABCU},$$

где  $\delta_{ABCU} \leq N_A^\infty N_B^\infty N_C^\infty(3\delta\|U\| + \|\delta_U\|)$ ,  $C = (c_{ij})_{M \times M}$  – аппроксимирующая матрица;  $\overset{1}{\times}$ ,  $\overset{2}{\times}$ ,  $\overset{3}{\times}$  – операции  $\delta$ -произведения трёхмерных массивов (см. определение 1.1). Аналогичные оценки вычислительной погрешности можно записать при умножении массивов  $H, V$  на матрицы  $R_A, R_A^{-1}$  при  $d = 1, 2, 3$ .

**4.** Возмущение правой части  $\delta_F^*$  оценивается на основе методов, указанных выше:  $\delta_F^* \leq \Psi$ , где  $\Psi = \Psi(N_{A1}^{1,\infty}, \dots, N_{Al}^{1,\infty}, \delta, \|U\|)$ ,  $N_{A1}^{1,\infty}, \dots, N_{Al}^{1,\infty}$  – нормы матриц, аппроксимирующих производные, стоящие в правой части, функция  $\Psi$  строится с учётом структуры функции  $F$ , например:

- если  $F$  содержит слагаемые вида  $f_1(\mathbf{x})u_x + f_2(\mathbf{x})u_y$ , то погрешность, возникающая при такой операции, оценивается выражением

$$\delta_+ \leq 2\delta\|U\| \left\{ N_A^\infty \max_{\mathbf{x}_I \in \chi} |f_1(\mathbf{x}_I)| + N_B^1 \max_{\mathbf{x}_I \in \chi} |f_2(\mathbf{x}_I)| \right\},$$

где  $\mathbf{x}_I \in D$  – узел интерполяции,  $\chi$  – множество всех узлов;

- если  $F$  содержит сомножители вида  $f_1(x)u_x u_y$ , то погрешность оценивается выражением

$$\delta_\times \leq 2\delta \max_{\mathbf{x}_I \in \chi} |f_1(\mathbf{x}_I)| \left\{ (N_A^\infty + N_B^1)\|U\| + \frac{1}{2}(\|U_x\| + \|U_y\|) \right\};$$



• если  $F$  содержит частные  $\frac{f_1(\mathbf{x})u_x}{f_2(\mathbf{x})u_y}$ , то погрешность оценивается выражением

$$\delta_{\dot{z}} \leq 2\delta N_A^\infty \|U\| \max_{\mathbf{x}_I \in \mathcal{X}} \left| \frac{f_1(\mathbf{x}_I)}{f_2(\mathbf{x}_I)u_y(\mathbf{x}_I)} \right|;$$

• если  $F$  содержит иные функции вида  $f_1(\mathbf{x}, u_x, u_y)$ , то записывается максимальное возмущение функции  $f_1$  с учётом максимальных возмущений производных  $u_x, u_y - 2\delta N_A^\infty, 2\delta N_B^1$ .

Суммируя перечисленные факторы, оценим погрешность решения одномерной задачи ( $d = 1$ ). Погрешность, возникающая при вычислении правой части  $H(U) = U - \tau F(U)$  регуляризованных уравнений (2.13) –  $\|\delta_H\|$ , оценивается выражением  $\delta\|U\| + \tau[\varepsilon_S + \Psi(N_A^\infty, \delta, \|U\|)] + \tau\delta\|F(U)\|$ . Погрешность, возникающая при вычислении правой части  $G(U)$  уравнения (2.16),  $\|\delta_G\|$ , в случае  $d = 1$  – выражением  $N_{R_A}^\infty(\delta\|H\| + \|\delta_H\|)$ . Решение (2.16) – вектор  $\widehat{V}$  имеет следующую оценку погрешности:

$$\widehat{V} \rightarrow \widehat{V} + \delta_{\widehat{V}}, \quad \|\delta_{\widehat{V}}\| \leq \|\delta_G\| / \min_{j=1, N} (1 - a\tau d_A^j).$$

Оценим погрешность итогового решения краевой задачи ( $\widehat{U} \rightarrow \widehat{U} + \delta_{\widehat{U}}$ ):

$$\varepsilon_R = \|\delta_{\widehat{U}}\| \leq \delta N_{R_A}^\infty \|\widehat{V}\| + \text{cond}_{R_A}^\infty \frac{\delta(\|\widehat{U}\| + \|H\|) + \tau(\varepsilon_S + \Psi + \delta\|F(U)\|)}{\min_{j=1, N} (1 - a\tau d_A^j)}, \quad (2.42)$$

где  $\text{cond}_{R_A}^\infty = \|R_A\|_\infty \|R_A^{-1}\|_\infty$  – обусловленность матрицы  $R_A$ . Здесь также использовано приближённое равенство  $\|\widehat{U}\| \approx \|U\|$ .

Аналогично могут быть получены оценки для случая  $d = 2$ :

$$\varepsilon_R \leq 2\delta N_{AB} \|\widehat{V}\| + c_{AB} \frac{\delta(\|\widehat{U}\| + 2\|H\|) + \tau(\varepsilon_S + \Psi + \delta\|F(U)\|)}{\min_{j,k} |1 - \tau(ad_A^j + bd_B^k)|}, \quad (2.43)$$

где  $N_{AB} = N_{R_A}^\infty N_{R_B}^1$ ,  $c_{AB} = \text{cond}_{R_A}^\infty \text{cond}_{R_B}^1$ ;

$$d = 3: \quad \varepsilon_R \leq 3\delta N_{ABC} \|\widehat{V}\| + c_{ABC} \frac{\delta(\|\widehat{U}\| + 3\|H\|) + \tau(\varepsilon_S + \Psi + \delta\|F(U)\|)}{\min_{j,k,m} |1 - \tau(ad_A^j + bd_B^k + cd_C^m)|}, \quad (2.44)$$

где  $N_{ABC} = N_{R_A}^\infty N_{R_B}^\infty N_{R_C}^\infty$ ,  $c_{ABC} = \text{cond}_{R_A}^\infty \text{cond}_{R_B}^\infty \text{cond}_{R_C}^\infty$ ,  $j = \overline{1, N}$ ,  $k = \overline{1, K}$ ,  $m = \overline{1, M}$ .

Из формул (2.42)–(2.44) видно, что порядок погрешности  $\varepsilon_R$  определяется величинами норм аппроксимирующих матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$ ,  $\mathcal{B}$ ,  $B$ ,  $\mathcal{C}$ ,  $C$  и чисел обусловленности матриц собственных векторов  $R_A$ ,  $R_B$ ,  $R_C$ . Анализ этих величин в зависимости от числа узлов интерполяции дан в п. 1.3.2 и в приложении III. В целом, мы можем констатировать, что предложенный алгоритм удовлетворяет свойству III, заявленному в § 0.3 введения.

### 2.4.2. Оценка погрешности метода приближения

В гл. 1 даны оценки погрешности используемых методов приближения и установлено, что точность приближения строго связана с гладкостью (регулярностью) искомой функции. В § 2.3 показано, что разработанный алгоритм на основе методов коллокаций и установления сохраняет эту связь и обеспечивает асимптотику погрешности наилучшего полиномиального приближения. Важно заметить, что для реализации такой асимптотики в случае условий Неймана и смешанных краевых условий, при аппроксимации функций и их производных, стоящих в правых частях уравнения, следует использовать классическое приближение (1.1) и (III.7), (III.8). На основе указанных фактов и обратных теорем теории приближения (см. § I.2) можно охарактеризовать порядок гладкости искомого решения нелинейной задачи и сделать апостериорную оценку погрешности решения. Для этого необходимо проводить расчёты на последовательности сеток и фиксировать порядок сходимости численных решений, который может быть определён, например, с помощью *правила Рунге*. Однако это правило в стандартном виде требует двукратного увеличения количества узлов сетки по каждому направлению, что приводит к существенным вычислительным издержкам уже в случае  $d = 2$ , поэтому рассмотрим некоторую модификацию правила Рунге. Опишем модификацию на примере одномерной задачи. Зададим число узлов по каждому направлению равным  $N$ , будем последовательно увеличивать  $N$  на единицу и наблюдать величину  $\|\tilde{p}_{N+1}(u) - \tilde{p}_N(u)\|$ , где  $u$  – решение однородной задачи,  $\tilde{p}_N(u)$  – его приближение вида (1.3), в котором  $u(x_j^{\text{ch}})$ ,  $j = \overline{1, N}$ , найдено с помощью НМБН. Имеют место оценки:

$$\begin{aligned}\|\tilde{p}_N(u) - u\| &\leq \|\tilde{p}_N(u) - \tilde{p}_{N+1}(u)\| + \|\tilde{p}_{N+1}(u) - u\|, \\ \|\tilde{p}_N(u) - u\| - \|\tilde{p}_{N+1}(u) - u\| &\leq \|\tilde{p}_N(u) - \tilde{p}_{N+1}(u)\|, \\ \varepsilon_M = \|\tilde{p}_N(u) - u\| &\leq \frac{1}{1 - \varepsilon_N} \|\tilde{p}_N(u) - \tilde{p}_{N+1}(u)\|.\end{aligned}\quad (2.45)$$

Здесь  $\varepsilon_N = \frac{\|\tilde{p}_{N+1}(u) - u\|}{\|\tilde{p}_N(u) - u\|}$ , тогда  $\varepsilon_N \varepsilon_{N-1} = \frac{\|\tilde{p}_{N+1}(u) - u\|}{\|\tilde{p}_{N-1}(u) - u\|}$ .

Далее будем полагать, что в асимптотическом смысле

$$\varepsilon_N \varepsilon_{N-1} \sim \frac{R_{N+1}(x)}{R_{N-1}(x)}, \quad R_N(x) = |\tilde{p}_N(x) - u(x)|, \quad \tilde{p}_N(x) = \tilde{p}_N(u, x), \quad (2.46)$$

где  $x \in D$  – любая точка, не входящая в множество узлов  $x_j^{\text{ch}}$ ,  $j = \overline{1, N}$ . В соответствии с классическими результатами теории приближений, существует три класса функций, для которых полиномиальные приближения дают принципиально разные асимптотики погрешности (см. § 0.3 введения). Итак, для достаточно большого  $N$  возможны три случая:

- 1)  $u \in W_p^r(M, D)$ , степенная сходимость –  $\varepsilon_N \sim \frac{(N+1)^{-r}}{N^{-r}} = \left(\frac{N}{N+1}\right)^r$ ;
- 2)  $u \in C^\infty(D)$  и аналитическое продолжение  $u$  как функции одной из её переменных имеет особую точку в  $\mathbb{C}$ , экспоненциальная сходимость –  $\varepsilon_N \sim q^{N+1}/q^N = q < 1$ ;
- 3)  $u$  – целая функция порядка 1 и нормального типа,  $\varepsilon_N \sim \frac{q^{N+1}}{(N+1)!} \bigg/ \frac{q^N}{N!} = q/(N+1)$ .

Положим, что  $N$  – нечётно, тогда  $0$  – узел интерполяции  $\tilde{p}_N$  и в соответствии с (2.46)  $R_N(0) = 0$ ,  $|R_{N+1}(0)| = \varepsilon_N \varepsilon_{N-1} |R_{N-1}(0)|$ . После решения задачи с заданным количеством узлов  $N$  и  $N+1$  найдём

$$\lambda_N = \sqrt{\frac{|\tilde{p}_N(0) - \tilde{p}_{N+1}(0)|}{|\tilde{p}_{N-1}(0) - \tilde{p}_N(0)|}}. \quad (2.47)$$

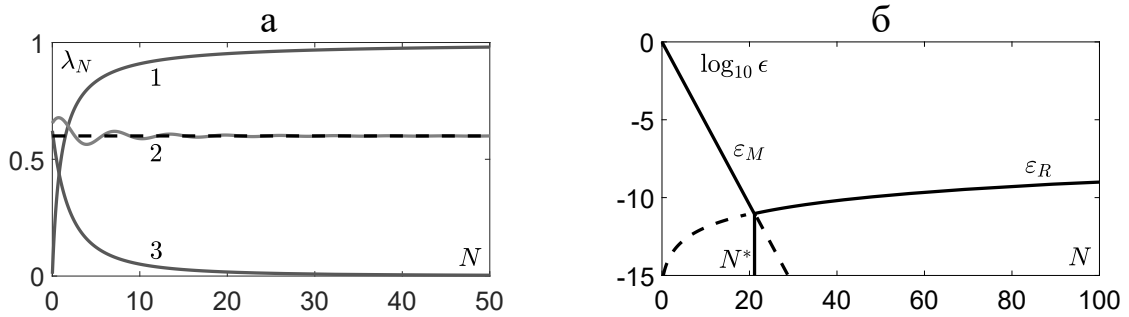
Поскольку  $|\tilde{p}_N(x) - \tilde{p}_{N+1}(x)| = |R_N(x) - R_{N+1}(x)|$ , то  $\lambda_N = \sqrt{\frac{|R_N(0) - R_{N+1}(0)|}{|R_{N-1}(0) - R_N(0)|}} = \sqrt{\frac{|R_{N+1}(0)|}{|R_{N-1}(0)|}} = \sqrt{\varepsilon_N \varepsilon_{N-1}}$ .

В случае 1 имеем  $|\mathfrak{a}_N^2 - \mathfrak{a}_N \mathfrak{a}_{N-1}| \sim \left(\frac{N}{N+1}\right)^{2r} \left(\frac{N-1}{N}\right)^r$ , отсюда, пользуясь биномом Ньютона для разложения  $(N^2 - 1)^r$ , находим  $|\mathfrak{a}_N^2 - \mathfrak{a}_N \mathfrak{a}_{N-1}| = \frac{|N^{2r} - (N^2 - 1)^r|}{(N+1)^{2r}} \sim \frac{r}{N^2}$  при  $N \rightarrow \infty$ ; поэтому  $\lambda_N \rightarrow \mathfrak{a}_N \rightarrow 1$  и  $r \sim \log_{\frac{N}{N+1}} \lambda_N$ .

В случае 2,  $\mathfrak{a}_N = \mathfrak{a} = q < 1$ ,  $\mathfrak{a}_N = \mathfrak{a}_{N-1} = q$ , откуда  $\lambda_N = \mathfrak{a}_N = q < 1$ .

В случае 3,  $|\mathfrak{a}_N^2 - \mathfrak{a}_N \mathfrak{a}_{N-1}| \sim \frac{q^2}{N(N+1)^2}$  при  $N \rightarrow \infty$ . Значит,  $\lambda_N \rightarrow \mathfrak{a}_N \rightarrow 0$ .

В любом случае получаем, что  $\lambda_N$  при достаточно больших  $N$  определяет величину  $\mathfrak{a}_N$  и, потому задаёт порядок сходимости метода приближения и, как следствие, гладкость искомого решения. На рис. 2.6, а представлено характерное поведение величины  $\lambda_N$  в каждом из трёх рассмотренных случаев.



**Рис. 2.6.** Характерное поведение величины  $\lambda_N$  для случаев 1,2,3 (а); характерная зависимость погрешности расчётов от числа узлов в логарифмической шкале (б)

На основе всех оценок, приведённых в данном разделе, построим график, характеризующий зависимость погрешности расчётов  $\epsilon = \epsilon_M + \epsilon_R$  от числа узлов  $N$  (см. рис. 2.6, б). Число  $N^*$  определяет то количество узлов, при котором ключевую роль начинает играть вычислительная погрешность. Действительно, учитывая скорость роста  $\epsilon_R$ , для каждого из трёх описанных случаев можно найти такое  $N^*$ , что при  $N < N^*$   $\epsilon_M > \epsilon_R$ , при  $N > N^*$   $\epsilon_M \leq \epsilon_R$ . В точке  $N^*$  характер поведения погрешности расчётов  $\epsilon$  меняется, см. рис. 2.6, б.

### Алгоритм вычислений с контролем погрешности.

1. Проводим расчёты на последовательности сеток при  $N = \overline{N_0, N_{\max}}$  по каждому направлению ( $N_0, N_{\max}$  следует выбирать, исходя из инфор-

мации о свойствах решения задачи). Обеспечиваем сходимость метода установления для каждого  $N$ .

2. Запоминаем для каждого  $N$  величины  $\|\tilde{p}_{N+1}(u) - \tilde{p}_N(u)\|$  (способ их вычисления описан ниже) и  $\lambda_N$ .
3. После завершения расчётов строим график  $\lambda_N$  и определяем степень гладкости (регулярности) искомой функции.
4. Используя информацию о гладкости решения и оценки компонент погрешности  $\varepsilon_M, \varepsilon_R$ , определяем минимальное  $N < N^*$ , необходимое для достижения заданной точности.

Для случая  $d \geq 2$  необходимо провести исследование метода, увеличивая количество узлов по каждому из направлений в отдельности.

Для расчёта величины  $\|\tilde{p}_{N+1}(u) - \tilde{p}_N(u)\|$  достаточно найти все экстремумы полинома  $\tilde{p}_{N+1}(u) - \tilde{p}_N(u)$ , лежащие в области  $D$ , т. е. все нули полинома  $\tilde{p}'_{N+1}(u) - \tilde{p}'_N(u)$ . Для этого можно воспользоваться алгоритмом, основанным на построении *сопровождающих матриц*, и на поиске их собственных значений [18, ch. 18]. Возможны обобщения этого алгоритма на случай произвольной размерности.

## § 2.5. Решение задачи с особенностью

Более точный анализ и учёт расположения особых точек решений нелинейных задач возможен с применением дробно-рациональных интерполяций (1.29) с отображением (1.30), в котором координаты особой точки  $(\varepsilon, \delta)$  при необходимости определяются по алгоритму, описанному в п. 2.1.3. Покажем, какие преимущества даёт такой подход при решении краевых задач. Рассмотрим в качестве примера краевую задачу Дирихле в квадрате  $D = [-1, 1]^2$ :

$$\begin{cases} \Delta u = \frac{2u^3}{(\alpha_0\beta_0)^4} \{(\alpha_0^2 + x^2)^2(3y^2 - \beta_0^2) + (\beta_0^2 + y^2)^2(3x^2 - \alpha_0^2)\}, \\ u(\pm 1, y) = (1 + \alpha_0^{-2})^{-1} \left(1 + \left(\frac{y}{\beta_0}\right)^2\right)^{-1}, \\ u(x, \pm 1) = \left(1 + \left(\frac{x}{\alpha_0}\right)^2\right)^{-1} (1 + \beta_0^{-2})^{-1}, \end{cases} \quad (2.48)$$

где  $\alpha_0$  и  $\beta_0$  – положительные числа. Точное решение этой задачи имеет вид

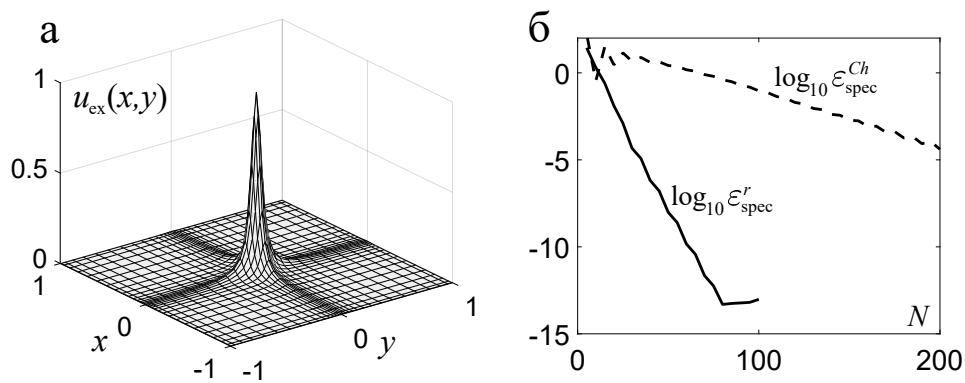
$$u = u_{\text{ex}}(x, y) = \left(1 + \left(\frac{x}{\alpha_0}\right)^2\right)^{-1} \left(1 + \left(\frac{y}{\beta_0}\right)^2\right)^{-1}.$$

Если  $\alpha_0$  или  $\beta_0$  достаточно малы, то функция  $u_{\text{ex}}(x, y)$  быстро меняется в окрестности точки  $(0, 0)$ , см. рис. 2.7, а. Отметим, что исследование существования и единственности решений задач с кубической нелинейностью в правой части вида (2.48) представляет отдельную задачу, которая выходит за рамки этой работы. Существование в данном случае очевидно, чего нельзя утверждать про единственность. Следовательно, вопрос, к какому решению будет сходиться метод установления, является открытым. Выше было сказано, что ключевую роль в этом вопросе играет устойчивость по Ляпунову соответствующего решения. Исследование устойчивости решения задачи (2.48) по линейному приближению показывает, что существенным является знак выражения при  $u^3$  в правой части. Положительный знак обеспечивает устойчивость, наличие отрицательного знака может приводить к неустойчивости. Заметим, что устойчивости лишь по линейному приближению не всегда достаточно для вывода о сходимости. В связи с этим решающую роль играет вычислительный эксперимент. В эксперименте наблюдалась сходимость метода установления с невязкой  $\varepsilon_S$  порядка  $10^{-11}$ . При этом, как показано ниже, при достаточном числе узлов  $N$  максимум отклонений предельного решения от функции  $u_{\text{ex}}(x, y)$  на узлах сетки составляет также  $10^{-11}$ . Этот факт служит существенным аргументом в пользу устойчивости  $u_{\text{ex}}(x, y)$ .

Рассмотрим случай  $\alpha_0 = \beta_0 = 0.05$  и используем разработанный алгоритм для поиска приближенного решения  $u_{\text{ap}}(x, y)$  задачи (2.48). В частности, используем два варианта алгоритма: вариант, в котором координаты узлов коллокации задаются корнями многочленов Чебышёва, и вариант со сгущением таких узлов. Для сгущения применим вдоль координат  $x$  и  $y$  отображения вида (1.30) с параметрами  $\delta = 0$ ,  $\varepsilon = 0.05$ . При выборе параметров учтено, что аналитическое продолжение в комплексную плоскость функции  $u_{\text{ex}}(x, 0)$  как функции переменной  $x$  имеет полюс в точке  $\delta + i\varepsilon \in \mathbb{C}$ . То же самое можно сказать про функцию  $u_{\text{ex}}(0, y)$ .

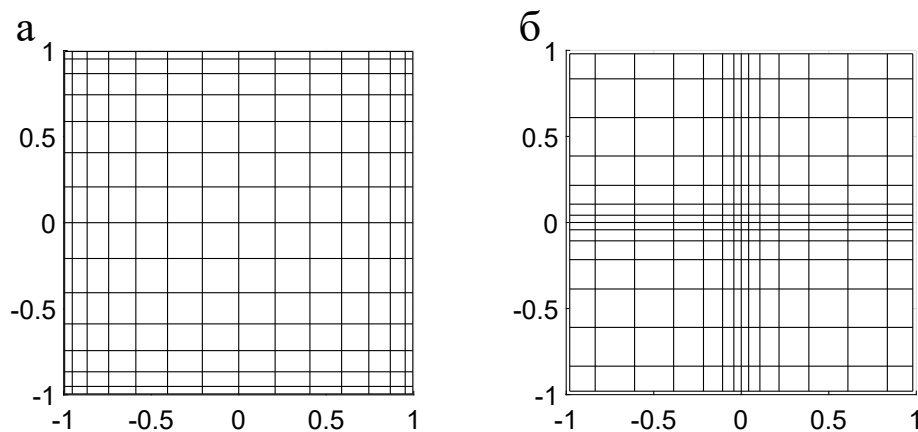
Пусть число узлов вдоль координаты  $x$  совпадает с числом узлов вдоль  $y$  ( $N = K$ ), обозначим  $\varepsilon_{\text{spec}} = \max_{j,k=1,N} |u_{\text{ex}}(x_j, y_k) - u_{\text{ap}}(x_j, y_k)|$ . Тогда, увеличивая число узлов  $N = K = 5, 10, 15, \dots, 200$ , мы будем наблюдать сходимость

приближенного решения к точному, см. рис. 2.7, б. Верхние индексы « $Ch$ » и « $r$ » в обозначениях погрешности  $\varepsilon_{\text{спец}}$  соответствуют применению полиномов с узлами Чебышёва и дробно-рациональных приближений. Из графика видно, что при использовании адаптированных узлов скорость сходимости существенно увеличивается. В результате для достижения высокой точности требуется намного меньше вычислительных ресурсов.



**Рис. 2.7.** Решение задачи (2.48) при  $\alpha_0 = \beta_0 = 0.05$  (а); зависимость  $\log_{10} \varepsilon_{\text{спец}}$  от числа узлов коллокации (б)

На рис. 2.8 показаны распределения узлов коллокации для двух указанных вариантов алгоритма.



**Рис. 2.8.** Сетка из  $15 \times 15$  узлов коллокации с координатами в нулях многочленов Чебышёва (а); сетка со сгущением узлов на основе (1.30) с  $\delta = 0$  и  $\varepsilon = 0.05$  (б)

В заключение исследуем быстродействие алгоритма, проводя вычисления на одном ядре персональной ЭВМ AMD Ryzen 9 5950X, 3.40 ГГц, DRAM 32 Гб, 2133 МГц. Каждая строка табл. 7 соответствует фиксированной величине от-

носительной погрешности численного решения задачи (2.48), указанной в первом столбце. В остальных столбцах показано, сколько узлов и сколько времени в миллисекундах требуется алгоритму, чтобы получить решение с относительной погрешностью не более указанной в первом столбце. Столбцы «Узлы Чебышёва» содержат результаты, полученные при использовании узлов с координатами в нулях многочленов Чебышёва, столбцы «Сгущенные узлы» содержат результаты, полученные при использовании сгущения узлов и дробно-рациональных приближений.

**Таблица 7.** Затраты времени при решении задачи (2.48)

Относительная погрешность	Узлы Чебышёва		Сгущенные узлы	
	$N$	время (мс)	$N$	время (мс)
$10^{-1}$	100	83	17	4
$10^{-3}$	160	297	26	7
$10^{-5}$	220	798	34	12
$10^{-7}$	304	2271	46	18
$10^{-9}$	390	4835	56	21
$10^{-11}$	478	8758	68	33

Из результатов, приведённых на рис. 2.7 и в табл. 7, видно, что учёт особенности решения позволяет на много порядков увеличить точность при заданном числе узлов или, если стоит задача найти решение с заданной точностью, сократить в десятки или даже сотни раз вычислительные затраты для достижения этой точности. Такая эффективность обусловлена аппроксимационными качествами созданных модификаций ДРБИ, см. рис. 1.3.

## **§ 2.6. Сравнение результатов предложенного алгоритма и других методов в модельной задаче о течении полимерной жидкости**

В гл. 3 диссертации с использованием НМБН исследованы течения типа Пуазейля несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости в каналах с сечениями различных форм. В частности, в п. 3.2.4 дан численный анализ



неизотермического течения в канале с сечением, заключённым между двумя софокусными эллипсами. Такая задача возникает в технологиях термоструйной печати чернилами на полимерной основе, когда дюзы печатающего устройства имеют эллиптическое сечение и содержат нагревательные элементы, контуры которых в рамках модели представляют внутреннюю эллиптическую стенку канала. В п. 3.2.4 для описания таких течений сформулирована квазилинейная краевая задача с двумя неизвестными функциями – продольной компонентой вектора скорости течения и температурой.

В данном параграфе рассмотрена тестовая задача, построенная по образцу прикладной задачи из п. 3.2.4, но имеющая известное точное решение. Задача содержит целый комплекс вычислительных проблем: область задачи является двусвязной и имеет сложную форму, задача включает два нелинейных связанных уравнения с малыми параметрами, тип уравнений меняется при переходе через границы области с эллиптического на гиперболический.

Для решения этой задачи разработаны и применены три вычислительных метода, использующие различные конечномерные функциональные пространства для приближения решений: 1) вариант метода коллокаций и наименьших квадратов, МКНК, созданный В.А. Беляевым и Л.С. Брындиным под руководством проф. В.П. Шапеева (см. [158, 232]); 2) метод конечных элементов, МКЭ, реализованный в пакете с открытым исходным кодом FEniCS Project [233], адаптированный к решению задачи А.Г. Горыниным; 3) нелокальный метод без насыщения, НМБН, разработанный в этой главе.

### 2.6.1. Постановка тестовой задачи

Для сравнения точности и скорости сходимости МКНК, МКЭ и НМБН сформулируем постановку нелинейной тестовой задачи для системы из двух квазилинейных уравнений эллиптического типа с известным точным решением. Пусть  $\nu(y, z)$ ,  $\mu(y, z)$  — неизвестные достаточно гладкие функции, заданные между двумя конфокальными эллипсами  $\mathcal{E}_1$ ,  $\mathcal{E}_2$  с фокусами в точках  $\pm 1$ :  $\mathcal{E}_1 = \left\{ (y, z) : \frac{y^2}{\varkappa} + \frac{z^2}{\varkappa - 1} = 1 \right\}$ ,  $\mathcal{E}_2 = \left\{ (y, z) : \frac{y^2}{4} + \frac{z^2}{3} = 1 \right\}$  — внутренний и внешний эллипсы соответственно, см. рис. 1.1, в,  $\varkappa = \cosh^2(L \operatorname{arccosh} 2)$ ,  $L < 1$  — постоянная. Пусть  $\Omega$  — область задачи. Поставим для функций  $\nu, \mu$  следующую краевую задачу в декартовой системе координат  $(y, z)$ :

$$\begin{cases} \nu\nu_{yy} + \nu_{zz} - \widehat{\sigma}(y, z)\nu^2 + \chi(y, z) \exp(\mu(y, z) + C) + \widehat{\sigma}(y, z) = 0, \\ \mu_{yy} + \mu_{zz} + \mu - \ln|1 - \nu| = \xi(y, z), \\ \nu|_{\mathcal{E}_1} = \nu|_{\mathcal{E}_2} = 0, \quad \mu|_{\mathcal{E}_1} = \mu|_{\mathcal{E}_2} = -C, \end{cases} \quad (2.49)$$

где

$$\widehat{\sigma}(y, z) = \frac{2C\eta}{\varkappa} + \frac{2C}{\varkappa}\mathcal{B} + \frac{1}{2}C\mathcal{D} + C^2\eta\mathcal{G}^2;$$

$$\chi(y, z) = -\frac{2C\eta}{\varkappa} + \frac{8C\zeta}{3(\varkappa - 1)} + \frac{2C\mathcal{B}}{\varkappa(\varkappa - 1)} + \frac{C\mathcal{D}}{6} - C^2\eta\mathcal{G}^2 + \frac{4C^2\zeta(\varkappa^2 + \eta + \varkappa(2 - 7\eta/4 - 2\zeta))^2}{9\varkappa^2(1 - \varkappa)^2};$$

$$\xi(y, z) = \frac{C}{6\varkappa(\varkappa - 1)}(12 - 7\varkappa^2 - 22\eta - 4\zeta + \varkappa(25\eta + 31\zeta - 17)) - C;$$

$$\mathcal{B} = \mathcal{B}(y, z) = \frac{1}{3}\zeta + \frac{1}{4}\eta - 1; \quad \mathcal{D} = \mathcal{D}(y, z) = \frac{\zeta}{\varkappa - 1} + \frac{\eta}{\varkappa} - 1;$$

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}(y, z) = \frac{1}{\varkappa}\left(\frac{2}{3}\zeta + \eta - 2\right) - \frac{\zeta}{2(1 - \varkappa)} - \frac{1}{2}; \quad \eta = y^2, \quad \zeta = z^2.$$

Решение задачи (2.49) даётся формулами

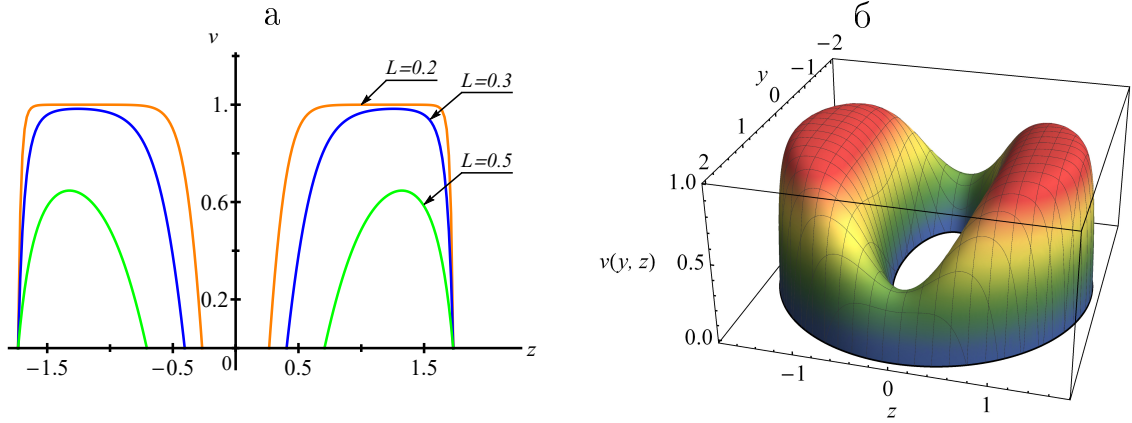
$$\nu(y, z) = 1 - \exp(\mu(y, z) + C), \quad \mu(y, z) = C\left(\frac{y^2}{\varkappa} + \frac{z^2}{\varkappa - 1} - 1\right)\left(\frac{y^2}{4} + \frac{z^2}{3} - 1\right) - C,$$

где  $C > 0$  — произвольная постоянная из  $\mathbb{R}$ .

С учётом формул для точного решения несложно видеть, что внутри области первое из уравнений (2.49) имеет эллиптический тип. На границе области уравнение для функции  $\nu(y, z)$  становится параболическим, а за границей — гиперболическим. Это обстоятельство затрудняет сходимость итерационного процесса метода установления, особенно в случае применения МКНК, использующего законтурную часть области.

**Замечание 2.4.** С уменьшением  $L$  градиент функции  $\nu(y, z)$  около границ области быстро растёт (рис. 2.9). В связи с этим замедляется сходимость используемого итерационного процесса и уменьшается точность расчетов.

Для решения задачи с помощью НМБН запишем уравнение (2.49) в эллиптических координатах (1.21) при  $\delta = 1$ . После преобразований получаем



**Рис. 2.9.** Профиль точного решения задачи  $\nu(0, z)$  при разных параметрах  $L$  (а) и решение при  $L = 0.3$  (б)

$$\left\{ \begin{aligned}
 & \left\{ 1 + (\nu - 1) \frac{\sin^2 \gamma \sinh^2 \alpha}{g^2} \right\} \nu_{\alpha\alpha} + \left\{ 1 + (\nu - 1) \frac{\cos^2 \gamma \cosh^2 \alpha}{g^2} \right\} \nu_{\gamma\gamma} + \\
 & + (\nu - 1) \left\{ \frac{\sin(2\gamma) \sinh(2\alpha)}{2g^2} \nu_{\alpha\gamma} + \right. \\
 & + \frac{[3 - \cos(4\gamma) + 2 \cos(2\gamma) \cosh(2\alpha)] \sinh(2\alpha)}{8g^4} \nu_{\alpha} + \\
 & \left. + \frac{[3 - \cosh(4\alpha)] \sin(2\gamma) + \cosh(2\alpha) \sin(4\gamma)}{8g^4} \nu_{\gamma} \right\} + \\
 & + g^2 \{ \widehat{\sigma}(\alpha, \gamma) (1 - \nu^2) + \chi(\alpha, \gamma) \exp[\mu(\alpha, \gamma) + C] \} = 0, \\
 & \mu_{\alpha\alpha} + \mu_{\gamma\gamma} + (\mu - \ln |1 - \nu|) g^2 = g^2 \xi(\alpha, \gamma), \\
 & \nu|_{\alpha=\alpha^0} = \nu|_{\alpha=\alpha^1} = 0, \quad \mu|_{\alpha=\alpha^0} = \mu|_{\alpha=\alpha^1} = -C, \quad \alpha^0 = L\alpha^1, \quad \alpha^1 = \operatorname{arccosh}(2).
 \end{aligned} \right. \quad (2.50)$$

Здесь  $g = g(\alpha, \gamma) = \sinh^2 \alpha + \cos^2 \gamma$ ,  $\widehat{\sigma}(\alpha, \gamma)$ ,  $\chi(\alpha, \gamma)$ ,  $\xi(\alpha, \gamma)$  рассчитаны подстановкой в формулы  $\widehat{\sigma}(y, z)$ ,  $\chi(y, z)$ ,  $\xi(y, z)$  замен  $y = \cosh \alpha \sin \gamma$ ,  $z = \delta \sinh \alpha \cos \gamma$ .

Исходя из представления (2.3), запишем уравнения задачи (2.49) в виде

$$\left\{ \begin{aligned}
 \Delta \nu = \nu_{yy} + \nu_{zz} &= (1 - \nu) \nu_{yy} + \widehat{\sigma}(y, z) \nu^2 - \\
 & - \chi(y, z) \exp(\mu(y, z) + C) - \widehat{\sigma}(y, z) = f_1(\nu, \mu, y, z), \\
 \Delta \mu = \mu_{yy} + \mu_{zz} &= \xi(y, z) - \mu + \ln |1 - \nu| = f_2(\nu, \mu, y, z).
 \end{aligned} \right. \quad (2.51)$$

Для решения нелинейных уравнений (2.51) применим итерационный метод

установления с простой и соболевской регуляризациями без разделения решения на слагаемые, удовлетворяющие однородным и неоднородным условиям. По образцу (2.9), (2.10) для функции  $\nu$  получаем

$$\nu^n - \tau \Delta \nu^n = \nu^{n-1} - \tau f_1(\nu^{n-1}, \mu^{n-1}, y, z) = f_1^P(\nu^{n-1}, \mu^{n-1}, y, z),$$

$$k_1 \nu^n - (k_2 + \tau) \Delta \nu^n = (k_1 - k_2 \Delta) \nu^{n-1} - \tau f_1(\nu^{n-1}, \mu^{n-1}, y, z) = f_1^S(\nu^{n-1}, \mu^{n-1}, y, z)$$

и аналогично для функции  $\mu$ . Здесь верхний индекс у переменной означает номер шага метода установления  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Отметим, что предложенный алгоритм естественным образом обобщается для решения системы (2.51): на каждом шаге метода установления нужно последовательно решать уравнения для  $\nu^n$  и  $\mu^n$  и останавливать процесс, когда для каждого из этих решений выполнены условия вида (2.11).

### 2.6.2. Методы решения тестовой задачи

В рамках МКНК область краевой задачи  $\Omega$  заключается в фиктивный прямоугольник размера  $d_1 \times d_2$ , который покрывается регулярной сеткой  $N_1 \times N_2$  с прямоугольными ячейками  $\Omega_j$ ,  $j = \overline{1, N_{cells}}$ ,  $N_{cells}$  — количество ячеек. Вытянутые и/или малые ячейки нерегулярной формы присоединяются к соседним прямоугольным ячейкам [234, 235]. В каждой группе объединенных ячеек и в каждой прямоугольной ячейке вводятся локальные координаты

$$y_1 = \frac{y - y_j}{h_1}, \quad z_1 = \frac{z - z_j}{h_2},$$

где  $(y_j, z_j)$  — центр  $j$ -й прямоугольной ячейки,  $h_1 = d_1/(2N_1)$ ,  $h_2 = d_2/(2N_2)$ .

Далее строится локальное приближенное решение в виде линейной комбинации с неизвестными коэффициентами базисных элементов конечномерного функционального пространства полиномов степени не выше  $K$ . Здесь в качестве базисных элементов взяты мономы

$$\nu_{ap,j}(y_1, z_1) = \sum_{i_1=0}^K \sum_{i_2=0}^{K-i_1} b_{i_1 i_2, j} y_1^{i_1} z_1^{i_2}, \quad \mu_{ap,j}(y_1, z_1) = \sum_{i_1=0}^K \sum_{i_2=0}^{K-i_1} c_{i_1 i_2, j} y_1^{i_1} z_1^{i_2}. \quad (2.52)$$

Для вычислений используем hp-вариант МКНК, в котором уточнение решения происходит за счет измельчения шагов сетки  $2h_1 \times 2h_2$  и/или увеличения степени  $K$  полиномиальных приближений (2.52) [157, 235].

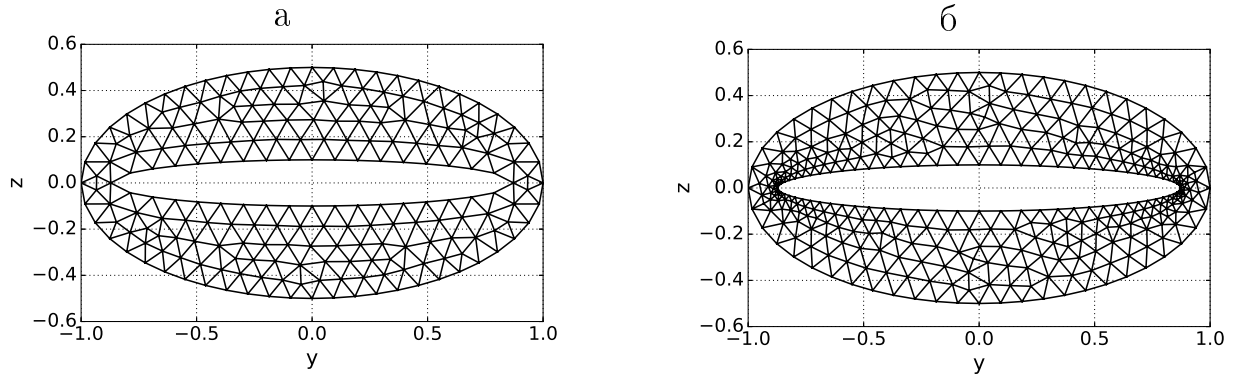
Уравнения приближённой задачи включают три блока: 1) *уравнения коллокаций* для регуляризованных соотношений с весом  $p_c$  и с узлами внутри ячеек; 2) *условия согласования локальных решений* на каждой общей стороне между соседними ячейками (приравниваются линейные комбинации неизвестных функций и их производных по нормали к границе с весами  $p_{m_0}$ ,  $p_{m_1}$ , см. [155]) и 3) *краевые условия* с весами  $p_{b_0}$ , записанные в точках, распределённых на границе области. На основе этих соотношений в каждой ячейке записывается переопределённая локальная СЛАУ. Её решения определяется в смысле наименьших квадратов и ищется с применением QR-разложения матриц СЛАУ. Решение задачи ищется с помощью итераций по подобластям, вложенных в цикл метода установления. При этом вместо (2.11) в качестве условия останова итерационного процесса используется выполнение неравенства

$$\max\{\max_{i_1 i_2 j} |b_{i_1 i_2, j}^{n+1} - b_{i_1 i_2, j}^n|, \max_{i_1 i_2 j} |c_{i_1 i_2, j}^{n+1} - c_{i_1 i_2, j}^n|\} < \epsilon_S,$$

$\epsilon_S$  — малая константа, называемая псевдопогрешностью решения. Реализован параллельный вариант метода итераций по подобластям.

Для решения задачи (2.49) реализована также стандартная процедура МКЭ в совокупности с методом установления. Для регуляризованных уравнений приведены слабые постановки задачи. Область  $\Omega$  покрыта сеткой с треугольными элементами  $\mathcal{T}_h$  (рис. 2.10, а), где  $h$  — максимальное значение диаметра окружности, описанной около элемента. Для нахождения конечно-элементной аппроксимации решения  $\nu_h^n, \mu_h^n$  использованы Лагранжевы конечные элементы второго порядка [236, ch. 6, sec. 2]. Для такого типа аппроксимации искомая функция ищется в шести узлах на каждом элементе, а именно в вершинах и серединах сторон каждой треугольной ячейки, которые однозначно выражаются через координаты вершин треугольника. В итоге составлена и решена система линейных уравнений для определения значений решения в узлах. Алгоритм решения задачи был реализован в конечно-элементном пакете с открытым исходным кодом FEniCS Project [233]. Сетка для области  $\Omega$  строилась в пакете Gmsh [237].

Детальное описание МКНК и МКЭ в приложении к тестовой задаче (2.49) дано в [113].



**Рис. 2.10.** Конечно-элементная сетка: а) 348 элементов без сгущения (параметр  $s = 1$ , см. § 3.3, этап 4, рис. 3.14; б) 652 элемента со сгущением ( $s = 20$ )

### 2.6.3. Результаты расчётов. Сравнение эффективности методов

В табл. 8 приведены параметры численных методов, использованные в расчётах при решении тестовой задачи и при численном моделировании течения полимерной жидкости, описанном в § 3.3.

**Таблица 8.** Информация о начальных данных и основных параметрах методов

Метод	Описание	Обозначение	Значение
<b>Общие для всех методов</b>	количество контрольных точек	$Q$	1400 – 1681
	шаг метода установления	$\tau$	0.1 – 1.1
	параметры регуляризации	$k_1$	1 – 1.1
		$k_2$	0 – 50
<b>МКНК</b>	размер сетки	$N_1 \times N_2$	40×10 – 320×80
	шаги сетки	$2h_1, 2h_2$	$2/N_1, 2r_1/N_2$ <sup>1</sup>
	весовые множители	$p_c, p_{b_0}$	$h_1 h_2, 10$
	псевдопогрешность	$p_{m_0}, p_{m_1}$	1, $\sqrt{h_1 h_2}$
		$\epsilon_S$	$10^{-5} - 10^{-10}$
начальное приближение	$b_{i_1 i_2, j} = c_{i_1 i_2, j}$	$0 \forall i_1, i_2, j$ , но $c_{00, j} = 1.5$	
<b>МКЭ</b>	характерный размер элемента	$h$	0.004 – 0.128
	параметр сгущения сетки	$s$	1 – 8
	начальные значения функций $\nu(t, y, z), \mu(t, y, z)$	$\nu_h^0, \mu_h^0$	1.0, 1.5
<b>НМБН</b>	размер сетки	$N_1 \times N_2$	21 × 21 – 41 × 41
	невязка установления	$\epsilon_S$	$10^{-11} - 10^{-8}$
	начальные значения функций $\nu(t, y, z), \mu(t, y, z)$	$\nu^0(\alpha_j, \gamma_k), \mu^0(\alpha_j, \gamma_k)$	0

<sup>1</sup> $r_1$  – малая полуось внешнего эллипса.

Для оценки точности описанных методов вычислим значения относительных погрешностей приближенного решения  $\nu$  (аналогично для  $\mu$ ):

$$E_r^\nu = \max_{\xi=1,\dots,\mathcal{Q}} |\nu(y_\xi, z_\xi) - \nu_{ap}(y_\xi, z_\xi)| / \max_{\xi=1,\dots,\mathcal{Q}} |\nu(y_\xi, z_\xi)|, \quad (2.53)$$

где  $\mathcal{Q}$  — количество распределенных контрольных точек  $(y_\xi, z_\xi)$ , взятых в области для подсчета в них погрешности. Эти точки являются образами точек  $(\alpha_j, \gamma_k)$ , где  $\alpha_j = \frac{\alpha^1 - \alpha^0}{2} \cos \frac{2j-1}{2N_1} \pi + \frac{\alpha^1 + \alpha^0}{2}$ ,  $\gamma_k = \frac{2\pi(k-1)}{N_2}$  под действием отображения (1.21),  $j = \overline{1, N_1}$ ,  $k = \overline{1, N_2}$ ,  $N_2$  — нечётное число. В выражении (2.53)  $\nu$  и  $\nu_{ap}$  — точное и приближенное решения задачи (2.49) соответственно.

Порядок сходимости приближенного решения в рамках МКНК и НМБН определяется по формуле

$$R = \log_2 E_r^{N_1, N_2} / E_r^{2N_1, 2N_2},$$

где  $E_r^{N_1, N_2}$  — погрешность приближенного решения (2.53), полученного на сетке  $N_1 \times N_2$ . В рамках МКЭ для определения порядка сходимости проводились расчёты на сетках с последовательным двукратным уменьшением характерного размера элемента  $h$ .

При решении тестовой задачи параметры численных методов взяты из табл. 8. При этом в МКНК  $c_{00,j} = 0$  и  $\tau = 0.01$ , в МКЭ  $\tau = 0.1$ . В рамках НМБН значения  $\tau$  варьировались (см. табл. 9). Для вычисления (2.53) в МКНК в каждой прямоугольной ячейке равномерно распределялось 100 точек. При этом вычисления проводились только в точках, принадлежащих области решения задачи. Для сравнения приближённых решений, полученных МКЭ, с точным решением область между двумя эллипсами делилась на 100 угловых сегментов с равными углами, имеющими общую вершину в нуле. В каждом сегменте вдоль радиального направления от внутренней к внешней границе равномерно распределялись по 10 точек. Таким образом, суммарно было взято 1000 точек. В НМБН точки для вычисления погрешности совпадали с узлами интерполяции. Начальные приближения искомых функций в методе установления полагались равными нулю.

В табл. 9 даны показатели точности и скорости работы алгоритмов на основе МКНК, МКЭ и НМБН. Здесь  $N_{iter}$  — число итераций метода установления,  $t_{solve}$  — время выполнения итерационного процесса, ЧСС — число

степеней свободы, которое определяется отдельно для каждого алгоритма. Расчёты выполнены на ЭВМ Intel Core i7-4700MQ CPU 2.40GHz, 12 Gb.

**Первый блок табл. 9** содержит показатели МКНК. В двух последних столбцах через черту указаны результаты, полученные с использованием параллельного варианта метода при расчёте на четырёх ядрах. При этом наблюдалось почти трёхкратное увеличение скорости вычислений без существенных изменений погрешности. Для вычисления ЧСС в рамках МКНК число неизвестных коэффициентов умножалось на число независимых ячеек. Например, при  $K = 2$  и  $N_1 \times N_2 = 10 \times 10$  число неизвестных коэффициентов в каждой ячейке есть  $2 \cdot 6 = 12$ . Здесь учтено, что в поставленной задаче имеются две неизвестные функции  $-\nu$  и  $\mu$ . С учётом того, что малые и вытянутые ячейки в МКНК присоединяются к соседним, для рассмотренной тестовой задачи получилось 60 независимых ячеек. Таким образом, в этом примере  $\text{ЧСС} = 12 \cdot 60 = 720$ .

Как отмечено выше, уменьшение числа  $L$  существенно влияет на точность расчётов, см. замечание 2.4. Например, применение МКНК при  $L = 0.3$  и  $K = 4$  на сетке размера  $20 \times 20$  позволило получить решение с точностью  $E_r^\nu = 2.80\text{e-}1$  и  $E_r^\mu = 2.59\text{e-}2$ . Однако при  $L \approx 0.1$  получить численное решение, хотя бы качественно схожее с точным, уже не удаётся.

**Второй блок табл. 9** содержит показатели эффективности МКЭ в эксперименте с  $L = 0.5$ ,  $C = 1$ . ЧСС для МКЭ задано равным числу уравнений в глобальной СЛАУ. Из таблицы видно, что порядок сходимости близок к двум.

**В последнем блоке табл. 9** приведены показатели точности и скорости НМБН в эксперименте при  $C = 1$ ,  $L = 0.3$  и  $L = 0.5$ . Видно, что уменьшение значения  $L$  также приводит к снижению точности. ЧСС в рамках НМБН вычислялось как число узлов интерполяции  $N_1 \times N_2$ , умноженное на два. При этом решались уравнения (2.50), записанные в эллиптической системе координат, и использовалось прямое произведение полинома (1.3), (1.6) и полинома (1.17):  $\mathcal{P}(u, \alpha, \gamma) = \tilde{p}_N^1(u, \alpha) \times s_K(u, \gamma)$ , см. также п. 1.1.3. Из табл. 9 видно, что НМБН позволяет получить приближённое решение повышенной точности: вплоть до 12–13 знаков. Характер сходимости метода при  $L = 0.3$  и  $L = 0.5$  является экспоненциальным, а время расчётов на 2–3 порядка меньше,



чем при использовании МКНК и МКЭ.

**Таблица 9.** Результаты, полученные в ходе применения МКНК, МКЭ и НМБН для решения тестовой задачи при  $C = 1$

$N_1 \times N_2 / h$	ЧСС	$\tau$	$E_r^\nu$	$R$	$E_r^\mu$	$R$	$N_{iter}$	$t_{solve}$ (сек)
МКНК при $L = 0.5$								
$K = 2$								
10×10	720	0.01	4.41e-1	—	6.37e-2	—	81/81 <sup>1</sup>	0.906/0.609
20×20	2832	0.01	1.32e-1	1.74	1.23e-2	2.37	161/121	7.951/2.719
40×40	11424	0.01	3.20e-2	2.04	1.89e-3	2.70	161/161	30.829/17.234
$K = 3$								
10×10	1200	0.01	2.23e-1	—	1.00e-2	—	121/121	6.140/2.797
20×20	4720	0.01	7.17e-2	1.63	1.55e-3	2.68	161/121	26.671/9.297
40×40	19040	0.01	1.27e-2	2.57	1.71e-4	3.18	161/121	115.781/38.844
$K = 4$								
10×10	1800	0.01	7.97e-2	—	1.09e-3	—	321/281	47.469/27.171
20×20	7080	0.01	1.38e-2	2.52	1.80e-4	2.59	481/521	300.015/155.437
40×40	28560	0.01	2.94e-3	2.23	2.11e-5	3.09	2101/1801	4782.94/1604.55
МКЭ при $L = 0.5$								
0.512	500	0.1	1.19e-1	—	3.60e-2	—	19	0.83
0.256	1644	0.1	4.38e-2	1.44	9.03e-3	1.99	27	2.50
0.128	5500	0.1	1.17e-2	1.90	2.06e-3	2.13	44	7.34
0.064	20092	0.1	2.22e-3	2.40	5.53e-4	1.89	70	33.26
0.032	77164	0.1	3.22e-4	2.78	1.03e-4	2.42	124	225.24
0.016	300492	0.1	9.19e-5	1.81	2.56e-5	2.01	221	1911.01
НМБН								
$L = 0.5$								
4×4	32	100	6.33e-2	—	7.25e-3	—	6	1.6e-2
8×8	128	100	1.51e-3	2.06	7.37e-5	6.62	22	4.2e-2
16×16	512	100	3.63e-6	8.70	3.02e-8	11.25	208	5.82e-1
32×32	2048	100	4.64e-11	16.25	1.48e-13	17.63	2442	11.614
$L = 0.3$								
4×4	32	0.4	3.49e-1	—	9.31e-2	—	11	14e-3
8×8	128	0.4	4.72e-2	2.88	3.85e-2	1.27	17	36e-3
16×16	512	1.05	3.92e-4	6.91	1.09e-4	8.46	78	2.84e-1
32×32	2048	1.05	3.33e-8	13.52	2.41e-9	15.46	1985	966.6
64×64	8192	1.01	1.36e-13	17.90	1.24e-13	14.24	18505	4075.2

<sup>1</sup>Значения, полученные при использовании распараллеливания, указаны после косой черты.

Такое радикальное преимущество НМБН как по максимальной достижимой точности, так и по времени расчётов в сложной вычислительной задаче, имеющей отношение к приложению, ещё раз подчёркивает высокую эффективность нелокальных приближений и предложенной вычислительной схемы в смысле свойств, указанных в § 0.3. Вместе с этим заметим, что МКНК и МКЭ обладают большей гибкостью при решении задач в областях сложных форм. В следующем параграфе опишем один подход к обобщению НМБН для решения задач более сложной геометрии.

**Замечание 2.5.** Нужно заметить, что описанные численные результаты получены с применением комплексов программ [183, 238], в которых реализованы соответственно НМБН и МКНК. Программа, использующая МКЭ, разработанная А.Г. Горыниным, не была зарегистрирована в Роспатенте, однако основные использованные пакеты описаны в [233, 237].

## **§ 2.7. Разработка метода спектральных элементов для решения задач в областях сложных форм**

Предложенный алгоритм обобщается на случай, когда область задачи состоит из подобластей канонической формы или из образов таковых под действием какого-либо конформного отображения. Этот параграф посвящён разработке метода решения нелинейных краевых задач в областях, допускающих разбиение на прямоугольные подобласти. Подобные методы в зарубежной литературе принято называть методами спектральных элементов, «spectral element methods». Основная проблема, возникающая при их разработке, заключается в создании алгоритма для быстрого обмена данными между смежными (т. е., имеющими общую часть границы) подобластями (рис. 2.11). Эти данные, содержащие значения решения и его производных по нормали к общей границе, используются для задания краевых условий в каждой подобласти, что обеспечивает непрерывность решения и его производных на границе либо, если того требует постановка задачи, их скачок. Оказалось, что применение тензорных произведений одномерных приближений позволяет существенно ускорить процесс генерации указанных данных.

Для создания алгоритма совместим итерационный процесс метода уста-

новления и метод итераций по подобластям (метод Шварца), т. е. на каждом шаге метода установления будем обходить все подобласти и последовательно решать краевые задачи в каждой из них. При этом в качестве краевых условий выступают либо условия самой краевой задачи (если граница является внешней границей области задачи), либо значения неизвестной функции или её производной, рассчитанные по данным из смежной подобласти на предыдущей итерации (если граница разделяет две подобласти).

Пусть подобласть представляет собой прямоугольник  $[a, b] \times [c, d] = \{(x, y) : a \leq x \leq b, c \leq y \leq d\}$ . Используем линейные замены переменных, переводящие  $[a, b] \times [c, d]$  в квадрат  $[-1, 1]^2 = \{(\tilde{x}, \tilde{y}) : -1 \leq \tilde{x}, \tilde{y} \leq 1\}$ :  $\tilde{x} = \frac{b-a}{2}x + \frac{b+a}{2}$ ,  $\tilde{y} = \frac{d-c}{2}y + \frac{d+c}{2}$ . Для аппроксимации решения в квадрате используем прямое произведение интерполяционных полиномов (1.20) либо аналогичное произведение ДРБИ вида (1.29). Далее будем использовать ДРБИ и соответствующие матричные аппроксимации первых и вторых производных по направлению  $x$ :  $\mathcal{A}_g, A_g$  и по направлению  $y$ :  $\mathcal{B}_h, B_h$ , см. (1.48) и п. 1.3.4. Напомним, что нижним индексом здесь обозначается аналитическое отображение узлов, кроме того, за счёт линейных замен переменных у этих матриц имеются множители:  $\frac{2}{b-a}$ ,  $\frac{4}{(b-a)^2}$  и  $\frac{2}{d-c}$ ,  $\frac{4}{(d-c)^2}$  соответственно.

Для реализации алгоритма необходимо выполнить некоторые предварительные действия. Для каждой пары смежных подобластей требуется определить первую подобласть, которая получает значение решения на границе из смежной подобласти, и вторую, которая получает из первой подобласти значение производной решения по нормали к их общей границе. Затем необходимо сформировать матрицы и вектора, служащие для быстрого расчёта приближённых значений решения и его производных на смежных границах при обмене этими данными в ходе итераций по подобластям. Объясним более конкретно, что имеется в виду.

Положим, подобласти  $I = [a_I, b_I] \times [c_I, d_I]$  и  $II = [a_{II}, b_{II}] \times [c_{II}, d_{II}]$  являются смежными и имеют общую границу  $L$ , см. рис. 2.11. В ходе итераций по подобластям значения решения  $u(x, y)$  на границе  $L$  передаются из подобласти  $I$  в подобласть  $II$ , а значения производных  $u_x(x, y)$  на  $L$  передаются из  $II$  в  $I$ . Пусть  $(x_j^I, y_k^I) \in I$ ,  $(x_j^{II}, y_k^{II}) \in II$  – узлы коллокации в подобластях  $I$  и  $II$ . Координаты этих узлов получены с помощью применения аналитических

отображений  $g_I(x)$ ,  $h_I(y)$  и  $g_{II}(x)$ ,  $h_{II}(y)$  вида (1.30) соответственно. Пусть  $N_I \times K_I$ ,  $N_{II} \times K_{II}$  – размеры сеток, состоящих из этих узлов, а  $U_I$ ,  $U_{II}$  – матрицы значений решения в них. В таком случае, используя нижеследующую формулу, можно рассчитать вектор  $\vartheta_I$ , содержащий значения решения в точках  $(\gamma, y_k^I) \in \Gamma_I$  (на рис 2.11 они показаны крестиками):

$$\vartheta_I = \begin{pmatrix} u(\gamma, y_1^I) \\ \vdots \\ u(\gamma, y_K^I) \end{pmatrix} = U_I^T \begin{pmatrix} q_1^I \\ \vdots \\ q_N^I \end{pmatrix} = U_I^T \mathbf{Q}_I, \quad (2.54)$$

где  $K = K_I$ ,  $N = N_I$ , а компоненты  $q_1^I, \dots, q_N^I$  вектора  $\mathbf{Q}_I$  вычисляются с применением линейного отображения переменной  $x$  интерполяции (1.28) с отрезка  $[-1, 1]$  на отрезок  $[a^I, b^I]$ . Если при этом положить  $x = b^I$ , то получим  $q_j^I = J_j(1)/\mathcal{D}_{N_I}(1)$ .

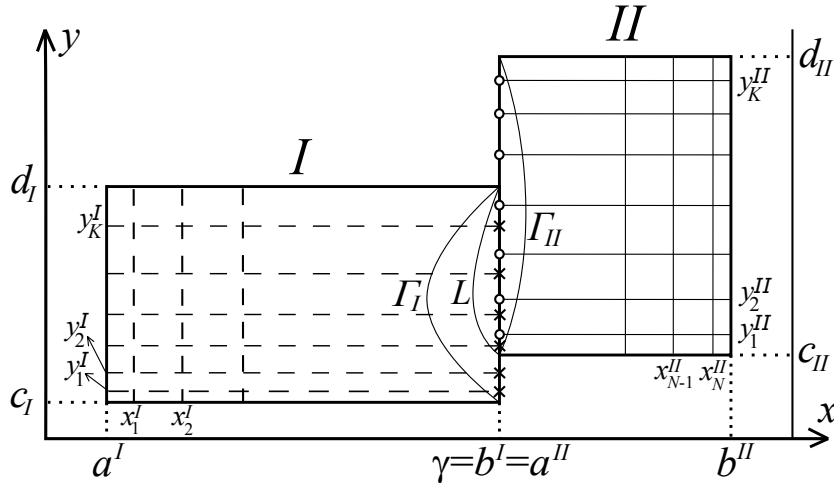


Рис. 2.11. Две смежные подобласти  $I$  и  $II$  и сетки в них

Пусть далее  $\eta_1, \dots, \eta_{M_I}$  – ординаты тех узлов из множества  $(\gamma, y_k^{II})$ , которые лежат на границе  $L$  (здесь предполагается, что существует хотя бы один такой узел, см. рис. 2.11);  $\tilde{\eta}_m = \frac{2}{b_I - a_I}(\eta_m - \frac{a_I + b_I}{2})$ ,  $\tilde{\eta}_m \in [-1, 1]$ ,  $m = \overline{1, M_I}$ . Тогда для вектора, содержащего значение решения в этих узлах, имеет место следующее представление:

$$\vartheta_{I \rightarrow II} = \Theta_I \vartheta_I, \quad (2.55)$$

в котором элементы  $M_I \times K_I$ -матрицы  $\Theta_I$  могут быть вычислены с использованием (1.28) по формуле:  $\theta_{mk}^I = J_k(\tilde{\eta}_m)/\mathcal{D}_{K_I}(\tilde{\eta}_m)$ . В методе итераций по

подобластям значения решения  $\vartheta_{I \rightarrow II}$  используются как граничные условия для функции  $u(x, y)$  в подобласти  $II$ .

Алгоритм согласования значений производных решения по нормали к границе  $L$  строится аналогично, но с одним отличием: вместо вектора  $\mathbf{Q}_I$  в формуле (2.54) необходимо взять вектор  $\mathbf{Q}_{II}$  с компонентами

$$q_j^{II} = \frac{2}{b^{II} - a^{II}} \frac{J_j(-1)}{\mathfrak{D}_{N_{II}}(-1)} \sum_{k=1, k \neq j}^{N_{II}} (1 + x_j) \frac{\omega_k(x_j - x_k)}{(1 + x_k)^2}.$$

Это выражение получается из (1.28) с помощью линейного отображения переменной  $x$  на отрезок  $[a^{II}, b^{II}]$ , взятия производной и использования обозначения:  $x = a^{II}$ . В итоге для вычисления производной  $u_x(x, y)$  на  $L$  вместо (2.54), (2.55) можно записать

$$\vartheta_{II} = U_{II}^T \mathbf{Q}_{II}, \quad (2.56)$$

$$\vartheta_{II \rightarrow I} = \Theta_{II} \vartheta_{II}, \quad (2.57)$$

где вектор  $\vartheta_{II}$  содержит значения производной  $u$  в узлах  $(\gamma, y_k^{II}) \in \Gamma_{II}$ , обозначенных овалами на рис. 2.11;  $M_{II} \times K_{II}$ -матрица  $\Theta_{II} = (\theta_{mk}^{II})$  состоит из элементов  $\theta_{mk}^{II} = J_k(\tilde{\chi}_m) / \mathfrak{D}_{K_{II}}(\tilde{\chi}_m)$  со значениями  $\tilde{\chi}_m \in [-1, 1]$  ( $m = \overline{1, M_{II}}$ ), которые могут быть вычислены по аналогии с  $\tilde{\eta}_m$ . В методе итераций по подобластям значения производных  $\vartheta_{II \rightarrow I}$  используются как граничные условия для постановки задачи в подобласти  $I$ .

Таким образом, на каждом шаге метода установления выполняются итерации по подобластям, граничные условия для каждой подобласти передаются из смежных подобластей, где они вычисляются по формулам (2.54)–(2.57). Для решения задачи в каждой подобласти применяется алгоритм, описанный в п. 2.1.1. В итоге, получаем

## Алгоритм решения краевых задач в областях сложных форм.

### Блок 1. Инициализация

а. Определяем параметры  $\tau$ ,  $k_1$ ,  $k_2$  метода установления и невязку установления  $\varepsilon_S$ .

б. Для каждой подобласти для реализации итераций определяем начальные значения решения  $U_s$  и всех его производных, присутствующих в задаче.

Здесь  $s$  означает номер подобласти,  $s = \overline{1, S}$ . В рамках тестов, описанных ниже, заданы нулевые начальные значения.

в. Для каждой подобласти задаём число узлов вдоль осей  $x$  и  $y$  (для числа узлов будем использовать обозначения  $N_s$  и  $K_s$  соответственно); определяем, если необходимо, аналитические отображения  $g_s(x)$  и  $h_s(y)$  с использованием информации об особенностях решения (отметим, что эти отображения могут быть адаптированы к особенностям в процессе счёта, см. п. 2.1.3); вычисляем координаты узлов  $(x_j^s, y_k^s)$ ,  $j = \overline{1, N_s}$ ,  $k = \overline{1, K_s}$ , являющиеся образами нулей полиномов Чебышёва под действием  $g_s(x)$  и  $h_s(y)$ ; составляем матрицы, аппроксимирующие операторы дифференцирования, и рассчитываем их спектральные разложения вида (1.49).

г. Для каждой границы между двумя смежными подобластями рассчитываем вектора  $Q_I$  и  $Q_{II}$  и матрицы  $\Theta_I$ ,  $\Theta_{II}$ , см. (2.54)–(2.57).

## Блок 2. Итерации по всем подобластям $s = \overline{1, S}$

а. Для  $s$ -й подобласти получаем от смежных подобластей значения решения или его производных на границе. Если часть границы подобласти совпадает с границей области задачи, то используем заданные граничные условия.

б. Рассчитываем матрицы  $H(U_s)$  и  $G(U_s)$  по формулам (2.14), (2.17).

в. Вычисляем решения  $\widehat{V}_s$  и матричного уравнения в (2.16) по формулам, приведённым в п. 2.1.1, находим  $\widehat{U}_s$ , используя (2.18), а также все производные решения, присутствующие в задаче, по формула вида (1.53).

г. Используя (2.54)–(2.57), вычисляем значение решения или его производных на границах подобласти, контактирующих со смежными подобластями, для решения краевых задач в них.

д. Если  $s = S$ , то переходим к блоку 3; иначе, переходим к следующей подобласти ( $s = s + 1$ ) и к пункту а) в блоке 2.

## Блок 3. Итерации метода установления

**Если** для всех  $s = \overline{1, S}$  имеем  $\|\widehat{U}_s - U_s\|/\tau \leq \varepsilon_S$ , то алгоритм останавливается и в качестве результата выдаются массивы  $\widehat{U}_s$  ( $s = \overline{1, S}$ ). Здесь, как и ранее,  $\|\widehat{U}\|$  обозначает максимальный по модулю элемент массива  $\widehat{U}$ .

**В противном случае**, для всех  $s = \overline{1, S}$  задаём  $U_s = \widehat{U}_s$  и переходим к пункту а) блока 2.

**Теорема 2.3.** Пусть область задачи допускает разбиение на  $S$  подобластей канонической формы, размерность задачи равна двум  $B$  каждой подобласти задана сетка из узлов  $(x_j^s, y_k^s)$ ,  $j = \overline{1, N_s}$ ,  $k = \overline{1, K_s}$ , где  $s$  – номер подобласти. Разработанный алгоритм при больших  $N_s, K_s$  требует порядка  $O(N_{it} \sum_{s=1}^S N_s K_s (N_s + K_s) + \sum_{s=1}^S (N_s^3 + K_s^3))$  операций и  $O(\sum_{s=1}^S (N_s K_s + K_s^2 + N_s^2))$  байт памяти,  $N_{it}$  – число итераций метода установления, которое требуется для нахождения решения с невязкой не более  $\varepsilon_S$  в каждой подобласти.

Теорема 2.3 доказывается по аналогии с теоремой 2.2, см. приложение II.

### 2.7.1. Численные эксперименты

**Тестовая 2D задача в области сложной формы с разрывом производной решения.** Рассмотрим двумерную краевую задачу в области  $D_E$ , представляющей собой сечение канала экструдера, (рис. 2.12, а). Положим

$$D_E = \{(x, y) : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 3\} \cup \{(x, y) : 1 \leq x \leq 2, 1 \leq y \leq 2\}.$$

В области  $D_E$  поставим краевую задачу для функции  $u(x, y)$ :

$$\Delta u = \{(x - 1)^2 (y - 1.5)^2\} \sqrt[5]{u}, \quad (2.58)$$

$$\begin{aligned} u|_{\Gamma_{in} \cup \Gamma_{out}} &= |y - 1.5|^{2.5}, & u|_{\Gamma_2 \cup \Gamma_5} &= 0, \\ u|_{\Gamma_1 \cup \Gamma_6} &= (1.5|x - 1|)^{2.5}, & u|_{\Gamma_3 \cup \Gamma_4} &= (0.5|x - 0.5|)^{2.5}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

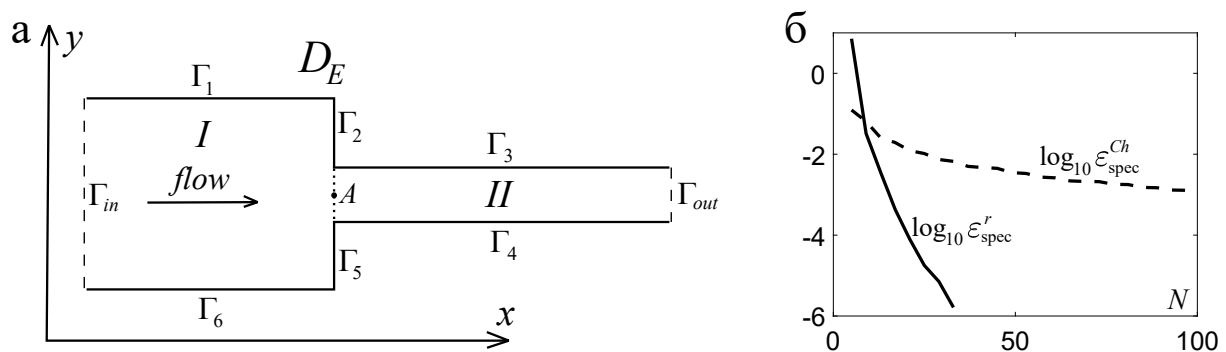
Точное решение задачи есть

$$u = u_{ex}(x, y) = (|(x - 1)(y - 1.5)|)^{2.5}, \quad (x, y) \in D_E.$$

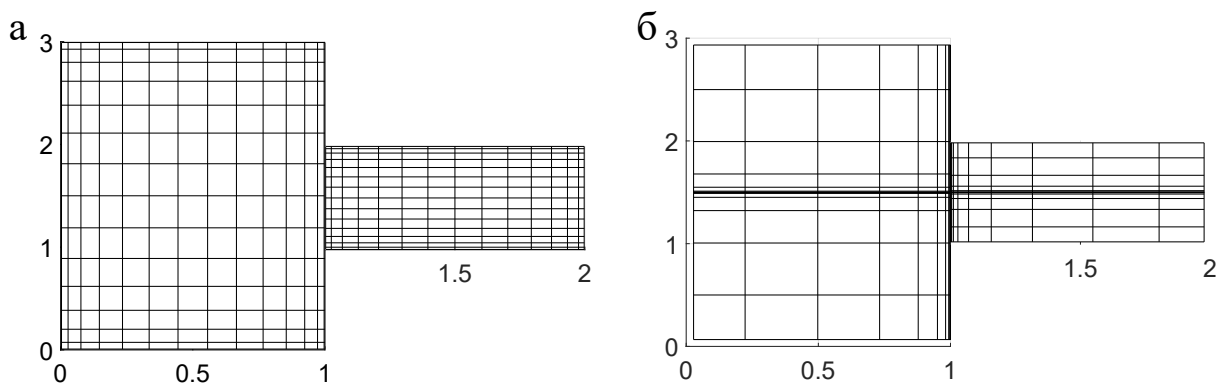
У него имеется особая точка  $A = (1, 1.5)$ , расположенная в центре отрезка, по которому стыкуются две подобласти  $D_E$  (см. рис. 2.12, а). В этой точке третьи производные решения терпят разрыв.

Применим разработанный алгоритм с узлами Чебышёва и со сгущёнными узлами для поиска приближённого решения  $u_{ap}(x, y)$  в области  $D_E$ . Пусть число узлов по направлениям  $x$  и  $y$  в обеих подобластях  $I$  и  $II$  совпадает ( $N = N_I = K_I = N_{II} = K_{II}$ ). Обозначим  $\epsilon_{\text{спес}} = \max_{j, k = \overline{1, N}}^{I, II} |u_{ex}(x_j, y_k) - u_{ap}(x_j, y_k)|$ . Здесь надпись « $I, II$ » над функцией « $\max$ » означает, что максимум берётся по значениям, лежащим в обеих подобластях.

На рис. 2.12, б показаны результаты экспериментов на сходимость. Здесь, как и в § 2.5, верхние индексы « $Ch$ » и « $r$ » соответствуют экспериментам, в которых использованы интерполяционные полиномы с узлами Чебышёва (1.3) и дробно-рациональные интерполяции (1.29). В последнем случае для адаптации алгоритма к особенности использовано отображение  $g(x)$  вида (1.30), при этом для сгущения узлов в подобластях  $I$  и  $II$  вдоль координаты  $x$  заданы значения параметра  $\delta = 1$  и  $\delta = -1$  соответственно. Для сгущения узлов по координате  $y$  в обеих подобластях мы взяли  $\delta = 0$ . Для всех используемых сгущений задано  $\varepsilon = 10^{-3}$ . На рис. 2.13 показано распределение узлов коллокаций в области  $D_E$  при отсутствии адаптации (а) и с адаптацией (б).



**Рис. 2.12.** Схематическое изображение экструдера – область задачи (а); зависимость  $\log_{10}$  погрешности от числа узлов коллокации  $N$  в каждой из подобластей  $I, II$  (б)



**Рис. 2.13.** Сетки из  $15 \times 15$  узлов, координаты которых рассчитаны с использованием узлов Чебышёва (а); с использованием (1.30) при  $\delta = \pm 1$ ,  $\varepsilon = 10^{-3}$  (б)

Одна из сложностей реализации расчётов в областях сложной формы, – выбор шага  $\tau$  метода установления. Сходимость итераций по подобластям реализуется при достаточно малых  $\tau$ , однако чрезмерное уменьшение  $\tau$  ведёт



к замедлению сходимости. В рассмотренной задаче  $\tau \approx 10^{-4}$ .

Отметим, что существует множество вариантов декомпозиции области  $D_E$  на прямоугольные подобласти. Рекомендации о выборе конкретного варианта, которые можно дать на основе вычислительных экспериментов, таковы.

1. В задачах, решения которых обладают высоким порядком гладкости, следует строить такую декомпозицию области, чтобы минимальная длина (для 2D задач) или площадь (для 3D задач) контакта между двумя смежными подобластями была максимальной. В таком случае сходимость итераций по подобластям существенно ускоряется.

2. В задачах, где гладкость решения ограничена, как в (2.58), (2.59), область следует разбивать так, чтобы точки разрыва производных попадали на границы подобластей. Если известен скачок решения или его производной, или задано условие на скачке, то это условие необходимо явно задавать при согласовании значений функции и её производной на границе между смежными подобластями

3. Декомпозиция области должна строиться с учётом рекомендаций 1, 2 так, чтобы число подобластей было минимальным.

Заметим также, что для согласования значений решения на границах подобластей мы передавали из одной подобласти в другую значение решения, а обратно – значения производной по нормали к границе. При этом в первой подобласти на общей границе ставится задача Неймана, а во второй – задача Дирихле. Однако в некоторых случаях сходимость итераций по подобластям ускоряется за счёт обмена линейными комбинациями решения и его производной по образцу МКНК, см. условия согласования локальных решений в п. 2.6.2. При этом в каждой из подобластей на общей границе ставится смешанная задача с соответствующими значениями коэффициентов. Вопрос о выборе этих значений является нетривиальным и существенно зависит от конкретной постановки (некоторые исследования, только для другого метода, проведены в [156, 239–241]). Во всех экспериментах, результаты которых приведены в диссертации, второй описанный метод согласования значений решения и его производных на границах между подобластями не давал существенных преимуществ над первым.

**Тестовая 3D задача в области сложной формы с экспоненциальным пиком решения.** Рассмотрим тестовую задачу в области, состоящей из двух подобластей:

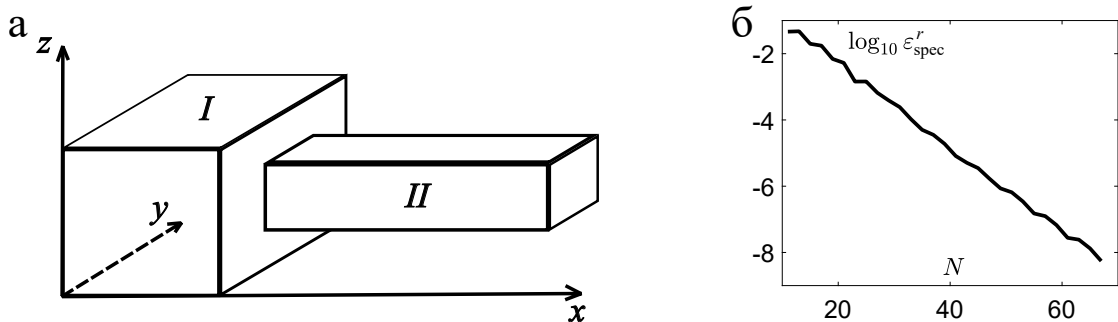
подобласть I  $\{(x, y, z) : 0 \leq x, y, z \leq 3\}$  и

подобласть II  $\{(x, y, z) : 3 \leq x \leq 7, 1 \leq y, z \leq 2\}$ , рис. 2.14, а.

Такая область может схематически представлять экструдер или дюзу печатающего устройства, в которой движется раствор либо расплав полимера. Описанный выше алгоритм был обобщён для решения пространственных задач. Протестируем его в задаче

$$\Delta u = \alpha \left[ (4\alpha^2(x-5)^2 - 2\alpha - 3\pi^2) f(x) - 3\pi^2 \right] \sin(\pi x) \sin(\pi y) \sin(\pi z) + 4\alpha^2(5-x)\pi f(x) \cos(\pi x) \sin(\pi y) \sin(\pi z), \quad u|_{\partial\Omega} = 0, \quad (2.60)$$

где  $f(x) = \exp[-\alpha(x-5)^2]$ ,  $\Delta u = u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}$ ,  $\Omega = I \cup II$ ,  $\partial\Omega$  — граница  $\Omega$ . Точное решение —  $u(x, y, z) = \alpha(f(x)+1) \sin(\pi x) \sin(\pi y) \sin(\pi z)$  имеет пиковый рост в окрестности пересечения плоскости  $x = 5$  и области II и осцилляции во всей области решения  $\Omega$ . Далее в экспериментах мы полагали  $\alpha = 100$ .



**Рис. 2.14.** Область тестовой задачи (а),  $\log_{10}$  относительной погрешности (б)

Для аппроксимации решения в области II использованы дробно-рациональные интерполяционные формулы со сгущением узлов в окрестности  $x = 5$ . При этом параметр плотности сгущения  $\varepsilon$  был задан равным 0.04, а число узлов по каждому направлению в каждой подобласти — равным  $N$ . На рис. 2.14, б приведена асимптотика относительной погрешности  $\varepsilon_{\text{спец}}^r$  численного решения в зависимости от  $N$ . Погрешность рассчитана как максимум отклонений точного и приближённого решений по узлам интерполяции, разделённый на максимальное значение решения.

В табл. 10 указано время выполнения программы и погрешности для различных  $N$ . Приведённые результаты демонстрируют высокую точность и скорость работы алгоритма в задачах с особенностями.

**Таблица 10.** Зависимость времени расчётов  $T$ (с) и погрешности  $\varepsilon_{\text{spec}}^r$  от  $N$

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

Подводя итог проведённым экспериментам, можно заключить, что разработанный метод решения задач в областях сложных форм является эффективным с точки зрения свойств, названных в § 0.3 введения как при ограниченной гладкости решения, так и при высокой гладкости и наличии особенностей. Применение созданных дробно-рациональных аппроксимаций позволяет значительно уменьшить затраты памяти и машинного времени, однако может потребовать достаточно тонкой настройки алгоритма под задачу.

## § 2.8. Некоторые замечания о реализации разработанных алгоритмов

НМБН реализован в виде одноимённого комплекса программ для ЭВМ на языке Java, который зарегистрирован в ФИПС [183]. Комплекс НМБН задуман как перспективный программный продукт, консолидирующий и воплощающий множество методов и алгоритмов, основанных на нелокальных приближениях функций интерполяционными полиномами и ДРБИ и нацеленных на поиск решений прикладных задач для ОДУ и УЧП с особенностями. Этот комплекс реализован соискателем с использованием современных подходов объектно-ориентированного анализа, проектирования и программирования [242]. В его основе лежат принципы абстрагирования, иерархии, модульности и расширяемости. Отметим далее основные возможности НМБН.

1. Автоматическая генерация матриц, аппроксимирующих производные различных порядков и их спектральных разложений с возможностью сохранения всех матриц в базе данных.
2. Способность использовать различные виды интерполяций из § 1.1.

3. Автоматическая генерация аппроксимирующих уравнений и их решение в одно-, дву- и трёхмерных случаях.
4. Оптимизация кода с использованием концепции Listener и паттернов проектирования (см. [243]) с целью его структурирования и ускорения вычислительного процесса.
5. Интерактивный контроль итерационных процессов с возможностью изменения любого параметра и способа интерполяции на любой итерации. Решение многих нелинейных задач удаётся получить исключительно благодаря данной опции.
6. Ускорение итерационных процессов с использованием подпространств Крылова [239].
7. Проведение вычислений в параллельном режиме с использованием библиотеки Parallel Colt <sup>3</sup>.

По поводу п. 7 отметим, что наибольшее ускорение достигается при вычислении правой части регуляризованных уравнений (2.9), (2.10) в параллельном режиме, когда операции  $\delta$ -произведений массивов (см. определение 1.1) распределяются между процессорами. Отметим, однако, что при решении трёхмерных уравнений с правой частью простого вида, но с высоким разрешением ( $512^3$  узлов и выше) в системах с распределённой памятью возникает другая, более фундаментальная проблема, связанная с хранением массива решения и с быстрым доступом к его различным слоям (понятие слоя введено в [172]). Эта проблема является общей для псевдоспектральных методов. Для её решения существуют специальные подходы, реализованные, например, в библиотеке FFTW (Fastest Fourier Transform in the West) [244, ch. 2], [245]. Эффективные алгоритмы работы с большими массивами, используемые корпорацией Google для развития ML технологий, реализованы в библиотеке TensorFlow <sup>4</sup>, которая тоже может быть интегрирована в НМБН.

Отметим, что упоминание библиотеки FFTW здесь связано с аналогией между НМБН и стандартным псевдоспектральным алгоритмом, основанным

---

<sup>3</sup><https://sourceforge.net/projects/parallelcolt/>.

<sup>4</sup><https://www.tensorflow.org>

на прямых и обратных преобразованиях Фурье. Аналогами этих преобразований в НМБН служат операции  $\delta$ -произведений массивов решения и матриц  $R_A$ ,  $R_A^{-1}$  из спектральных разложений (1.49). 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).

Отметим также, что в большинстве приложений НМБН позволяет уйти от необходимости работать с большими массивами за счёт адаптации к запасу гладкости и особенностям искомого решения. Для большей эффективности НМБН был сопряжен со схемой переменных направлений [246, гл. XI, § 2], что с применением метода из п. 2.1.3 и отображений вида (2.32) позволяет адаптировать алгоритм к градиентам решений, расположенным на линиях (гиперповерхностях) сложных структур, лежащих внутри области задачи. За счёт такой адаптации происходит существенное уменьшение числа узлов по каждому направлению при сохранении требуемой точности. Однако эти результаты лежат за рамками диссертационной работы.

Применение оценок погрешностей, описанных в § 2.4 и в приложении из [177] для решения прикладной задачи о течении полимерной жидкости, реализовано соискателем и его ученицей, Е.А. Кругловой, на языке Matlab в виде комплекса программ [184]. Комплекс предназначен для расчета скорости неизотермического течения полимерной жидкости между двумя соосными цилиндрами (в канале 3D принтера с тонким нагревательным элементом). Рассчитываются осесимметричные течения пуазейлевского типа. Пользователь задает параметры физического процесса и радиус нагревательного элемента. На выходе пользователь получает графики компонент погрешности численного решения, значения скорости течения жидкости в любой точке канала, график профиля скорости течения, значение расхода жидкости.

НМБН использован для решения четырёхволновых КУ в задачах волновой турбулентности. Для этого на языке Matlab реализован комплекс программ [185], который далее использован для расчёта спектров волнового действия в гамильтоновых нелинейных физических системах в случае однородного изотропного волнового взаимодействия, при наличии НД энергии. В частности, все результаты соискателя, описанные в гл. 4, получены с применением

[185]. Пользователь задаёт ядро интеграла столкновений, стоящего в правой части КУ (оно описывает конкретное приложение), параметры накачки и диссипации в частотном пространстве, параметры дискретизации по частотной и временной переменным. Программа выдаёт значения спектра волнового действия в узлах сетки по частотной и временной переменным и строит соответствующие графики в логарифмической шкале.

**Основные результаты главы 2** состоят в следующем.

1. Разработан, обоснован и реализован метод решения краевых и начально-краевых задач с особенностями для нелинейных ОДУ и УЧП эллиптического и параболического типов в приложениях произвольной размерности, а также задач Коши для КУ. Предложен подход к апостериорному анализу погрешностей. Реализовано обобщение алгоритмов для решения задач в областях сложной геометрии.
2. При решении нелинейных тестовых задач показаны: а) отсутствие насыщения созданных алгоритмов; б) существенное увеличение скорости сходимости при использовании ДРБИ в задачах с особенностями; в) значительные преимущества алгоритмов над методами конечных элементов и коллокаций и наименьших квадратов по точности и скорости работы.

## Глава 3

# Моделирование пуазейлевских течений полимерной жидкости

Высокая значимость разработки математических моделей течения растворов и расплавов полимерных материалов для современных технологий отмечена в § 0.1 введения. Подчеркнём, что такие модели должны адекватно отражать анизотропию и нелинейные эффекты, возникающие в течениях, а также разномасштабность макроскопической и микроструктурной динамики. Учёт указанных эффектов приводит к целому комплексу особенностей (они отмечены в § 0.2 введения), усложняющих процесс поиска и анализа приближённых решений уравнений модели. С помощью подходов, описанных в гл. 1, 2, удалось реализовать быстрые алгоритмы поиска решений, учитывающие эти особенности для получения достоверного численного ответа.

Ниже представлена обобщённая реологическая мезоскопическая модель, позволяющая воспроизводить основные свойства течений несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости, а также температурные и магнитные воздействия, возникающие в приложениях. Далее проведены детальный анализ и численное моделирование течений полимерной жидкости, схожих по своим качественным свойствам с течениями Пуазейля для классической жидкости. Полученные результаты выявляют нетривиальные закономерности в таких течениях, а также содержат информацию об управлении течениями в технологиях печати, экструзии, напыления и в др. Более того, разработанная модель позволила впервые дать содержательное математическое описание процесса разрушения осесимметричных ламинарных течений, приводящего к ламинарно-турбулентному переходу.

### § 3.1. Обобщённая мезоскопическая модель

На основе реологических соотношений (0.6), (0.7), а также с применением уравнений из монографий [35, 36, 53, 205, 247, 248] и статей [179, 249], сформулируем *обобщённую мезоскопическую модель*, которая описывает неизотерми-

ческие магнитогидродинамические, МГД, течения несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости. Эти уравнения, записанные в безразмерной форме в прямоугольной декартовой системе координат  $(x, y, z)$ , имеют вид

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{H} = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} + \nabla \left( P + \frac{\sigma_m \|\mathbf{H}^2\|}{2} \right) = \frac{1}{\operatorname{Re}} \operatorname{div}(Y\Pi) + \sigma_m (\mathbf{H}, \nabla) \mathbf{H} + (\operatorname{Fr}^{-2} - \operatorname{Ga}(Y-1)) \mathbf{e}_g, \quad (3.2)$$

$$\frac{da_{ij}}{dt} - \sum_{l=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_l} a_{lj} - \sum_{l=1}^3 \frac{\partial u_j}{\partial x_l} a_{li} - \frac{1}{W} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \mathfrak{L}_{ij} = 0, \quad i = \overline{1,3}, \quad j = \overline{1,i}, \quad (3.3)$$

$$\frac{d\mathbf{H}}{dt} = (\mathbf{H}, \nabla) \mathbf{u} + b_m \Delta_{x,y,z} \mathbf{H}, \quad (3.4)$$

$$\frac{dY}{dt} = \frac{1}{\operatorname{Pr}} \left( \Delta_{x,y,z} Y + A_T Y \Phi + A_m \Phi_m \right). \quad (3.5)$$

Здесь  $t$  – время,  $P$  – давление;

$\mathbf{u} = (u, v, w)^T$  – вектор скорости точек жидкости;

$\mathbf{H} = (L, M, N)^T$  – вектор напряжённости магнитного поля;

$\Pi = (a_{ij})$  – симметрический тензор анизотропии второго ранга, его размерные компоненты определены во введении при записи уравнения (0.7);

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

в уравнении (3.2)  $\operatorname{div}(Y\Pi) = (\operatorname{div}(Y\mathbf{a}_1), \operatorname{div}(Y\mathbf{a}_2), \operatorname{div}(Y\mathbf{a}_3))^T$  – вектор,  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  – вектор-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 (3.3)  $\mathfrak{L}_{ij} = (K_I a_{ij} + \beta(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j))/\bar{\tau}_0(Y)$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ ;

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

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

$k, \beta$  ( $0 \leq \beta \leq 1$ ) – феноменологические параметры модели, характеризующие вклады, связанные с анизотропией (величина  $\beta$  учитывает ориентацию макромолекулярного клубка, число  $k$  – его размеры, см. § 0.1);

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



$Re = \rho u_H l / \eta_0^*$  – число Рейнольдса,  $\rho (= \text{const})$  – плотность среды;  
 $W = \tau_0^* u_H / l$  – число Вайсенберга;  
 $\eta_0^*, \tau_0^*$  – начальные значения сдвиговой вязкости и времени релаксации при  $T = T_0$  (см. [36, 46]);  
 $\Delta_{x,y,z} = \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \Delta_{y,z} \right)$  – оператор Лапласа,  
 в уравнении (3.4)  $\Delta_{x,y,z} \mathbf{H} = (\Delta_{x,y,z} L, \Delta_{x,y,z} M, \Delta_{x,y,z} N)^T$ ;  
 в уравнении (3.5)  $\Phi, \Phi_m$  – диссипативные функции (см. замечание 3.2);  
 постоянные  $Ra$  (число Релея),  $Pr$  (число Прандтля),  $Ga = Ra/Pr$  (число Грасгофа),  $Fr$  (число Фруда),  $E_A$  (энергия активации) описаны в [36, 247], см. приложение IV,  $\mathbf{e}_g$  – единичный вектор, задающий направление силы тяжести (далее зададим его параллельным оси  $x$  и противоположно направленным ей, см. рис. 3.1 и замечание 3.3),  $A_T, A_m$  – коэффициенты диссипации уравнения теплопроводности (3.5);

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

$b_m = 1/Re_m, Re_m = \sigma_e \mu_0 u_H l$  – магнитное число Рейнольдса,

$\mu_0$  – магнитная проницаемость вакуума,  $\sigma_e$  – электропроводность среды.

Система (3.1)–(3.5) 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. По поводу безразмерной формы записи см. также [249].

**Замечание 3.1.** Магнитогидродинамические уравнения (3.1)–(3.5) выведены с привлечением системы уравнений Максвелла (см. [53, 205]), причём вектор магнитной индукции  $\mathbf{B}$  берётся в виде  $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$ . На самом деле справедлива более общая формула (см. [250, 251]):  $\mathbf{B} = \mu \mu_0 \mathbf{H} = (1 + \chi) \mu_0 \mathbf{H}$ , где  $\mu$  – магнитная проницаемость,  $\chi$  – магнитная восприимчивость, причём  $\chi = \chi_0/Y$ ,  $\chi_0$  – магнитная восприимчивость при  $T = T_0 (= 293.15 \text{ K})$ .

**Замечание 3.2.** Следуя [52], в уравнении (3.5) возьмём диссипативные функции  $\Phi, \Phi_m$  в виде

$$\begin{aligned}\Phi = \Pi : \nabla \mathbf{u} &= \sum_{i,j=1}^3 a_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = a_{11} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) a_{12} + \\ &+ \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) a_{13} + a_{22} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \left( \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) a_{23} + a_{33} \frac{\partial u_3}{\partial x_3},\end{aligned}\quad (3.6)$$

$$\begin{aligned}\Phi_m = \sigma_m \Pi_m : \nabla \mathbf{u} &= \sigma_m \sum_{i,j=1}^3 L_i L_j \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = \sigma_m \left\{ L_1^2 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) L_1 L_2 + \right. \\ &+ \left. \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) L_1 L_3 + L_2^2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \left( \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) L_2 L_3 + L_3^2 \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right\}.\end{aligned}\quad (3.7)$$

Здесь  $u_1(= u)$ ,  $u_2(= v)$ ,  $u_3(= w)$  и  $L_1(= L)$ ,  $L_2(= M)$ ,  $L_3(= N)$  – компоненты вектора скорости  $\mathbf{u}$  и напряжённости магнитного поля  $\mathbf{H}$  в декартовой системе координат  $x_1(= x)$ ,  $x_2(= y)$ ,  $x_3(= z)$ ;  $\Pi_m = (L_i L_j)$ ,  $i, j = \overline{1, 3}$ .

**Замечание 3.3.** На рис. 3.1  $\mathbf{g} = g_a \mathbf{e}_g$ ,  $\mathbf{e}_g = (1, 0, 0)^T$ , где  $g_a$  – ускорение свободного падения, входящее в определение Ra.

Отметим, что реологические соотношения (3.3) имеют определённую аналогию с уравнениями модели Oldroyd-B [252], описывающей динамику вязкоупругих растворов полимеров. Для демонстрации этого факта, введём переменные  $\alpha_{ij} = \frac{a_{ij}}{\text{Re}}$  и симметрический тензор  $\Psi = (\alpha_{ij})$ . Тогда соотношения (3.3) в изотермическом случае ( $Y \equiv 1$ ) могут быть записаны в виде

$$\frac{1}{W} \Psi + \overset{\nabla}{\Psi} = \frac{2}{W \text{Re}} D - \left( \text{Re} \frac{k - \beta}{3} (\text{tr } \Psi) \Psi + \beta \text{Re } \Psi^2 \right), \quad (3.8)$$

где  $D = (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)/2$  – тензор скоростей деформации,  $\Psi^2$  вычисляется по правилу возведения матрицы в квадрат,

$$\overset{\nabla}{\Psi} = \frac{d}{dt} \Psi - \left[ (\nabla \mathbf{u})^T \Psi + \Psi (\nabla \mathbf{u}) \right]$$

есть так называемая верхняя конвективная производная по времени от тензора  $\Psi$ , причём каждое слагаемое в квадратных скобках вычисляется по формулам умножения матрицы на матрицу.

Реологические соотношения Oldroyd-B в приведённых обозначениях имеют вид

$$\frac{1}{W} \Psi + \overset{\nabla}{\Pi} = \frac{2}{W \text{Re}} \text{D} + \frac{2}{\text{Re}_s} \overset{\nabla}{\text{D}}, \quad (3.9)$$

где  $\text{Re}_s = \rho u_H l / \eta_s$ ,  $\eta_s$  – вязкость растворителя. Отметим, что для получения (3.9) из исходных соотношений Oldroyd-B помимо перехода к безразмерным переменным, описанного выше, использовано представление  $\Psi = (\tau_0^* / 3\eta_0^*) \mathbf{T}$ , где  $\mathbf{T}$  – тензор напряжений Коши.

Сопоставляя соотношения (3.8) и (3.9), несложно видеть, что в изотермическом случае предложенная модель и модель Oldroyd-B совпадают, если в первой положить  $k = 0$ ,  $\beta = 0$ , а во второй пренебречь вязкостью растворителя:  $\eta_s = 0$ , что соответствует верхнеконвективной модели Максвелла. Это наблюдение полностью соответствует идеологии мезоскопических моделей, в которых движение полимерных макромолекул в растворителе заменяется членом, описывающим анизотропное сопротивление среды с учётом размера и ориентации макромолекул, см. по этому поводу § 0.1. В уравнении (3.8) этот член, описывающий анизотропию, приведён в больших круглых скобках.

Заметим, что при записи уравнений (3.2), (3.3) на основе соотношений (0.6), (0.7) учтена зависимость сдвиговой вязкости и времени релаксации полимерных молекул от температуры. Действительно, процесс упругой деформации полимерных молекул, а значит, и вся динамика полимерной жидкости существенно зависят от температуры. В рамках мезоскопических моделей упругость полимерной молекулы пропорциональна температуре. Соотношение между начальной сдвиговой вязкостью  $\eta_0$  и временем релаксации  $\tau_0$  также содержит температуру:

$$\eta_0 \sim \nu K_B T \tau_0,$$

где  $\nu$  – количество молекул в объёме жидкости,  $K_B$  – постоянная Больцмана. Такое соотношение и его соответствие результатам измерений подробно обсуждаются в [46]. Для описания зависимости вязкости от температуры мы пользуемся законом Аррениуса:

$$\eta_0(T) = \eta_0^* \exp(E_A(1/T - 1/T_0)), \quad \eta_0^* = \eta_0(T_0).$$

Приведённые соотношения позволяют моделировать зависимость упругого ответа макромолекул на температурные воздействия. Однако имеет место и

обратная связь: конфигурация макромолекул влияет на поток жидкости, а значит, диссипацию кинетической энергии и на температуру. В связи с этим особого внимания требует анализ диссипативного члена в уравнении теплопроводности (3.5) и термодинамической согласованности модели. Под термодинамически согласованной мы понимаем модель, учитывающую как термодинамический, так и упругий вклад в общее количество внутренней энергии жидкости, а также обеспечивающую согласование процессов эволюции энергии и упругих деформаций макромолекул. Строгий анализ моделей типа Максвелла и Олдройда, отвечающих требованию термодинамической согласованности, дан в [253]. Некоторые базовые принципы и обобщения таких моделей описаны в [254, 255]. Отметим, что предложенная модель, использующая соотношение (3.6), и модель из [253] совпадают, если в первой положить  $k = \beta = 0$ , а во второй не учитывать вязкость растворителя и задать параметр упругости макромолекул пропорциональным температуре.

В приложении IV проведена идентификация параметров предложенной модели по экспериментальным данным, взятым из источников литературы.

### 3.1.1. Постановка задачи о течении типа Пуазейля

Пусть полимерная жидкость течёт в канале  $\Omega$  с прямоугольным поперечным сечением, лежащим в плоскости  $(y, z)$  (рис. 3.1):

$$\Omega = \{(y, z) : -1 \leq y \leq 1, -r \leq z \leq r\}.$$

В канале вдоль оси  $x$  действует перепад давления  $\Delta P(t)$ . Будем искать *частное решение* исходной системы (3.1)–(3.5) следующего вида:

$$\begin{cases} v = w \equiv 0, & u = u(t, y, z), \\ P = \mathcal{P}(t, y, z) - P_d(t)x, & Y = Y(t, y, z), \\ a_{ij} = a_{ij}(t, y, z), & i = \overline{1, 3}, j = \overline{1, i}. \end{cases} \quad (3.10)$$

Величина  $P_d(t) = \frac{\Delta P(t)}{\rho u_H^2 h}$  есть безразмерный перепад давления на отрезке по  $x$  длины  $h$  (градиент давления),  $\mathcal{P}(t, y, z)$  – компонента давления, зависящая только от времени и от координаты точки сечения. Кроме того, будем считать, что  $M = N = 0$ ,  $L = L(t, y, z)$ . Такая ситуация реализуется при обмотке

канала электрическим проводом или при погружении его в катушку. Следуя [176], для такой постановки получаем  $\Phi = u_y a_{12} + u_z a_{13}$ .

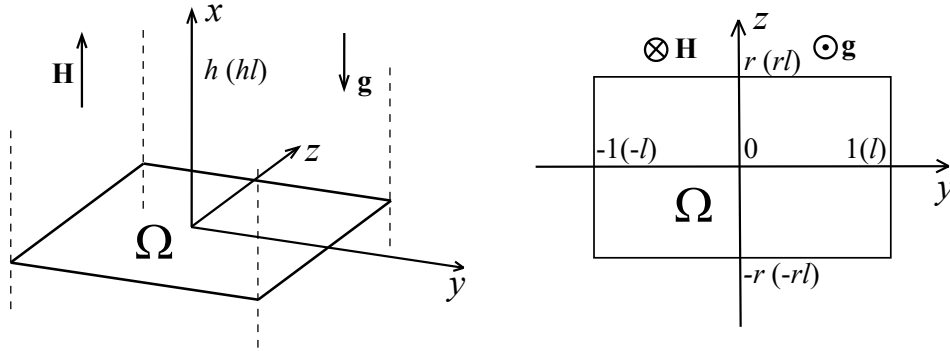


Рис. 3.1. Канал с прямоугольным сечением

Обозначим  $\alpha_{ij} = a_{ij}/\text{Re}$ ,  $i, j = \overline{1, 3}$ ,  $\alpha_i = \alpha_{ii} + 1/(\text{WRe})$ ,  $\tilde{K}_I = K_I + \beta \text{Re} I$ .

Тогда с учётом (3.10) запишем систему (3.2), (3.3) в виде

$$\begin{cases} u_t - (Y\alpha_{12})_y - (Y\alpha_{13})_z = P_d(t) + (\text{Ga}(Y-1) - \text{Fr}^{-2}), \\ (\alpha_{12})_t - \alpha_2 u_y - \alpha_{23} u_z + (\tilde{K}_I \alpha_{12} + \beta \text{Re}(\alpha_{13} \alpha_{23} - \alpha_{12} \alpha_{33}))/\bar{\tau}_0(Y) = 0, \\ (\alpha_{13})_t - \alpha_{23} u_y - \alpha_3 u_z + (\tilde{K}_I \alpha_{13} + \beta \text{Re}(\alpha_{12} \alpha_{23} - \alpha_{13} \alpha_{22}))/\bar{\tau}_0(Y) = 0, \end{cases} \quad (3.11)$$

$$\begin{cases} (\alpha_{11})_t - 2(\alpha_{12} u_y + \alpha_{13} u_z) + (K_I \alpha_{11} + \beta \text{Re}(\alpha_{11}^2 + \alpha_{12}^2 + \alpha_{13}^2))/\bar{\tau}_0(Y) = 0, \\ (\alpha_{22})_t + (\tilde{K}_I \alpha_{22} + \beta \text{Re}(\alpha_{12}^2 - \alpha_{11} \alpha_{22} + \alpha_{23}^2 - \alpha_{22} \alpha_{33}))/\bar{\tau}_0(Y) = 0, \\ (\alpha_{33})_t + (\tilde{K}_I \alpha_{33} + \beta \text{Re}(\alpha_{13}^2 - \alpha_{11} \alpha_{33} + \alpha_{23}^2 - \alpha_{22} \alpha_{33}))/\bar{\tau}_0(Y) = 0, \\ (\alpha_{23})_t + (\tilde{K}_I \alpha_{23} + \beta \text{Re}(\alpha_{12} \alpha_{13} - \alpha_{11} \alpha_{23}))/\bar{\tau}_0(Y) = 0. \end{cases} \quad (3.12)$$

Далее в первом уравнении (3.11) будем полагать  $\text{Ga}(Y-1) \gg \text{Fr}^{-2}$  (см. данные в табл. 36) и исключим слагаемое  $\text{Fr}^{-2}$ . Для определения давления получаем следующие выражения:

$$\mathcal{P}_y = (Y\alpha_{22})_y + (Y\alpha_{23})_z - \sigma_m L L_y, \quad \mathcal{P}_z = (Y\alpha_{23})_y + (Y\alpha_{33})_z - \sigma_m L L_z. \quad (3.13)$$

Для определения температуры и компоненты напряжённости магнитного поля получаем уравнения

$$dY/dt = (\Delta_{y,z} Y + A_T Y (u_y a_{12} + u_z a_{13}))/\text{Pr}, \quad dL/dt = b_m \Delta_{y,z} L. \quad (3.14)$$

Умножим второе и третье уравнения (3.11) на  $Y$ , добавим и вычтем из второго уравнения выражение  $Y_t\alpha_{12}$ , а из третьего уравнения  $Y_t\alpha_{13}$ . Выражения, полученные таким образом из второго и третьего уравнений (3.11), продифференцируем по  $y$  и по  $z$  соответственно и сложим с производной первого уравнения по  $t$ . В итоге придём к уравнению 2-го порядка для  $u(t, y, z)$ :

$$u_{tt} - Y\tilde{\Delta}u - \tilde{A}u_y - \tilde{B}u_z + \frac{Y}{\bar{\tau}_0(Y)} \left( \tilde{K}_I[u_t - P_d(t) - \text{Ga}(Y-1)] + F \right) + \quad (3.15)$$

$$+G = P'_d(t) + \text{Ga}Y_t,$$

где 
$$\tilde{\Delta}u = \alpha_2 u_{yy} + 2\alpha_{23} u_{yz} + \alpha_3 u_{zz},$$

$$\tilde{A} = \tilde{A}(t, y, z) = (Y\alpha_2)_y + (Y\alpha_{23})_z, \quad \tilde{B} = \tilde{B}(t, y, z) = (Y\alpha_{23})_y + (Y\alpha_3)_z,$$

$$F = F(t, y, z) = (\tilde{K}_I)_y \alpha_{12} + (\tilde{K}_I)_z \alpha_{13} + \beta \text{Re}[(l_{22})_z + (l_{33})_y],$$

$$G = G(t, x, y) = \left( \frac{Y}{\bar{\tau}_0(Y)} \right)_y (\tilde{K}_I \alpha_{12} + \beta \text{Re} l_{33}) + \left( \frac{Y}{\bar{\tau}_0(Y)} \right)_z (\tilde{K}_I \alpha_{13} + \beta \text{Re} l_{22}) -$$

$$-(Y_t \alpha_{12})_y - (Y_t \alpha_{13})_z,$$

$$l_{22} = \alpha_{12}\alpha_{23} - \alpha_{13}\alpha_{22}, \quad l_{33} = \alpha_{13}\alpha_{23} - \alpha_{12}\alpha_{33}.$$

Дополним (3.11)–(3.15) краевыми условиями и начальными данными, соответствующими задаче о течении типа Пуазейля в канале с прямоугольным поперечным сечением  $\Omega$ , см. рис. 3.1. Будем исходить из условия прилипания жидкости на стенках. Смоделируем ситуацию, когда температура задаётся только на стенках  $z = \pm r$ . Тогда получим краевые условия

$$u(t, \pm 1, z) = 0, \quad Y_y(t, \pm 1, z) = 0, \quad L(t, \pm 1, z) = \hat{L}_{\pm}(t, z), \quad z \in [-r, r], \quad t > 0,$$

$$u(t, y, \pm r) = 0, \quad Y(t, y, \pm r) = Y_{\pm}(t, y), \quad L(t, y, \pm r) = \tilde{L}_{\pm}(t, y),$$

$$y \in [-1, 1], \quad t > 0.$$

Здесь функции  $Y_{\pm}(t, y)$  задают распределения температуры верхней и нижней стенок канала в зависимости от времени,  $\hat{L}_{\pm}(t, z)$  и  $\tilde{L}_{\pm}(t, y)$  – значения компоненты напряжённости магнитного поля на стенках. Будем считать, что в начальный момент времени жидкость покоится, и положим

$$u(0, y, z) = 0, \quad Y(0, y, z) = 1, \quad L(0, y, z) = 0, \quad \alpha_{ij}(0, y, z) = 0, \quad (y, z) \in \Omega. \quad (3.16)$$

## § 3.2. Стационарные течения типа Пуазейля

В системе уравнений (3.11)–(3.14) вернёмся к переменным  $a_{ij}$  и будем полагать неизвестные функции независимыми от  $t$ . Тогда для функций  $u(y, z)$ ,  $\mathcal{P}(y, z)$ ,  $a_{ij}(y, z)$ ,  $Y(y, z)$  и  $L(y, z)$  получим следующие соотношения:

$$(Ya_{12})_y + (Ya_{13})_z = -D, \quad D = \text{Re}P_d + \text{Ga}(Y - 1), \quad (3.17)$$

$$K_I a_{11} + \beta \|\mathbf{a}_1\|^2 = 2\bar{\tau}_0(Y)(a_{12}u_y + a_{13}u_z), \quad (3.18)$$

$$K_I a_{22} + \beta \|\mathbf{a}_2\|^2 = 0, \quad K_I a_{33} + \beta \|\mathbf{a}_3\|^2 = 0, \quad (3.19)$$

$$K_I a_{12} + \beta(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) = \bar{\tau}_0(Y)(A_2 u_y + a_{23} u_z), \quad (3.20)$$

$$K_I a_{13} + \beta(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_3) = \bar{\tau}_0(Y)(A_3 u_z + a_{23} u_y), \quad (3.21)$$

$$K_I a_{23} + \beta(\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) = 0, \quad (3.22)$$

$$\mathcal{P}_y = [(Ya_{22})_y + (Ya_{23})_z]/\text{Re} - \sigma_m L L_y, \quad (3.23)$$

$$\mathcal{P}_z = [(Ya_{23})_y + (Ya_{33})_z]/\text{Re} - \sigma_m L L_z,$$

$$\Delta_{y,z} Y + A_T Y (u_y a_{12} + u_z a_{13}) = 0, \quad (3.24)$$

$$\Delta_{y,z} L = 0. \quad (3.25)$$

Здесь  $A_i = W^{-1} + a_{ii}$ ,  $i = 2, 3$ . Обращаем также внимание, что в такой постановке в соответствии с (3.7)  $\Phi_m = 0$ .

### 3.2.1. Разрешающая система уравнений

Далее получим разрешающую систему квазилинейных уравнений для компоненты вектора скорости  $u(y, z)$  и температуры  $Y(y, z)$ . В [179] были выведены следующие соотношения на компоненты тензора анизотропии:

$$a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22} = 0, \quad a_{13}a_{23} - a_{12}a_{33} = 0, \quad a_{23}^2 - a_{22}a_{33} = 0. \quad (3.26)$$

С учётом (3.26) перепишем (3.20), (3.21) так:

$$\tilde{K}_I a_{12} = \bar{\tau}_0(A_2 u_y + a_{23} u_z), \quad \tilde{K}_I a_{13} = \bar{\tau}_0(A_3 u_z + a_{23} u_y),$$

откуда можно выразить

$$u_y = \mathcal{K}Y a_{12}, \quad u_z = \mathcal{K}Y a_{13}. \quad (3.27)$$

Здесь  $\tilde{K}_I = K_I + \beta I$ ,  $\mathcal{K} = \frac{W\tilde{K}_I}{J(1+W\sigma)}$ ,  $\sigma = a_{22} + a_{33}$ ,  $I = a_{11} + \sigma$ .

Из уравнения (3.22) с учётом (3.26) получаем

$$a_{23} = -\frac{\beta a_{12} a_{13}}{K_I + \beta \sigma}. \quad (3.28)$$

Складывая первое и второе уравнения (3.19) и учитывая (3.26), будем иметь

$$K_I \sigma + \beta(\sigma^2 + \mu^2) = 0, \quad \mu^2 = a_{12}^2 + a_{13}^2. \quad (3.29)$$

Из (3.28), (3.29) следует, что  $a_{23} = \sigma \frac{a_{12} a_{13}}{\mu^2}$ . Поскольку  $a_{22} a_{33} = a_{23}^2$  (см. последнее равенство (3.26)) и  $a_{22} + a_{33} = \sigma$ , то

$$a_{22} = \sigma \frac{a_{12}^2}{\mu^2}, \quad a_{33} = \sigma \frac{a_{13}^2}{\mu^2}.$$

Вычитая из (3.18) соотношения (3.29) и полагая  $\tilde{K}_I \neq 0$ , имеем

$$a_{11} = \sigma + \frac{2W\mu^2}{1+W\sigma}, \quad I = 2\left(\sigma + \frac{W\mu^2}{1+W\sigma}\right). \quad (3.30)$$

Наконец, используя соотношения (3.27) и выражения для  $\bar{\tau}_0$ , приходим к нелинейному уравнению для определения  $\mu$ :

$$\tilde{\mathcal{K}}(\mu^2)\mu = \Lambda := \bar{\tau}_0 \lambda, \quad (3.31)$$

где  $\lambda^2 = u_y^2 + u_z^2$ ,  $\tilde{\mathcal{K}}(\mu^2) = \mathcal{K}(\mu^2)J = \frac{W\tilde{K}_I(\mu^2)}{1+W\sigma(\mu^2)}$ . Таким образом, для определения  $\mu$  необходимо прежде всего найти решения  $\sigma(\mu^2)$  первого из уравнений (3.29), которое является нелинейным. Исследование этих решений приведём ниже, но прежде сформулируем краевую задачу для поиска скорости течения  $u$  в канале с прямоугольным сечением (см. рис. 3.1).

С учётом (3.27) из (3.17) следует

$$\left(\frac{Ju_y}{\tilde{\mathcal{K}}}\right)_y + \left(\frac{Ju_z}{\tilde{\mathcal{K}}}\right)_z = -D. \quad (3.32)$$

Соотношение (3.31) определяет зависимость  $\mu = \mu(\Lambda)$ . Следовательно, переписывая уравнение (3.32) по аналогии с [179], сформулируем краевую задачу для компоненты вектора скорости  $u(y, z)$ :



$$\hat{a}u_{yy} - 2\hat{b}u_{yz} + \hat{c}u_{zz} + \hat{d}u_y + \hat{e}u_z = -D\tilde{\mathcal{K}}, \quad u = 0 \text{ при } (y, z) \in \partial\Omega, \quad (3.33)$$

где  $\hat{a} = 1 - u_y^2 \mathcal{L}$ ,  $\hat{c} = 1 - u_z^2 \mathcal{L}$ ,  $b = u_y u_z \mathcal{L}$ ,

$$\hat{d} = (1 - \bar{\gamma}) \frac{Y_y}{Y} - \bar{\gamma} \bar{E}_A \frac{Y_y}{Y^2}, \quad \hat{e} = (1 - \bar{\gamma}) \frac{Y_z}{Y} - \bar{\gamma} \bar{E}_A \frac{Y_z}{Y^2}, \quad \mathcal{L} = \frac{1 - \bar{\gamma}}{\lambda^2}, \quad \bar{\gamma} = \frac{\Lambda}{\mu} \mu_\Lambda.$$

Дифференцируя (3.31) по  $\Lambda$ , используя (3.30) и выражения для  $\mathcal{K}$ , находим

$$\mu_\Lambda = \frac{1}{4\tilde{\mathcal{K}}_\mu \mu^2 + \tilde{\mathcal{K}}}, \quad \tilde{\mathcal{K}} = \frac{1 + W\sigma + 2W(\bar{k}/3 + \beta)(\sigma(1 + W\sigma) + W\mu^2)}{(1 + W\sigma)^2},$$

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu = \frac{W\sigma_\mu}{(1 + W\sigma)^2} [2(\bar{k}/3 + \beta) - 1] + \frac{4W^2\mu}{(1 + W\sigma)^3} (\bar{k}/3 + \beta) [W\sigma - W\mu\sigma_\mu + 1].$$

Здесь функция  $\sigma = \sigma(\mu^2)$  может иметь три ветви (конкретные выражения приведены ниже). Подставляя выражения этих ветвей в уравнение (3.31), можно составить громоздкое нелинейное уравнение для записи функции  $\mu$  через  $\Lambda$ . В аналитическом виде это уравнение разрешить не удаётся. Однако если решение нелинейного уравнения (3.33) искать с помощью итерационного метода, то для выражения  $\mu^{[n]}$  на  $n$ -й итерации естественно воспользоваться уравнением (3.31):

$$\mu^{[n]} = \frac{\bar{\gamma}_0 \lambda}{\tilde{\mathcal{K}}((\mu^{[n-1]})^2)}.$$

Задачу (3.33) необходимо рассматривать в совокупности с краевыми задачами для  $Y(y, z)$  и  $L(y, z)$ . С учётом (3.24)–(3.27) получаем

$$\Delta_{y,z} Y + A_T Y \lambda \mu = 0. \quad (3.34)$$

Уравнение для  $L$  остаётся прежним (см. (3.25)). Граничные условия для  $Y$  и  $L$  будут сформулированы ниже.

### 3.2.2. Анализ множества решений уравнений модели

Вернёмся теперь к поиску решений  $\sigma(\mu^2)$  уравнения (3.29), фигурирующих в формулах для  $\mathcal{K}$  и  $\mathcal{K}_\mu$ . Подставляя в (3.29) выражения для  $K_I$ , с учётом  $\sigma = a_{22} + a_{33}$  после преобразований получаем уравнение третьей степени:

$$a\sigma^3 + b\sigma^2 + c\sigma + d = 0, \quad \sigma \neq -1/W, \quad (3.35)$$

где  $a = \tilde{\beta}W$ ,  $b = \tilde{\beta} + 1$ ,  $c = W^{-1} + W\mu^2\tilde{\beta}$ ,  $d = \beta\mu^2$ ,  $\tilde{\beta} = 2\bar{k}/3 + \beta$ .

Следуя формулам Кардано, введём обозначения

$$p = \frac{3ac - b^2}{3a^2}, \quad q = \frac{2b^3 - 9abc + 27a^2d}{27a^3}, \quad \mathbb{Q} = (p/3)^3 + (q/2)^2.$$

После преобразований получаем

$$p = \mu^2 - \mathbb{A}, \quad q = \mathbb{B}\mu^2 + \mathbb{C}, \quad \mathbb{A} = \frac{1 - \tilde{\beta} + \tilde{\beta}^2}{3\tilde{\beta}^2W^2}, \quad \mathbb{B} = \frac{3\beta - \tilde{\beta} - 1}{3W\tilde{\beta}}, \quad \mathbb{C} = \frac{(1 + \tilde{\beta})(\tilde{\beta} - 2)(2\tilde{\beta} - 1)}{27W^3\tilde{\beta}^3}.$$

Далее нас будут интересовать только вещественные корни уравнения (3.35).

При  $\mathbb{Q} > 0$  существует единственный вещественный корень:

$$\sigma_1 = \sqrt[3]{-q/2 + \sqrt{\mathbb{Q}}} + \sqrt[3]{-q/2 - \sqrt{\mathbb{Q}}} - b/3a,$$

при  $\mathbb{Q} = 0$  имеются два корня:

$$\sigma_1 = -\sqrt[3]{4q} - b/3a, \quad \sigma_2 = \sqrt[3]{q/2} - b/3a,$$

при  $\mathbb{Q} < 0$  имеются три вещественных корня:

$$\sigma_1 = 2 \cos \alpha \left| \sqrt[6]{\frac{q^2}{4} - \mathbb{Q}} \right| - \frac{b}{3a}, \quad \sigma_{2,3} = \left| \sqrt[6]{\frac{q^2}{4} - \mathbb{Q}} \right| (\cos \alpha \pm \sqrt{3} \sin \alpha) - \frac{b}{3a}, \quad (3.36)$$

где  $\alpha = \arctan [2\sqrt{-\mathbb{Q}/q}]/3$ .

В первом случае несложно рассчитать, что

$$\frac{\partial \sigma_1}{\partial \mu} = \sigma'_1 = \frac{(\mathbb{Q}'/\sqrt{\mathbb{Q}} - q')(\sqrt{\mathbb{Q}} + q/2)^{2/3} - (\mathbb{Q}'/\sqrt{\mathbb{Q}} + q')(\sqrt{\mathbb{Q}} - q/2)^{2/3}}{6(\mathbb{Q} - q^2/4)^{2/3}}.$$

Второй случай рассматривать не будем. В третьем случае

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{1,2,3}}{\partial \mu} = \sigma'_{1,2,3} = & \frac{\{2, \pm\sqrt{3} - 1\}}{3 \cdot 2^{2/3}(4\mathbb{Q} + q^2)^{2/3}} \left( 2(\cos \alpha - \sin \alpha)(2\mathbb{Q}' + qq') + \right. \\ & \left. + \frac{(4\mathbb{Q} + q^2)(\cos \alpha + \sin \alpha)(2\mathbb{Q}q' - q\mathbb{Q}')}{\sqrt{-\mathbb{Q}}(4\mathbb{Q} - q^2)} \right). \end{aligned}$$

Здесь

$$q' = \frac{\partial q}{\partial \mu} = -2\mu \frac{1 - 3\beta + \tilde{\beta}}{3\tilde{\beta}W}.$$

$$\begin{aligned} \mathbb{Q}' = \frac{\partial \mathbb{Q}}{\partial \mu} = & \mu \{ 27\beta^2 \tilde{\beta}^2 \mu^2 W^2 - \beta(1 + \tilde{\beta}) [\tilde{\beta}(2\tilde{\beta}(9\mu^2 W^2 - 1) + 5) - 2] + \\ & + \tilde{\beta}(1 + \tilde{\beta}\mu^2 W^2) [\tilde{\beta}(\tilde{\beta}(6\mu^2 W^2 - 1) + 4) - 1] \} / (27\tilde{\beta}^4 W^4). \end{aligned}$$

Для того чтобы определить, какой из указанных трёх вариантов может реализоваться на практике, обозначим  $\mathcal{M} = \mu^2 \geq 0$  и рассмотрим функцию

$$\mathbb{Q}(\mathcal{M}) = \frac{1}{27}\mathcal{M}^3 + \left(\frac{\mathbb{B}^2}{4} - \frac{\mathbb{A}}{9}\right)\mathcal{M}^2 + \left(\frac{\mathbb{A}^2}{9} + \frac{\mathbb{B}\mathbb{C}}{2}\right)\mathcal{M} + \left(\frac{\mathbb{C}^2}{4} - \frac{\mathbb{A}^3}{27}\right).$$

Корни уравнения  $\mathbb{Q}(\mathcal{M}) = 0$  –  $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2, \mathcal{M}_3$  – тоже можно определить с помощью формул Кардано. Количество действительных корней и их положения определяют области положительных и отрицательных  $\mathbb{Q}$ , т. е. количество решений исходного уравнения (3.35). Используя выражение дискриминанта  $\Delta_{\mathbb{Q}}$  уравнения  $\mathbb{Q}(\mathcal{M}) = 0$ , можно рассчитать, сколько действительных корней имеет это уравнение. Здесь

$$\Delta_{\mathbb{Q}} = \frac{a_1 a_2 a_3 a_4^3}{2^4 3^{15} \tilde{\beta}^{12} W^{12}},$$

$$\begin{aligned} a_1 &= \tilde{\beta}^2 - 3\tilde{\beta}\beta - 1, & a_2 &= \tilde{\beta}^2 - 3\tilde{\beta}\beta + 2, & a_3 &= \tilde{\beta}^2 + 3\tilde{\beta}(1 - \beta) - 1, \\ a_4 &= 3\tilde{\beta}^4 - (2 + 9\beta)\tilde{\beta}^3 + (3 + 9\beta)\tilde{\beta}^2 + (6 - 9\beta)\tilde{\beta} - 2. \end{aligned}$$

**Замечание 3.4.** Неравенство  $\Delta_{\mathbb{Q}} < 0$  означает, что  $\mathcal{M}_1 \in \mathbb{R}$ ,  $\mathcal{M}_2 = \overline{\mathcal{M}_3} \in \mathbb{C}$ . Здесь и далее использован тот факт, что  $\mathcal{M}_2 \mathcal{M}_3 \in \mathbb{R}$  и  $\mathcal{M}_2 \mathcal{M}_3 \geq 0$ . Равенство  $\Delta_{\mathbb{Q}} = 0$  означает  $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2 = \mathcal{M}_3 \in \mathbb{R}$ . Неравенство  $\Delta_{\mathbb{Q}} < 0$  означает, что  $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2, \mathcal{M}_3 \in \mathbb{R}$ . Далее для таких  $\Delta_{\mathbb{Q}}$  считаем, что  $\mathcal{M}_1 < \mathcal{M}_2 < \mathcal{M}_3 \in \mathbb{R}$ .

Приходим к следующим вариантам.

**I. Уравнение (3.35) имеет единственное решение во всех точках  $\Omega$ , если 1)  $\Delta_{\mathbb{Q}} \leq 0$  и  $\mathcal{M}_1 < 0$  или 2)  $\Delta_{\mathbb{Q}} > 0$  и  $\mathcal{M}_1 < \mathcal{M}_2 < \mathcal{M}_3 < 0$ .**

**II. Уравнение (3.35) имеет единственное решение в тех точках  $\Omega$ , где  $0 \leq \mu^2 < \mathcal{M}_2$  или  $\mu^2 > \mathcal{M}_3$ , и неединственное решение во всех остальных точках, если  $\Delta_{\mathbb{Q}} > 0$  и  $\mathcal{M}_1 \leq 0 < \mathcal{M}_2 \leq \mathcal{M}_3$ .**

**III.** Уравнение (3.35) имеет различные решения в тех точках  $\Omega$ , где  $0 \leq \mu^2 \leq M_1$  или  $M_2 \leq \mu^2 \leq M_3$ , и единственное решение в остальных точках, если 1)  $\Delta_{\mathbb{Q}} \leq 0$  и  $M_1 > 0$  или 2)  $\Delta_{\mathbb{Q}} > 0$  и  $0 < M_1 < M_2 < M_3$ .

**IV.** Уравнение (3.35) имеет различные решения в тех точках  $\Omega$ , где  $0 \leq \mu^2 \leq M_3$ , и единственное решение в остальных точках, если  $\Delta_{\mathbb{Q}} > 0$  и  $M_1 < M_2 \leq 0 < M_3$ .

Отметим, во-первых, что  $\mathbb{Q}(\mathcal{M}) \rightarrow \infty$  при  $\mathcal{M} \rightarrow \infty$ . Во-вторых, в силу условий прилипания на стенках канала в окрестности углов прямоугольного канала  $\Omega$  скорость  $u$ , её производные, а значит, и значения  $\lambda$  близки к нулю. Единственным корректным с физической точки зрения решением уравнения (3.31) при  $\lambda = 0$  является  $\mu = 0$ . Таким образом, в области решения задачи есть точки со значениями  $\mathcal{M}$ , сколь угодно близкими к нулю.

Учитывая неравенства из вариантов I–IV и формулы Виета для решений уравнения третьей степени, приходим к следующим условиям для определения количества решений краевой задачи (3.33).

**I.** Правая часть и коэффициенты уравнения (3.33) определяются однозначно, если

$$1) \Delta_{\mathbb{Q}} \leq 0 \text{ и } M_1 M_2 M_3 = \mathbb{A}^3 - \frac{27\mathbb{C}^2}{4} < 0 \text{ или}$$

$$2) \Delta_{\mathbb{Q}} > 0 \text{ и}$$

$$I_1 := M_1 + M_2 + M_3 = 3\mathbb{A} - \frac{27\mathbb{B}^2}{4} \leq 0,$$

$$I_2 := M_1 M_2 + M_1 M_3 + M_2 M_3 = 3\mathbb{A}^2 + \frac{27\mathbb{B}\mathbb{C}}{2} \geq 0,$$

$$I_3 := M_1 M_2 M_3 = \mathbb{A}^3 - \frac{27\mathbb{C}^2}{4} \leq 0.$$

**II.** Правая часть и коэффициенты (3.33) определяются однозначно в классе непрерывных функций, но могут иметь бесконечное множество значений в классе разрывных функций, если

$$\Delta_{\mathbb{Q}} > 0 \text{ и } I_3 = \mathbb{A}^3 - \frac{27\mathbb{C}^2}{4} < 0 \text{ и при этом либо}$$

$$1) I_2 = 3\mathbb{A}^2 + \frac{27\mathbb{B}\mathbb{C}}{2} \geq 0 \text{ и } I_1 = 3\mathbb{A} - \frac{27\mathbb{B}^2}{4} \geq 0, \text{ либо}$$

$$2) I_2 = 3\mathbb{A}^2 + \frac{27\mathbb{B}\mathbb{C}}{2} < 0 \text{ и } I_1 = 3\mathbb{A} - \frac{27\mathbb{B}^2}{4} < 0.$$

Прокомментируем этот случай. Если значения  $\lambda$  во всех точках  $\Omega$  настолько малы, что значения  $\mu$  находятся в окрестности нулевого решения (3.31):  $\mu^2 < \mathcal{M}_2$ , то правая часть и коэффициенты уравнения (3.33) определяются однозначно с использованием выражения  $\sigma_1$ . Иначе, в области  $\Omega$  возникают точки, где для определения правой части и коэффициентов можно использовать любое из выражений  $\sigma_{1,2,3}(\mu^2)$ , и тогда мы приходим к континуальному множеству решений (3.33) с разрывными правыми частями и единственному решению с непрерывной правой частью, соответствующему ветви  $\sigma_1(\mu^2)$ .

**III. Правая часть и коэффициенты (3.33) определяются неоднозначно в классе как непрерывных, так и разрывных функций,** если

$$I_3 = \mathbb{A}^3 - \frac{27\mathbb{C}^2}{4} \geq 0 \text{ и } \mathcal{M}_1 > 0.$$

В этом случае при достаточно малых  $\lambda$  имеются три различных варианта задания непрерывных правой части и коэффициентов уравнения (3.33) по значениям  $\sigma_{1,2,3}(\mu^2)$ . Иначе говоря, имеются три решения высокой степени гладкости. Если же в какой-либо точке  $\Omega$  значения  $\lambda$  оказались больше некоторого порогового значения  $\lambda^*$  (этот факт определяется неравенством  $\mu^2 > \mathcal{M}_1$ ), то правая часть и коэффициенты уравнения (3.33) в окрестности этой точки определяются однозначно по решению  $\sigma_1(\mu^2)$ . В силу того, что в области  $\Omega$  всегда есть точки со значениями  $\mathcal{M}$ , сколь угодно близкими к нулю, множество решений задачи (3.33) с разрывными правой частью и коэффициентами имеет мощность континуума. Отметим также, что при фиксированном распределении температуры  $Y(y, z)$  значение  $\lambda^*$  соответствует некоторому пороговому значению градиента давления  $P_d^*$ , при превышении которого градиенты скорости становятся достаточно большими, чтобы решение  $\mu$  уравнения (3.31) оказалось на достаточном расстоянии от нулевого решения этого же уравнения при  $\lambda = 0$ , конкретно на расстоянии, большем  $\sqrt{\mathcal{M}_1}$ . Из этого легко сделать вывод, что при  $P_d < P_d^*$  решений, имеющих высокую гладкость, три, при  $P_d \geq P_d^*$  такое решение единственно.

**IV. Правая часть и коэффициенты (3.33) определяются неоднозначно в классе как непрерывных, так и разрывных функций,** если

$$I_3 = \mathbb{A}^3 - \frac{27\mathbb{C}^2}{4} \geq 0 \text{ и } \Delta_{\mathbb{Q}} > 0, \mathcal{M}_1 < 0.$$

Этот случай аналогичен предыдущему за тем исключением, что факт пре-

вышения порогового значения  $\lambda > \lambda^*$  определяется неравенством  $\mu^2 > M_3$ .

В завершение анализа множественности гладких решений задачи (3.33) отметим, что

$$\mathcal{M}_1 \mathcal{M}_2 \mathcal{M}_3 = \mathbb{A}^3 - \frac{27\mathbb{C}^2}{4} = \frac{\tilde{\beta}^2(\tilde{\beta}^2 - 1)^2}{4W^6\tilde{\beta}^6} \geq 0.$$

Это означает, что реализуются только варианты III и IV, и в классе функций с разрывными вторыми производными задача (3.33) имеет бесконечное множество решений.

Для того чтобы выяснить, какое именно из гладких решений задачи (3.33) реализуется на практике, необходимо проводить анализ установления течения при решении нестационарной задачи. Такой анализ проведён в § 3.4. Отметим, что выбор той или иной ветви функции  $\sigma(\mu^2)$  из (3.36) существенно зависит от параметров модели, а также от начального поля скорости и компонент тензора анизотропии, некоторые полезные сведения по этому поводу получены в [256] при решении одномерной задачи. Ниже при проведении расчётов будем использовать  $\sigma = \sigma_1$ , заданное в (3.36).

**Замечание 3.5.** При  $\bar{k} = 0$  вместо уравнения (3.35) несложно получить квадратное уравнение для  $\sigma$ . Корни этого уравнения легко находятся:

$$\sigma = (\pm\sqrt{1 - \kappa^2} - 1)/(2\beta W), \quad \kappa^2 = (2\beta W\mu)^2 < 1. \quad (3.37)$$

В таком случае выражение для  $\mathcal{K}$  имеет вид

$$\mathcal{K} = \frac{\tilde{\mathcal{K}}}{J}, \quad \tilde{\mathcal{K}} = \frac{2\beta(\hat{\beta}\sqrt{1 - \kappa^2} + 1)}{(\hat{\beta} + \sqrt{1 - \kappa^2})^2}, \quad \hat{\beta} = 2\beta - 1 \quad (|\hat{\beta}| < 1).$$

После громоздких выкладок, проведённых в [179], для случая  $\bar{k} = 0$  получено

$$\bar{\gamma} = \frac{(1 - \tilde{\alpha}^2 \tilde{t}^2)(1 + \tilde{t}^2)}{\tilde{Q}}, \quad \tilde{Q} = 1 - \tilde{\alpha}^2 \tilde{t}^4 - \frac{6\hat{\beta}}{1 - \hat{\beta}} \tilde{t}^2 + 4\bar{\Lambda} \frac{\tilde{t}(1 - \tilde{t}^2)}{1 - \hat{\beta}},$$

где

$$\begin{cases} \tilde{t} = \tilde{g} \pm \sqrt{\tilde{g}^2 - 1}, \quad \tilde{g} > 1, \text{ при этом:} \\ \tilde{g} = (1 + \sqrt{1 + 4\bar{\Lambda}^2})/(2\bar{\Lambda}), \quad \bar{\Lambda} = \sqrt{1 - \hat{\beta}^2 W \Lambda}, \quad \tilde{\alpha} = \sqrt{(1 + \hat{\beta})/(1 - \hat{\beta})}, \end{cases} \quad (3.38)$$

величина  $\Lambda$  определена в (3.31), величина  $\bar{\gamma}$  входит в выражения коэффициентов уравнения (3.33). На основе (3.37), (3.38) несложно получить, что

$$\sigma = \pm \frac{(\tilde{\alpha}t)^2}{\beta W(1 + (\tilde{\alpha}t)^2)}.$$

### 3.2.3. Численный анализ течения в канале с прямоугольным сечением

Обратимся к задаче численного моделирования стационарных неизотермических течений несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости в канале с прямоугольным поперечным сечением  $\Omega$ , см. рис. 3.1. Такие течения возникают, например, в экструдере на достаточно большом расстоянии от сужения канала, см. [257]. Для описания течения воспользуемся уравнениями (3.33), (3.34). При этом будем считать, что имеют место условия прилипания на стенке канала:  $u(y, z) = 0$  при  $(y, z) \in \partial\Omega$ , а граничные условия для температуры имеют вид

$$Y(y, -r) = 1, \quad Y(y, r) = 1 + \bar{\theta} \quad \text{при } |y| \leq 1 \quad Y_y(\pm 1, z) = 0 \quad \text{при } |z| \leq r. \quad (3.39)$$

Такие условия соответствуют нагреву/охлаждению стенки канала при  $z = r$  и свободному потоку тепла через боковые стенки.

Для решения поставленной краевой задачи будем использовать алгоритм, описанный в гл. 2, основанный на применении метода установления, метода коллокаций и прямого произведения полиномов (1.3), (1.6) с узлами в нулях многочлена Чебышёва,  $y_j = y_j^{\text{ch}}$ ,  $z_k = z_k^{\text{ch}}$ ,  $j = \overline{1, N}$ ,  $k = \overline{1, K}$ . В качестве начальных данных метода установления взяты нулевые значения функций  $u$  и  $Y$ . В табл. 11 указаны значения параметров вычислительного процесса, использованные при решении задачи. В табл. 12 даны основные безразмерные параметры рассмотренной модели и диапазон их значений, в котором удалось найти численные решения. Расчёты проводились на ЭВМ Intel Core i5-3330, 3 ГГц, 8 Гб ОЗУ.

Параметр  $Ga$  в расчётах положили нулевым. На рис. 3.2–3.5 показаны распределения поля скорости в сечении канала при различных значениях параметров задачи.

**Таблица 11.** Основные параметры численного метода

Параметр	Описание	Значение
$\tau$	Шаг сетки по времени	0.1–1000
$N, K$	Количество узлов интерполяций по осям $y, z$	31 – 103
$\varepsilon_S$	Невязка установления, см. (2.11)	$10^{-12} - 10^{-9}$
$\mathfrak{R}$	Тип регуляризации (P – простая, S – регуляризация Соболева), см. п. 2.1.1	$P, S$
$k_1, k_2$	Параметры регуляризации Соболева	1 – 1000

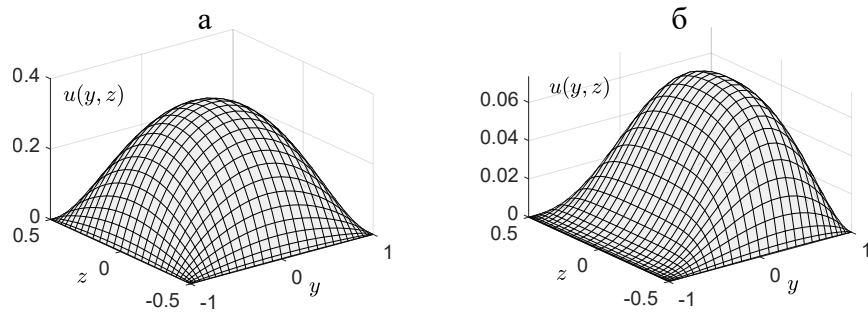
**Таблица 12.** Безразмерные параметры модели

Параметр	Описание	Значение
$k = \beta$	Феноменологические параметры	0 – 1
$D$	Характеристика градиента давления и вязкости жидкости, см. (3.17)	1 – 4
$\bar{E}_A$	Энергия активации	0–20
$\bar{\theta}$	Относительная разность температур на стенках канала, см. (3.39)	–0.2 – 10
$W$	Число Вайсенберга	0.1 – 1.5
$r$	Ширина канала, см. рис. 3.1	0.001 – 1

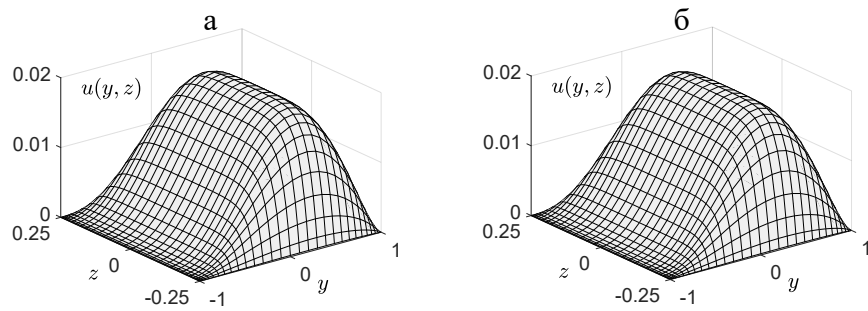
В табл. 13 приведён список всех параметров экспериментов, результаты которых отражены на рис. 3.2–3.5, и некоторые дополнительные данные:  $t_{solve}$  – время работы программы в секундах;  $N_{it}$  – количество итераций метода установления и  $u_{max}$  – максимальное значение скорости узлах сетки.

Из проведённых экспериментов видно, что значительное влияние на характер течения оказывают энергия активации и разность температур на верхней и нижней стенках канала, см. рис. 3.2. При этом увеличение  $\bar{E}_A$  приводит к уменьшению абсолютного значения скорости, а варьирование  $\bar{\theta}$  – к значительной асимметрии профиля скорости относительно центра канала. Изменение параметра  $\beta$  незначительно влияет на профиль скорости, см. рис. 3.3. Вариация градиента давления и характеристик вязкости естественным образом отражается как на абсолютных значениях скорости, так и на её распределении внутри канала, см. рис. 3.4.

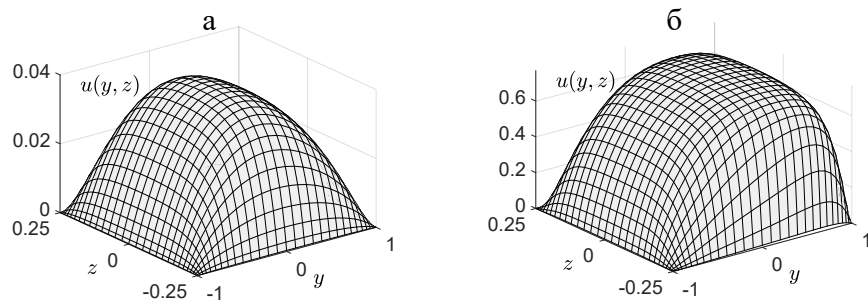




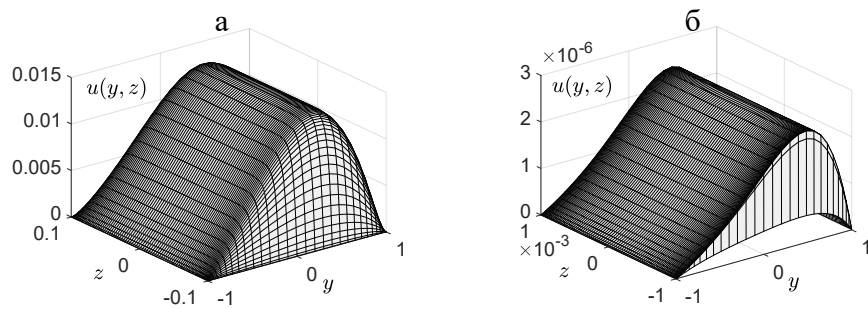
**Рис. 3.2.** Профили скоростей течения полимерной жидкости при различных  $\bar{E}_A, \bar{\theta}$ : а –  $\bar{E}_A = 1, \bar{\theta} = 1$ ; б –  $\bar{E}_A = 10, \bar{\theta} = 10$



**Рис. 3.3.** Скорости течения жидкости при различных  $\beta$ : а –  $\beta = 0.9$ ; б –  $\beta = 0.1$



**Рис. 3.4.** Скорости течения жидкости при различных  $D$ : а –  $D = 1$ ; б –  $D = 4$



**Рис. 3.5.** Скорости течения жидкости при различных  $r, W$ : а –  $r = 0.1, W = 1.5$ ; б –  $r = 0.001, W = 0.1$

**Таблица 13.** Параметры и данные экспериментов

Параметр	Эксперимент			
	№1, рис. 3.2,а	№2, рис. 3.2,б	№3, рис. 3.3,а	№4, рис. 3.3,б
$D$	1	1	1	1
$\beta$	0.5	0.5	0.9	0.1
$W$	1	1	1	1
$\bar{\theta}$	1	10	10	10
$\bar{E}_A$	1	10	10	10
$r$	0.5	0.5	0.25	0.25
$N \times K$	$31 \times 31$	$31 \times 31$	$31 \times 31$	$31 \times 31$
$\varepsilon_S$	$3 \times 10^{-12}$	$10^{-11}$	$3 \times 10^{-11}$	$2 \times 10^{-12}$
$\tau$	1000	0.1	0.1	1.1
$\mathfrak{R}$	P	S	S	S
$t_{solve}$	0.906	3.04	2.404	0.67
$N_{it}$	102	610	476	64
$u_{max}$	0.3536	0.073535	0.0188	0.0185
Параметр	№5, рис. 3.4,а	№6, рис. 3.4,б	№7, рис. 3.5,а	№8, рис. 3.5,б
$D$	1	4	4	4
$\beta$	0.4	0.4	0.5	0.5
$W$	1	1	1.5	0.1
$\bar{\theta}$	-0.2	-0.2	1	1
$\bar{E}_A$	10	10	20	20
$r$	0.25	0.25	0.1	0.001
$N \times K$	$31 \times 31$	$31 \times 31$	$31 \times 101$	$31 \times 101$
$\varepsilon_S$	$4 \times 10^{-12}$	$10^{-10}$	$10^{-9}$	$3 \times 10^{-11}$
$\tau$	1000	1000	1.3	1.1
$\mathfrak{R}$	P	P	S	S
$t_{solve}$	0.327	7.229	5.723	6.1
$N_{it}$	25	1783	294	307
$u_{max}$	0.0396	0.7696	0.0139	$2.4 \times 10^{-6}$

Изменение толщины канала значительно влияет на абсолютные величины скорости и характер течения вблизи границ  $z = \pm r$ . В случае малых  $r$   $u(y, z)$  мало меняется при изменении  $z$ , только в районе границ возникает погранслоный эффект, см. рис. 3.5. Отметим, что предложенный алгоритм позволяет получить корректные результаты и в случае предельно малых  $r$ .

В работе [257] проведено экспериментальное исследование течений полиэтилена низкой плотности Lupolen 1840H в экструдере. При этом описаны

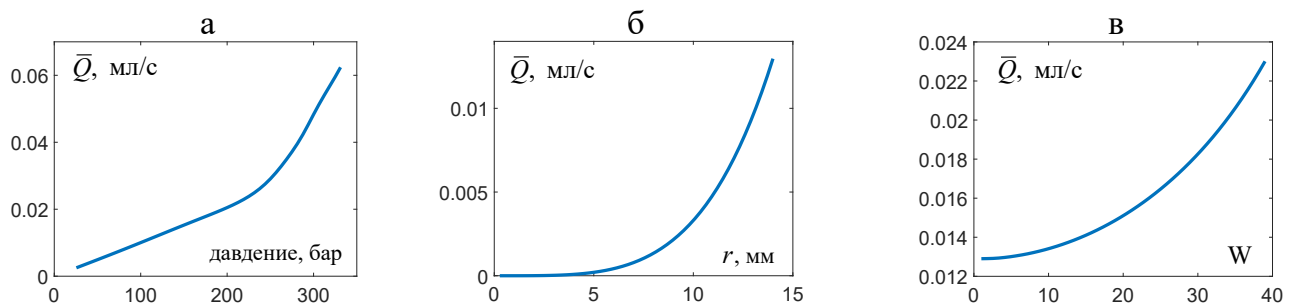
основные параметры жидкости и геометрии канала, а также измерены поля скоростей жидкости. Эта информация позволяет определить бóльшую часть параметров созданной модели и рассчитать течение, возникающее на большом расстоянии от сужения канала экструдера. Параметры имеют такие значения:  $\eta_0 = 5.45 \times 10^4$  Па·с,  $\tau_0 = 3.7$  с,  $E_A = 5.8 \times 10^4$  Дж/(моль·с),  $T_0 = 150^\circ$  С,  $\rho = 918$  кг/м<sup>3</sup>,  $Ra = 0.053$ ,  $Pr = 5.4$ ;  $k = \beta = 0.0235$ . Сечение канала – квадрат со стороной 14 мм, градиент давления –  $\Delta P/(hl) = 2.54 \times 10^8$  Па/м.

Используя эти данные и полагая  $l = 0.01$  м,  $u_H = 0.01$  м/с, мы получили:  $Re = 1.68 \times 10^{-6}$ ,  $W=4.1$ ,  $Ra = 0.053$ ,  $Pr = 5.4$ . Значения параметров  $k$ ,  $\beta$ ,  $A_T$  не были заданы в статье [257]. Их мы задавали так, чтобы полученные профили скорости были близки к результатам измерений из [257, 258].

На рис. 3.6 показаны зависимости размерного потока жидкости

$$\bar{Q} = \int_{\Omega} u(y, z) dy dz$$

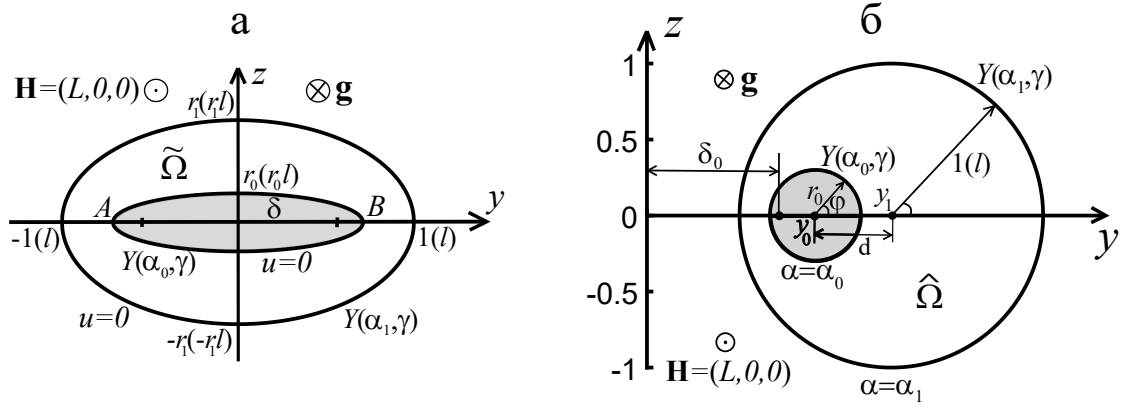
в канале экструдера от перепада давления, от ширины канала  $r$  и от  $W$ . При вариации каждого параметра значения остальных были фиксированы и равны указанным выше. Видно, что приведённые зависимости являются нелинейными и отражают сложную динамику полимерной жидкости.



**Рис. 3.6.** Зависимости размерного потока жидкости  $\bar{Q}$  в канале экструдера от перепада давления (а), от ширины канала  $r$  (б) и от  $W$  (в)

### 3.2.4. Течение полимерной жидкости в канале с эллиптическим сечением

Рассмотрим течение в цилиндрическом канале с эллиптическим сечением  $\tilde{\Omega}$  и тонким нагревательным элементом эллиптической формы с теми же фокусами, что у внешней границы канала (рис. 3.7, а).



**Рис. 3.7.** Сечение канала эллиптической формы (а) и круглой формы (б) с нагревательными элементами

Мы предполагаем, что внутренняя стенка канала (внутренний эллипс) изготовлена из парамагнетика, например из алюминия или вольфрама, для которого магнитная восприимчивость  $\chi_{0H} > 0$ . На поверхности внутреннего эллипса присутствует обмотка, причём на единицу длины (в системе СИ – 1 метр) приходится  $\tilde{n}$  витков. Тогда внутри канала возникает магнитное поле с единственной ненулевой компонентой вектора напряжённости  $L$ .

Запишем задачу (3.33) в *эллиптических координатах*  $\alpha, \gamma$ :

$$y = \delta \cosh \alpha \sin \gamma, \quad z = \delta \sinh \alpha \cos \gamma, \quad (3.40)$$

где  $\delta = \sqrt{1 - r^2}$  ( $2\delta$  – фокусное расстояние),  $0 \leq \alpha < \infty$ ,  $0 \leq \gamma < 2\pi$ . Построение приближений в этой системе координат обсуждалось в п. 1.1.3, см. (1.21). В силу (3.40) имеем

$$\begin{cases} y_\alpha = -z_\gamma = \delta \sinh \alpha \sin \gamma, & z_\alpha = y_\gamma = \delta \cosh \alpha \cos \gamma, \\ y_{\alpha\alpha} = -y_{\gamma\gamma} = y, & y_{\alpha\gamma} = z. \end{cases} \quad (3.41)$$

Далее находим производные  $u_y, u_z$ :

$$u_y = Ru_\alpha + Qu_\gamma, \quad u_z = Qu_\alpha - Ru_\gamma. \quad (3.42)$$

Здесь  $R = \frac{y_\alpha}{y_\alpha^2 + y_\gamma^2} = \frac{\delta \sinh \alpha \sin \gamma}{g^2}$ ,  $Q = \frac{y_\gamma}{y_\alpha^2 + y_\gamma^2} = \frac{\delta \cosh \alpha \cos \gamma}{g^2}$ ,  $g^2 = \delta^2(\sinh^2 \alpha + \cos^2 \gamma)$ . В силу (3.42) получим

$$\lambda^2 = u_y^2 + u_z^2 = \frac{1}{g^2}(u_\alpha^2 + u_\gamma^2). \quad (3.43)$$

С учётом (3.42) последовательно находим

$$\begin{cases} u_{yy} = R^2 u_{\alpha\alpha} + 2RQ u_{\alpha\gamma} + Q^2 u_{\gamma\gamma} + (RR_\alpha + QR_\gamma)u_\alpha + (RQ_\alpha + QQ_\gamma)u_\gamma, \\ u_{zz} = Q^2 u_{\alpha\alpha} - 2RQ u_{\alpha\gamma} + R^2 u_{\gamma\gamma} + (QQ_\alpha - RQ_\gamma)u_\alpha + (RR_\gamma - QR_\alpha)u_\gamma, \end{cases} \quad (3.44)$$

при этом  $R_\alpha = Q_\gamma = \frac{\delta^2 y (\cos^2 \gamma - \sinh^2 \alpha)}{g^4}$ ,  $R_\gamma = -Q_\alpha = \frac{\delta^2 z (\cosh^2 \alpha + \sin^2 \gamma)}{g^4}$ .

Аналогично находим

$$u_{yz} = RQ u_{\alpha\alpha} + (Q^2 - R^2)u_{\alpha\gamma} - RQ u_{\gamma\gamma} + (RQ_\alpha + QQ_\gamma)u_\alpha - (RR_\alpha + QR_\gamma)u_\gamma. \quad (3.45)$$

С учётом (3.44), (3.45) квазилинейное уравнение (3.33) примет следующий вид:

$$\tilde{a}u_{\alpha\alpha} - 2\tilde{b}u_{\alpha\gamma} + \tilde{c}u_{\gamma\gamma} + \tilde{d}u_\alpha + \tilde{e}u_\gamma = -D\widehat{\mathcal{K}}, \quad (3.46)$$

где

$$\tilde{a} = \hat{a}R^2 + \hat{c}Q^2 - 2\hat{b}RQ = \frac{1}{g^2} - \frac{u_\alpha^2}{g^4}\mathcal{L},$$

$$\tilde{c} = \hat{a}Q^2 + \hat{c}R^2 + 2\hat{b}RQ = \frac{1}{g^2} - \frac{u_\gamma^2}{g^4}\mathcal{L},$$

$$\tilde{b} = \hat{b}(Q^2 - R^2) + RQ(\hat{c} - \hat{a}) = \frac{u_\alpha u_\gamma}{g^4}\mathcal{L},$$

$$\begin{aligned} \tilde{d} &= (\hat{a} - \hat{c})(RR_\alpha + QR_\gamma) - 2\hat{b}(QR_\alpha - RR_\gamma) + R\hat{d} + Q\hat{e} = \\ &= \frac{\mathcal{L}}{g^2}[(R_\gamma Q - R_\alpha R)(u_\alpha^2 - u_\gamma^2) - 2(R_\gamma R + R_\alpha Q)u_\alpha u_\gamma] + \frac{(1 - \bar{\gamma})Y - \bar{\gamma}}{(Yg)^2}Y_\alpha, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{e} &= (\hat{a} - \hat{c})(QR_\alpha - RR_\gamma) + 2\hat{b}(RR_\alpha + QR_\gamma) + Q\hat{d} - R\hat{e} = \\ &= \frac{\mathcal{L}}{g^2}[(R_\gamma R + R_\alpha Q)(u_\alpha^2 - u_\gamma^2) + 2(R_\gamma Q - R_\alpha R)u_\alpha u_\gamma] + \frac{(1 - \bar{\gamma})Y - \bar{\gamma}}{(Yg)^2}Y_\gamma, \end{aligned}$$

при этом  $R_\gamma Q - R_\alpha R = \frac{\delta^2}{g^4} \sinh \alpha \cosh \alpha$ ,  $R_\gamma R + R_\alpha Q = \frac{\delta^2}{g^4} \sin \gamma \cos \gamma$ .

Уравнение (3.46) необходимо дополнить уравнением теплопроводности (оно выводится из (3.34) на основе замены (3.40) и формул (3.41)–(3.43)):

$$Y_{\alpha\alpha} + Y_{\gamma\gamma} + (A_T g \mu \sqrt{u_\alpha^2 + u_\gamma^2}) Y = 0. \quad (3.47)$$

Уравнение для  $L$  принимает вид

$$L_{\alpha\alpha} + L_{\gamma\gamma} = 0. \quad (3.48)$$

Так как область решения уравнений (3.46)–(3.48) расположена между конфокальными эллипсами с малыми полуосями  $r_0 < r_1$  (см. рис. 3.7, а), то  $\alpha_0 \leq \alpha \leq \alpha_1$ , где с учётом (3.40)  $\alpha_0 = \ln \frac{r_0 + \sqrt{1 + r_0^2 - r_1^2}}{\sqrt{1 - r_1^2}}$ ,  $\alpha_1 = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + r_1}{1 - r_1}$ . Таким образом, будем искать решения уравнений (3.46)–(3.48) в классе достаточно гладких  $2\pi$ -периодических по переменной  $\gamma$  функций, удовлетворяющих на стенках канала условиям прилипания для скорости:

$$u = 0 \text{ при } \alpha = \alpha_0, \alpha_1 \quad (3.49)$$

и неоднородным условиям Дирихле для температуры и магнитного поля

$$Y(\alpha_0, \gamma) = \psi_0^Y(\gamma), \quad Y(\alpha_1, \gamma) = \psi_1^Y(\gamma), \quad (3.50)$$

$$L(\alpha_0, \gamma) = \psi_0^L(\gamma), \quad Y(\alpha_1, \gamma) = \psi_1^L(\gamma). \quad (3.51)$$

Здесь  $\psi_{0,1}^{Y,L}(\gamma)$  – заданные распределения температур и магнитных полей на внутренней и внешней стенках. При пропускании тока  $I_H$  по обмотке внутреннего канала в соответствии с [250, 251, 259]  $\psi_0^L(\gamma) = \tilde{n} I_H / H_0$  ( $H_0$  – характерное значение напряжённости для записи безразмерных величин). В предположении, что канал находится во внешнем магнитном поле, сонаправленном с осью канала с напряжённостью  $\mathbf{H}_0 = (L_0(\alpha, \gamma), 0, 0)$ , и внешняя стенка канала имеет малую толщину, получаем  $\psi_1^L(\gamma) = L_0(\alpha_1, \gamma)$ . С использованием закона Кюри (см. [250, 251, 259, 260]) можно выразить температуру на внутренней стенке через её намагничённость  $m$ :  $\psi_0^Y(\gamma) \equiv \chi_{H_0} \tilde{n} I_H / m$ , см. замечание 3.1. Функция  $\psi_1^Y(\gamma)$  определяется внешним температурным полем. В наших расчётах будем полагать  $\psi_1^Y(\gamma) \equiv T_0 / T_0 = 1$ .

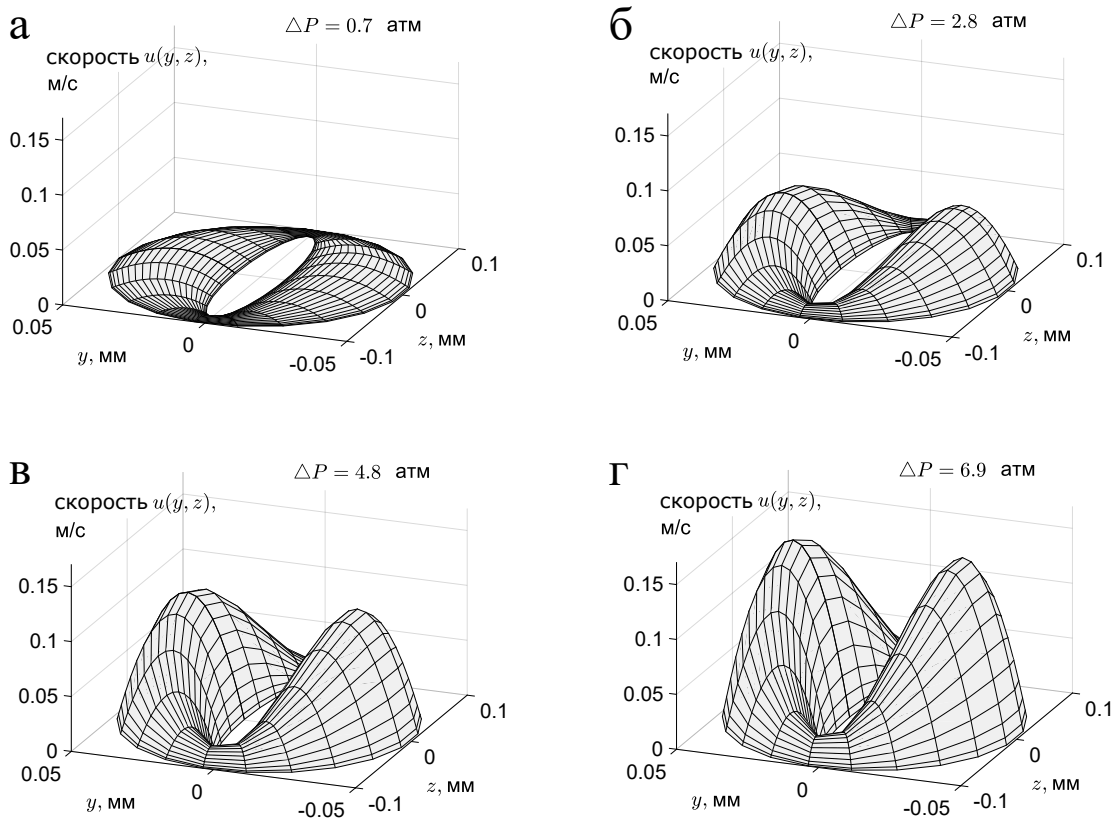
Отметим, что при малых значениях  $r_0$  в точках  $\alpha = r_0$ ,  $\gamma = \pi/2$  и  $\alpha = r_0$ ,  $\gamma = 3\pi/2$  (точки  $A$  и  $B$  на рис. 3.7, а) функция  $g$ , стоящая в знаменателях коэффициентов уравнения (3.46), принимает малые значения. Если умножить

уравнение (3.46) на  $g^6$ , то получим уравнение с малым параметром  $g^2$  при старших производных. Это означает, что в окрестностях указанных точек решения этого уравнения могут иметь существенные особенности.

**Замечание 3.6.** Отметим, что согласно рассуждениям п. 3.2.2, вследствие гладкости границы рассматриваемого канала, минимальные значения  $\lambda$  и соответственно  $\mu$  могут быть сколь угодно велики, но они, как и раньше, пропорциональны градиенту давлений. При малых градиентах  $\lambda$  и  $\mu$  малы, потому существуют три гладких решения, соответствующие  $\sigma_{1,2,3}$ . При увеличении давления (когда в области  $\tilde{\Omega}$  появляются точки с положительными и отрицательными значениями  $\mathbb{Q}$ ) остаются единственное гладкое решение и континуальное множество решений уравнения (3.33) с разрывной правой частью. При дальнейшем росте градиента значения  $\mathbb{Q}$  становятся положительными во всей области  $\Omega$ , тогда остаётся единственное решение.

**Численный анализ течений.** Для решения краевой задачи (3.46)–(3.51) будем использовать численный метод, разработанный в гл. 2. В результате аппроксимации неизвестных функций в уравнениях (3.46)–(3.48) прямым (тензорным) произведением полиномов  $\mathcal{P}(u, \alpha, \gamma) = \tilde{p}_N^1(u, \alpha) \times s_K(u, \gamma)$  (обозначения описаны в п. 1.1.3) и применения разработанного алгоритма были найдены значения скорости, температуры и магнитного поля. На рис. 3.8 приведены распределения безразмерной скорости при различных значениях перепада давления  $\Delta P$  вдоль оси канала (см. обозначения к формулам (3.10)), соответствующих экспериментальным данным из [261] (далее для удобства значения перепада давления приведены в атмосферах, атм).

В соответствии с данными из табл. 36 (см. приложение IV) использованы следующие значения физических параметров:  $\bar{E}_A = 0.614$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $k = 1.2\beta$ ,  $W = 0.1$ ,  $H_0 = 1$  А/м,  $\tilde{n} = 22$ ,  $I_H = 22$  А,  $m = 0.03$  А/м,  $\chi_{H_0} = 7.8 \times 10^{-5}$  (предполагаем, что нагревательный элемент сделан из парамагнетика вольфрама). Значение коэффициента диссипации  $A_T$  не было найдено в литературе, в расчёте оно задано равным 3. Значения геометрических параметров были выбраны следующими:  $l = r_0 = 0.1$ ,  $r_1 = 0.5$ ,  $h = 100$ , см. рис. 3.1, 3.7, а. Степень тензорного произведения интерполяционных полиномов (количество узлов пространственной сетки) тоже была фиксирована и равна  $21 \times 21$ . Отме-

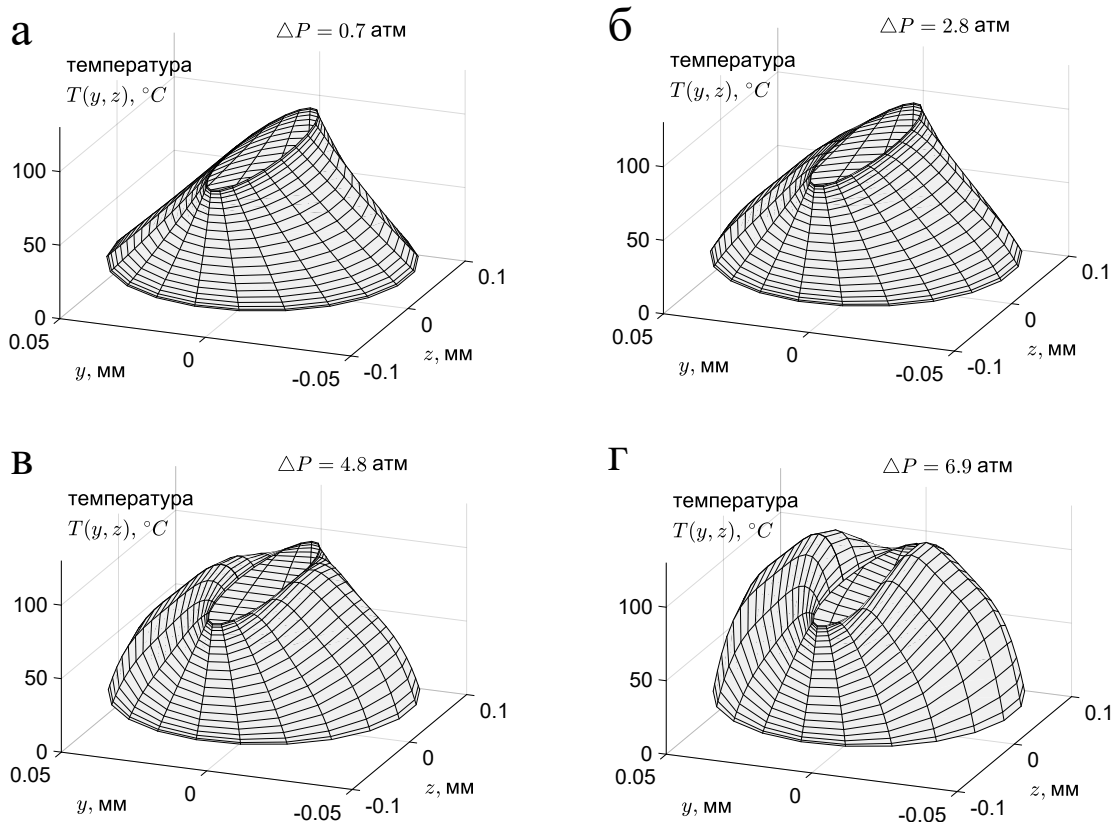


**Рис. 3.8.** Стационарные распределения скорости течения в канале с эллиптическим сечением при разных значениях перепада давления  $\Delta P$ : а)  $\Delta P = 0.7$  атм; б)  $\Delta P = 2.8$  атм; в)  $\Delta P = 4.8$  атм; г)  $\Delta P = 6.9$  атм

тим, что для заданных значений параметров имеем:  $\Delta_Q < 0$ , т. е. реализуется вариант **III** из п. 3.2.2, при этом  $M_1 \approx 1882.32$ . На рис. 3.9 приведены распределения температуры для рассмотренного режима.

Отметим, что приведённые значения соответствуют решению  $\sigma_1$  из (3.36). Однако заданные значения перепада давления достаточно малы, и существуют ещё 2 варианта записи уравнения (3.46) с непрерывными коэффициентами и правой частью (см. замечание 3.6). Интересный факт состоит в том, что для варианта записи с использованием  $\sigma_2(\mu^2)$  не удаётся найти решений (метод установления не сходится при вариации параметров численного метода в широких диапазонах), в то время как при использовании  $\sigma_3(\mu^2)$  решения найти удалось. Сечения распределений скорости течения и температуры, соответствующие двум ветвям  $\sigma_{1,3}$ , для случая  $\Delta P = 6.9$  атм. приведены на рис. 3.10. Видно, что максимальный разброс значений скорости и температу-

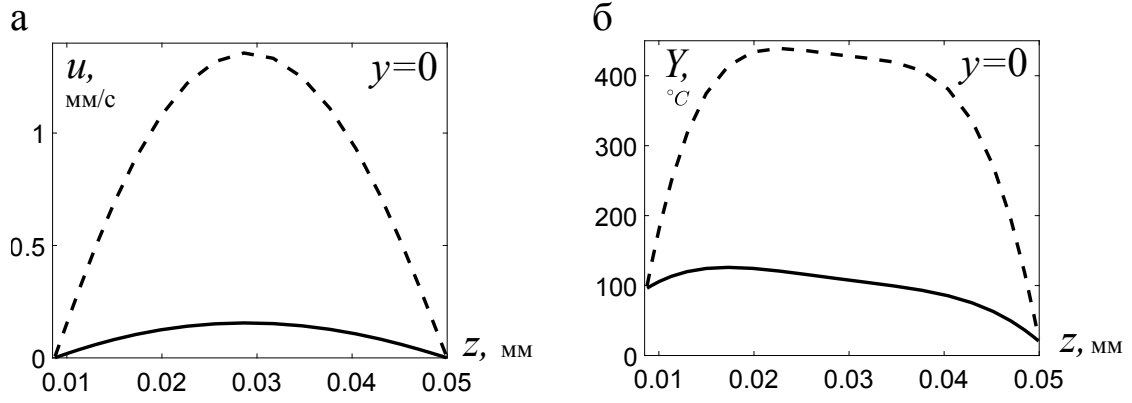




**Рис. 3.9.** Стационарные распределения температуры жидкости в канале с эллиптическим сечением при разных значениях перепада давления  $\Delta P$ : а)  $\Delta P = 0.7$  атм; б)  $\Delta P = 2.8$  атм; в)  $\Delta P = 4.8$  атм; г)  $\Delta P = 6.9$  атм

ры для этих двух ветвей велик (решения отличаются в 5–7 раз). Для определения решения, которое реализуется на практике, необходим дополнительный анализ устойчивости каждого полученного решения на исходном нелинейном уровне. Отметим, что для данного режима течения значения порогового перепада давления  $\Delta P^* \approx 90$  атм (см. замечание 3.6). При  $\Delta P < \Delta P^*$  удаётся найти два решения высокой гладкости, при  $\Delta P^* < \Delta P < \Delta P^{lim} \approx 248$  атм – только одно гладкое решение. При дальнейшем росте перепада давления метод установления перестаёт сходиться. Указанные пороговое и предельное значения перепада определены в расчётах с точностью до 1 атм.

Другие численные эксперименты показали, что 1) увеличение  $A_T$  приводит к резкому росту скорости и температуры, при этом существенно меняется характер поведения последней; 2) уменьшение  $r_0$  также способствует увеличению значений скорости. Изменение безразмерных величин в несколько раз



**Рис. 3.10.** Сечение плоскостью  $y = 0$  распределений скорости (а) и температуры (б), соответствующих двум различным ветвям функции  $\sigma(\mu^2)$  из (3.36) при  $\Delta P = 6.9$  атм ( $\sigma = \sigma_1$  – сплошная линия,  $\sigma = \sigma_3$  – тире)

или на порядок может существенно сказываться на свойствах течения, например на расходе, после перехода к размерным величинам. Таким образом, за счет изменения параметров, в частности давления или толщины нагревательного элемента, присутствует возможность управления технологическим процессом печати. Численное моделирование в этом случае выступает эффективным инструментом для анализа потока внутри канала.

### 3.2.5. Течение полимерной жидкости между двумя цилиндрами

Поставим задачу о течении полимерной жидкости в канале  $\widehat{\Omega}$ , образованном двумя цилиндрами радиусов  $0 < r_0 < 1$  и  $r_1 = 1$  с параллельными осями, отстоящими друг от друга на расстоянии  $d$ ,  $0 \leq d < 1 - r_0$ . На рис. 3.7, б показано поперечное сечение канала. Мы предполагаем, как и в предыдущей постановке, что внутренняя стенка канала (в данном случае цилиндр) обмотана тонкой электропроводкой с числом витков  $\tilde{n}$  на единицу длины, пропускающей ток силы  $I_H$ .

Перейдём в уравнении (3.33) к биполярной системе координат, см. п. 1.1.3. В рамках данного пункта обозначаем биполярные координаты  $(\alpha, \gamma)$ , см. (1.22):

$$y = \delta_0 \frac{\sinh \alpha}{\cosh \alpha - \cos \gamma}, \quad z = \delta_0 \frac{\sinh \gamma}{\cosh \alpha - \cos \gamma}, \quad \delta_0 = \frac{1 - r_0^2}{\nu}, \quad (3.52)$$

$$\nu = \sqrt{d^2(1 + r_0^2) + 2d\omega}, \quad \omega = \sqrt{(1 - r_0^2)^2 + (dr_0)^2}, \quad \alpha \in [0, \infty), \quad \gamma \in [0, 2\pi).$$

После проведения выкладок, аналогичных предыдущему пункту, для скорости температуры и компоненты  $L$  напряжённости магнитного поля получим уравнения вида (3.46)–(3.48) с теми же выражениями коэффициентов  $\tilde{a} - \tilde{e}$ , но со следующими изменениями:  $\delta$  нужно заменить на  $\delta_0$  и вычислять часть выражений по формулам

$$y_\alpha = -z_\gamma = \delta_0 \frac{1 - \cos \gamma \cosh \alpha}{(\cos \gamma - \cosh \alpha)^2}, \quad y_\gamma = z_\alpha = \delta_0 \frac{\sin \gamma \sinh \alpha}{(\cos \gamma - \cosh \alpha)^2},$$

$$g = \frac{\delta_0}{(\cos \gamma - \cosh \alpha)},$$

$$R = \frac{1 - \cos \gamma \cosh \alpha}{\delta_0}, \quad Q = -\frac{\sin \gamma \sinh \alpha}{\delta_0},$$

$$R_\alpha = Q_\gamma = -\frac{\cos \gamma \sinh \alpha}{\delta_0}, \quad R_\gamma = Q_\alpha = \frac{\sin \gamma \cosh \alpha}{\delta_0},$$

$$R_\gamma Q - R_\alpha R = \frac{(\cos \gamma - \cosh \alpha) \sinh \alpha}{\delta_0^2}, \quad R_\gamma R - R_\alpha Q = \frac{(\cosh \alpha - \cos \gamma) \sin \gamma}{\delta_0^2}.$$

Уравнения окружностей радиусов  $r_0$  и 1 (см. рис. 3.7, б) в биполярной системе координат (3.52) имеют вид

$$\alpha = \alpha_0 = \operatorname{arccctanh} \left( \frac{dr_0^2 + \omega}{1 - r_0^2} \right), \quad \alpha = \alpha_1 = \operatorname{arccctanh} \left( \frac{d + \omega}{1 - r_0^2} \right).$$

Координаты центров окружностей в биполярной системе:

$$y_0 = \operatorname{ctanh} \alpha_0, \quad y_1 = \operatorname{ctanh} \alpha_1.$$

Для задания граничных условий удобно также иметь выражения координат точек указанных окружностей в биполярной системе  $(\alpha, \gamma)$ , через полярные координаты  $(r, \varphi)$  с полюсом в точке  $(y_0, 0)$  для внутренней окружности:

$$\alpha(\varphi) = \operatorname{arctanh} \left( \frac{2(1 - r_0^2)(y_0 + r_0 \cos \varphi)}{(r_0^2 + 2r_0 y_0 \cos \varphi + y_0^2)\nu + (1 - r_0^2)^2/\nu} \right),$$

$$\gamma(\varphi) = \operatorname{arctan} \left( \frac{2r_0(1 - r_0^2) \sin \varphi}{(r_0^2 + 2r_0 y_0 \cos \varphi + y_0^2)\nu - (1 - r_0^2)^2/\nu} \right)$$

и с полюсом в точке  $(y_1, 0)$  для внешней:

$$\alpha(\varphi) = \operatorname{arctanh}\left(\frac{2(1-r_0^2)(y_1 + \cos \varphi)}{(1+2y_1 \cos \varphi + y_1^2)\nu + (1-r_0^2)^2/\nu}\right),$$

$$\gamma(\varphi) = \operatorname{arctan}\left(\frac{2(1-r_0^2) \sin \varphi}{(1+2y_1 \cos \varphi + y_1^2)\nu - (1-r_0^2)^2/\nu}\right).$$

Решения уравнений (3.46)–(3.48) в задаче о течении между двумя цилиндрами принадлежат классу  $2\pi$ -периодических по переменной  $\gamma$  функций, удовлетворяющих условиям Дирихле:

$$u(\alpha_0, \gamma) = u(\alpha_1, \gamma) = 0;$$

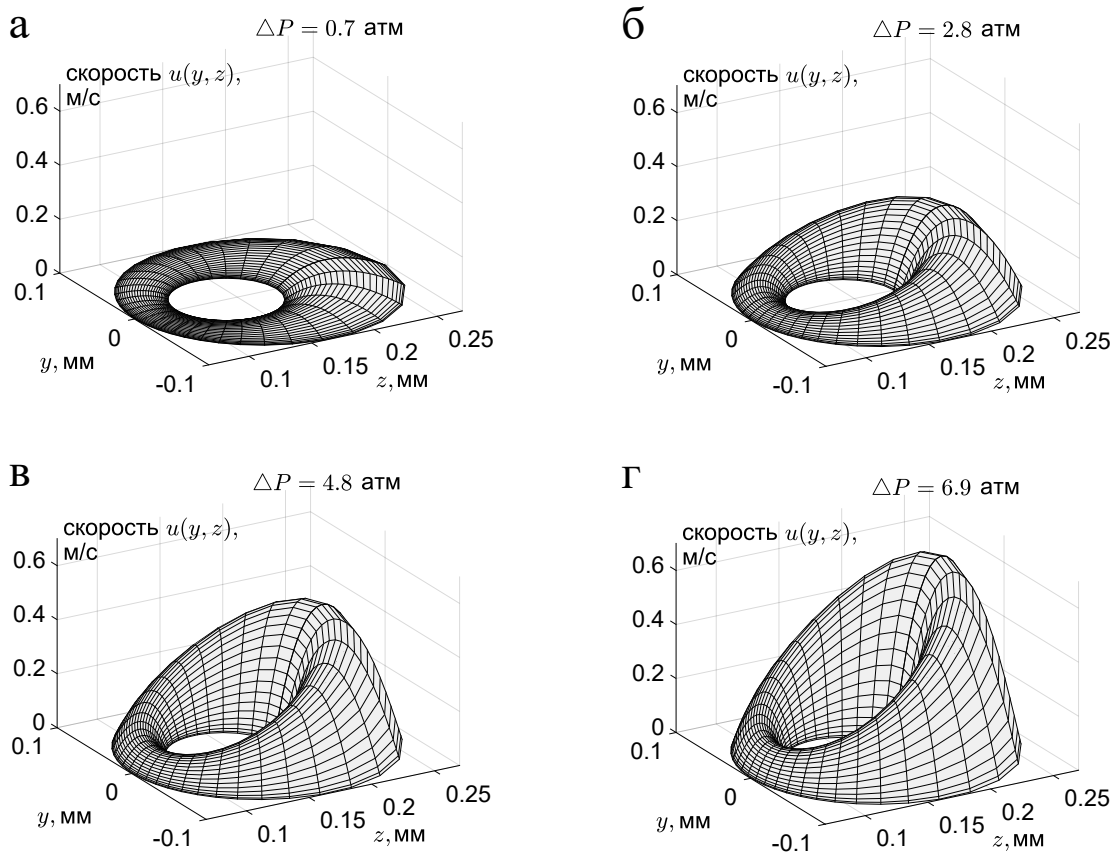
$$Y(\alpha_0, \gamma) = \psi_0^Y(\gamma) = \psi_0^Y(\gamma(\varphi)), \quad Y(\alpha_1, \gamma) = \psi_1^Y(\gamma) = \psi_1^Y(\gamma(\varphi)),$$

$$L(\alpha_0, \gamma) = \psi_0^L(\gamma) = \psi_0^L(\gamma(\varphi)), \quad Y(\alpha_1, \gamma) = \psi_1^L(\gamma) = \psi_1^L(\gamma(\varphi)),$$

где  $\psi_{0,1}^{Y,L}(\gamma(\varphi))$  – заданные распределения температур и магнитных полей по угловым координатам  $\varphi$  на внешней и внутренней окружностях. Их можно определить аналогично предыдущему пункту.

Нетрудно заметить, что при малых  $r_0$  значения  $\alpha_0$  велики, поэтому в окрестности окружности  $\alpha = \alpha_0$  значения функции  $g$  малы. При этом есть определённая неравномерность этого выражения по координате  $\gamma$ . Вместе с тем при  $d$ , близких к нулю, и  $r_0$ , близких к единице, значения функции  $g$  опять оказываются близкими к нулю во всей области задачи. Как было отмечено в предыдущем пункте, данное обстоятельство может привести к существенным особенностям решения уравнения (3.46).

Применяя численный метод, разработанный в гл. 2, удалось найти приближённые решения уравнений, описывающих неизотермические МГД течения полимерной жидкости между двумя цилиндрами. По аналогии с рассуждениями, приведёнными в предыдущем пункте, мы использовали экспериментальные данные из табл. 36 и задали следующие значения параметров:  $\bar{E}_A = 0.614$ ,  $A_T = 0.5$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $k = 1.2\beta$ ,  $W = 0.1$ ,  $H_0 = 1$  А/м,  $\tilde{n} = 22$ ,  $I_H = 22$  А,  $m = 0.03$  А/м,  $\chi_{H0} = 7.8 \times 10^{-5}$ . Значения геометрических параметров были выбраны следующими:  $r_0 = 0.4$ ,  $d = 0.2$ . Степень тензорного произведения интерполяционных полиномов была фиксирована и равна  $31 \times 31$ . На рис. 3.11 даны значения скорости течения для рассмотренных режимов.



**Рис. 3.11.** Стационарные распределения скорости течения в канале с круговым сечением при разных значениях перепада давления  $\Delta P$ : а)  $\Delta P = 0.7$  атм; б)  $\Delta P = 2.8$  атм; в)  $\Delta P = 4.8$  атм; г)  $\Delta P = 6.9$  атм

### § 3.3. Верификация полученных стационарных течений в канале с эллиптическим сечением

В § 2.6 проведено сравнения по скорости и точности разработанного нелокального метода без насыщения (НМБН), метода конечных элементов (МКЭ) и метода коллокаций и наименьших квадратов (МКНК) в модельной задаче о течении полимерной жидкости в канале с эллиптическим сечением. В текущем параграфе указанные методы применены для решения прикладной задачи (3.46)–(3.51) со значениями параметров, соответствующими течениям, возникающим в технологиях печати, см. приложение IV. Описания методов и перечень их основных параметров см. в § 2.6 и в табл. 8. Подчеркнём, что указанные методы основаны на приближениях, лежащих в различных конечномерных функциональных пространствах. Высокоточное совпадение этих

приближений, показанное ниже, является важным аргументом в пользу существования устойчивых стационарных решений рассматриваемой прикладной задачи. При этом наблюдаемые малые отклонения можно трактовать, как характерные значения погрешности найденных решений. Проведённые расчёты служат также верификацией разработанного НМБН.

Для оценки порядка сходимости численного решения задачи (3.46)–(3.51) приближенно вычислялась супремум норма разности решений на последовательности сеток для скорости  $D_a^u$  (аналогично для температуры  $D_a^Y$ )

$$D_a^u = \|u_{ap}^{N_1, N_2} - u_{ap}^{2N_1, 2N_2}\|_\infty = \max_{\xi=1, \mathcal{Q}} |u_{ap}^{N_1, N_2}(y_\xi, z_\xi) - u_{ap}^{2N_1, 2N_2}(y_\xi, z_\xi)|,$$

где  $u_{ap}^{N_1, N_2}$  — приближенное решение, полученное МКНК или НМБН, на сетке размера  $N_1 \times N_2$ ,  $\mathcal{Q}$  — количество распределенных контрольных точек  $(y_\xi, z_\xi)$ . Порядок сходимости решения определялся по формуле

$$R = \log_2 \frac{\|u_{ap}^{N_1, N_2} - u_{ap}^{2N_1, 2N_2}\|_\infty}{\|u_{ap}^{2N_1, 2N_2} - u_{ap}^{4N_1, 4N_2}\|_\infty}.$$

Поскольку в МКЭ использовались неструктурированные сетки, формула разности решений на последовательности сеток в супремум норме имеет вид

$$D_{fem}^u = \|u_{ap}^{2h} - u_{ap}^h\|_\infty = \max_{\xi=1, \mathcal{Q}} |u_{ap}^{2h}(y_\xi, z_\xi) - u_{ap}^h(y_\xi, z_\xi)|, \quad (3.53)$$

где  $h$  — характерный размер элемента равномерной сетки,  $u_{ap}^h$  — соответствующее приближённое решение, полученное МКЭ. Порядок сходимости решения определялся по формуле

$$R_{fem} = \log_2 \left( \|u_{ap}^{4h} - u_{ap}^{2h}\|_\infty / \|u_{ap}^{2h} - u_{ap}^h\|_\infty \right).$$

В представленных ниже таблицах приведены относительные отклонения приближенных решений задачи (3.46)–(3.51), полученных указанными методами. Отклонения рассчитывались для скорости  $\tilde{D}_r^u$ :

$$\tilde{D}_r^u = \max_{\xi=1, \mathcal{Q}} |u_{ap}^*(y_\xi, z_\xi) - u_{ap}^{**}(y_\xi, z_\xi)| / \max_{\xi=1, \mathcal{Q}} |u_{ap}^*(y_\xi, z_\xi)|, \quad (3.54)$$

где  $u_{ap}^*, u_{ap}^{**}$  — приближенные решения, полученные двумя различными методами, и аналогично для температуры —  $\tilde{D}_r^Y$ . Узлы  $(y_\xi, z_\xi)$  определены в

п. 2.6.3, после формулы (2.53), при этом  $N_1 = N_2 = 41$ , т. е. всего выбрана 1 681 точка. В МКЭ для расчёта (3.53) и (3.54) использовалось 1 400 точек. Разница в количестве точек обусловлена кусочно-линейной аппроксимацией границы в МКЭ и тем, что некоторые из точек, лежащих близко к границе эллипсов, не попадали в конечно-элементную область определения задачи.

Далее фиксируем значения параметров  $k = 1.2\beta$ ,  $C_{dis} = 1$ ,  $\bar{E}_A = 1$ ,  $Re = 10$ ,  $Ra = 1.06$ ,  $Pr = 108.1$ , размер большой полуоси внешнего эллипса положим равным единице. В расчётах будем изменять значения параметров  $P_d$ ,  $W$ ,  $\beta$ ,  $r_0$ . В табл. 14–21 приведены результаты при  $P_d = 10$ ,  $W = 0.01$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $r_0 = 0.1$ , если не оговорено другое. В табл. 18–20 результаты для МКНК приведены на сетке размера  $320 \times 80$  при  $K = 4$ , для МКЭ — на сетке из 217 304 элементов. В табл. 21 в МКНК использовалась сетка размера  $320 \times 80$  и  $K = 4$  при  $r_0 = 0.06, 0.11$ ,  $K = 2$  при  $r_0 = 0.01$ , в МКЭ использовалось приблизительно от 250 000 до 320 000 элементов.

Ниже проведём исследование сходимости решений, полученных с помощью трёх указанных методов, сделаем важные заключения о реализуемости стационарных режимов течения в зависимости от реологических и других параметров задачи, проведём анализ особенностей полученных решений, опишем методы адаптации алгоритмов к этим особенностям. Разделим это исследование на четыре этапа.

**Этап 1. Исследование сходимости численных решений, полученных с применением каждого метода в отдельности.** В табл. 14 показаны результаты расчётов на сходимость МКНК. Видно, что точность решений возрастает с ростом числа ячеек при любой степени приближающих полиномов  $K$ . Однако, вопреки ожиданиям, порядок сходимости с ростом  $K$  остаётся практически неизменным. Этот эффект, связанный с наличием особенности решения в системе координат  $(y, z)$ , обсудим ниже. Результаты аналогичного исследования для МКЭ приведены в табл. 15. Здесь использованы неструктурированные равномерные сетки с кратным уменьшением характерного размера элемента  $h$ . Видна сходимость решений, однако порядок сходимости сильно колеблется.

Более регулярное поведение погрешности наблюдается при использовании НМБН. На рис. 3.12 показаны зависимости десятичных логарифмов оценок

погрешностей  $\varepsilon_N(u)$ ,  $\varepsilon_N(Y)$  от числа узлов сетки  $N$  при  $N = N_1 = N_2$  (см. п. 2.4.2 и оценку (2.45)). Отметим, что в этой оценке зависимость  $\varepsilon_N$  от  $N$  является ключевой характеристикой сходимости приближений решений. В частности, если  $\lambda_N \rightarrow q < 1$  при  $N \rightarrow \infty$ , то характер сходимости является экспоненциальным. Именно такая ситуация наблюдалась при расчёте течения полимерной жидкости (см. рис. 3.12). Это позволяет получить решение с повышенной точностью вплоть до 8–10 значащих цифр при умеренных значениях параметров  $W$  и  $\beta$ . С ростом  $W$  и  $\beta$ , см. рис. 3.12, б экспоненциальный характер сходимости сохраняется, однако скорость сходимости замедляется ( $q$  приближается к единице).

**Таблица 14.** Сходимость МКНК

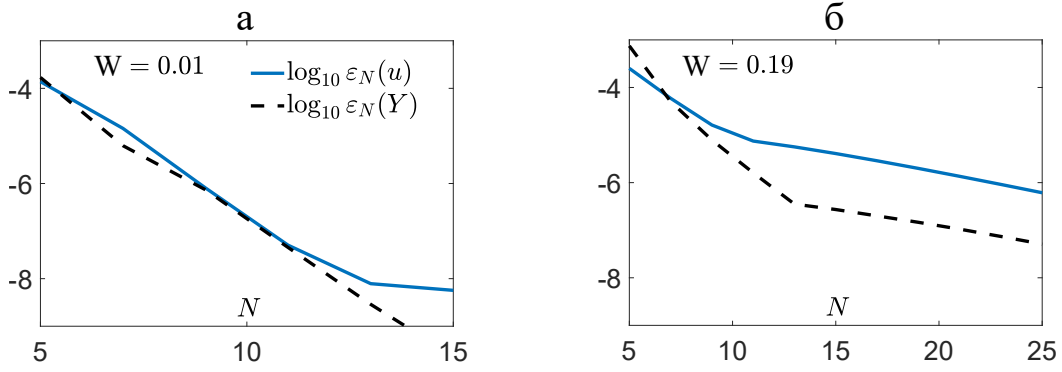
$N_1 \times N_2 / 2N_1 \times 2N_2$	$K = 2$				$K = 3$			
	$D_a^u$	$R$	$D_a^Y$	$R$	$D_a^u$	$R$	$D_a^Y$	$R$
40×10/80×20	1.24e-2	—	1.48e-1	—	6.44e-3	—	7.74e-2	—
80×20/160×40	1.98e-3	2.65	3.72e-2	1.99	8.25e-4	2.96	9.78e-3	2.98
160×40/320×80	1.40e-3	0.50	1.05e-2	1.82	6.85e-4	0.27	3.76e-3	1.38
$N_1 \times N_2 / 2N_1 \times 2N_2$	$K = 4$				$K = 5$			
	$D_a^u$	$R$	$D_a^Y$	$R$	$D_a^u$	$R$	$D_a^Y$	$R$
40×10/80×20	3.09e-3	—	4.01e-2	—	1.75e-3	—	2.17e-2	—
80×20/160×40	1.59e-3	0.96	1.75e-2	1.20	4.05e-4	2.11	4.54e-3	2.26
160×40/320×80	2.92e-4	2.44	3.18e-3	2.46	3.37e-4	0.27	3.80e-3	0.26

**Таблица 15.** Сходимость МКЭ

$2h/h$	$D_{fem}^u$	$R_{fem}$	$D_{fem}^Y$	$R_{fem}$
0.128 / 0.064	1.13e-2	—	6.45e-1	—
0.064 / 0.032	5.59e-3	1.012	3.32e-1	0.995
0.032 / 0.016	3.86e-3	0.534	3.35e-1	-0.143
0.016 / 0.008	1.24e-3	1.638	1.3e-2	4.778
0.008 / 0.004	1.02e-3	0.282	1.07e-2	0.284

**Этап 2. Исследование сходимости всех методов к единому решению.** Мы показали, что три разработанных метода демонстрируют сходимость при решении поставленной задачи. Следующий естественный шаг —





**Рис. 3.12.** Десятичные логарифмы оценок погрешностей численных решений, полученных НМБН:  $W = 0.01$  (а);  $W = 0.19$  (б)

показать, что приближённые решения, полученные тремя разными методами сходятся к одной и той же функции. Поскольку НМБН продемонстрировал наибольшую скорость сходимости (по этому поводу см. табл. 9), в качестве эталонного будем рассматривать решение НМБН, полученное при  $N_1 \times N_2 = 41 \times 41$ .

Табл. 16, 17 демонстрируют сходимость решений МКНК и МКЭ к решению НМБН с уменьшением размера ячеек и элементов соответственно.

**Таблица 16.** Сходимость МКНК к НМБН

$N_1 \times N_2$	$K = 2$				$K = 3$			
	$\tilde{D}_r^u$	$R$	$\tilde{D}_r^Y$	$R$	$\tilde{D}_r^u$	$R$	$\tilde{D}_r^Y$	$R$
40×10	5.80e-2	—	6.75e-2	—	2.63e-2	—	3.32e-2	—
80×20	1.03e-2	2.49	1.93e-2	1.81	5.39e-3	2.29	6.22e-3	2.42
160×40	6.69e-3	0.62	5.15e-3	1.91	2.00e-3	1.43	2.45e-3	1.34
320×80	3.54e-3	0.92	3.23e-3	0.67	2.90e-3	-0.54	3.36e-3	-0.46
$N_1 \times N_2$	$K = 4$				$K = 5$			
	$\tilde{D}_r^u$	$R$	$\tilde{D}_r^Y$	$R$	$\tilde{D}_r^u$	$R$	$\tilde{D}_r^Y$	$R$
40×10	1.30e-2	—	1.74e-2	—	7.97e-3	—	9.26e-3	—
80×20	7.81e-3	0.74	9.02e-3	0.95	2.19e-3	1.86	2.58e-3	1.84
160×40	1.33e-3	2.55	1.58e-3	2.51	8.16e-4	1.42	9.59e-4	1.43
320×80	1.06e-3	0.33	1.18e-3	0.42	1.63e-3	-1.00	1.93e-3	-1.01

**Этап 3. Исследование сходимости в широком диапазоне параметров модели.** Вопрос о реализуемости стационарных течений полимер-

**Таблица 17.** Сходимость МКЭ к НМБН

$h$	$\tilde{D}_r^u$	$R$	$\tilde{D}_r^Y$	$R$
0.128	5.72e-2	—	3.38e-1	—
0.064	3.76e-2	0.605	2.74e-1	0.305
0.032	2.43e-2	0.629	1.91e-1	0.524
0.016	1.09e-2	1.156	1.19e-2	4.001
0.008	5.0e-3	1.124	5.51e-3	1.111
0.004	8.18e-4	2.611	9.06e-4	2.604

ной жидкости в каналах эллиптических форм в зависимости от внешних условий и от реологии жидкости побудил нас провести детальное исследование влияния значений параметров модели на сходимость приближённых решений разработанных методов друг к другу. Исследования такого рода позволяют оценить чувствительность решений к малым возмущениям, которыми в данном контексте служат погрешности аппроксимации, возникающие при использовании конечномерных функциональных пространств. Для оценки вклада таких погрешностей были рассчитаны относительные отклонения решений МКНК от МКЭ, МКНК от НМБН и МКЭ от НМБН в зависимости от значений  $P_d$ ,  $W$ ,  $\beta$  и  $r_0$  (табл. 18–21).

**Таблица 18.** Результаты расчетов при различных  $P_d$ 

$P_d$	МКНК vs МКЭ		МКНК vs НМБН		МКЭ vs НМБН	
	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$
1	1.04e-3	1.19e-3	1.05e-3	1.21e-3	4.65e-4	5.24e-5
51	1.02e-3	3.57e-4	1.04e-3	3.03e-4	2.70e-4	2.61e-4
101	9.16e-4	3.40e-4	9.36e-4	3.45e-4	2.99e-4	2.29e-4

Отметим, что сходимость наблюдалась в широких диапазонах этих параметров, что является косвенным подтверждением существования и практической реализуемости соответствующих стационарных течений. Однако нужно заметить, что погрешность МКНК демонстрирует значительную чувствительность к параметру  $r_0$ . При уменьшении значений этого параметра отклонение решений МКНК от МКЭ и НМБН растёт, а при  $r_0 < 0.005$  метод перестаёт сходиться вовсе. МКЭ демонстрирует наибольшую чувствитель-

**Таблица 19.** Результаты расчетов при различных  $W$ 

$W$	МКНК vs МКЭ		МКНК vs НМБН		МКЭ vs НМБН	
	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$
0.01	1.04e-3	1.16e-3	1.06e-3	1.18e-3	4.67e-5	5.14e-5
0.11	6.36e-3	1.16e-3	1.06e-3	1.18e-3	6.34e-3	3.06e-4
0.19	1.55e-2	8.61e-3	1.08e-3	1.18e-3	1.35e-2	8.61e-3

**Таблица 20.** Результаты расчетов при  $W = 0.1$  и различных  $\beta$ 

$\beta$	МКНК vs МКЭ		МКНК vs НМБН		МКЭ vs НМБН	
	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$
0.01	1.04e-3	1.19e-3	1.05e-3	1.21e-3	4.65e-5	5.23e-5
0.08	7.3e-3	1.16e-3	1.06e-3	1.19e-3	2.92e-3	1.23e-4
0.15	2.95e-2	1.42e-3	1.08e-3	1.16e-3	1.64e-2	9.98e-4

**Таблица 21.** Результаты расчетов при различных  $r_0$ 

$r_0$	МКНК vs МКЭ		МКНК vs НМБН		МКЭ vs НМБН	
	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$
0.01	1.81e-2	2.18e-2	1.88e-2	2.09e-3	3.79e-5	2.17e-5
0.06	2.19e-3	2.46e-3	2.14e-3	2.39e-3	4.71e-5	2.39e-5
0.11	1.51e-4	1.78e-4	1.52e-4	1.81e-4	5.49e-5	1.97e-5
0.0001	—	—	—	—	5.63e-5	2.87e-5

ность к изменениям параметров  $W$  и  $\beta$ . С ростом значений этих параметров отклонения решений МКЭ от НМБН возрастают от характерных значений  $10^{-5}$  до  $10^{-2}$ . Рост значений  $W$  и  $\beta$  замедляет также скорость сходимости НМБН (см. рис. 3.12). Параметр, который в рассмотренном диапазоне оказал наименьшее влияние на отклонения, – безразмерный градиент давления в канале  $P_d$ .

Таким образом, анализ относительных отклонений решений различных методов позволяет заключить, что рост значений  $\beta$  и  $W$  ведёт к возмущению стационарных решений, и при некоторых предельных значениях стационарные решения теряют устойчивость или вовсе перестают существовать. Несмотря на то, что МКЭ и НМБН позволяют получить стационарные ре-

шения для предельно малых  $r_0$ , реализуемость таких течений на практике остаётся под вопросом. Отсутствие сходимости МКНК говорит о сильной чувствительности таких решений к любого рода возмущениям.

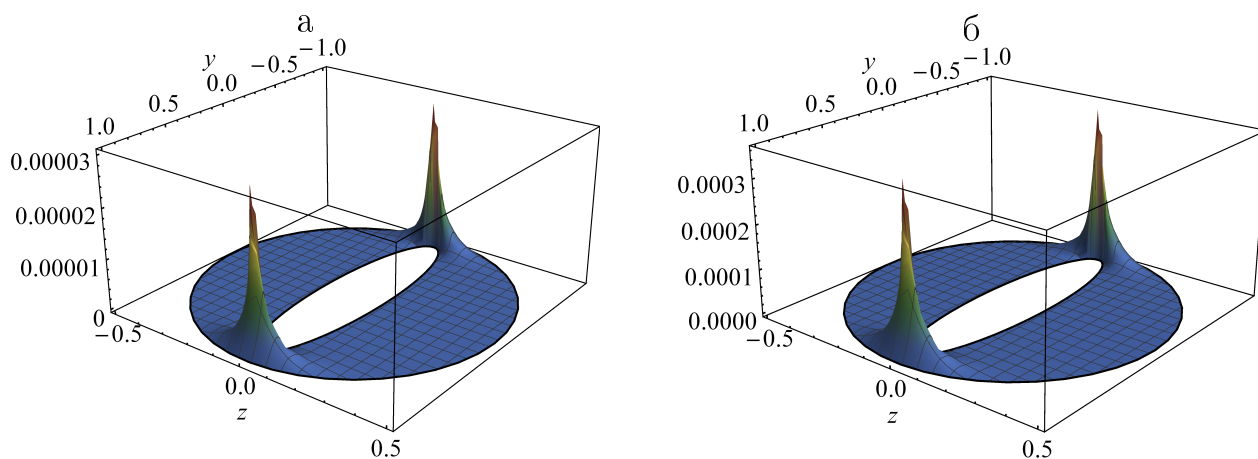
**Этап 4. Анализ особенностей полученных решений.** Механизм перехода от области параметров, в которых устойчивые стационарные решения существуют, к области неустойчивости, на наш взгляд, связан с формированием у искомого стационарного решения особенностей и эволюцией этих особенностей при изменении значений  $\beta$ ,  $W$  и  $r_0$ . В общем случае речь идёт об особых точках, лежащих в комплексной плоскости, координаты которых зависят от значений параметров, и при определённых значениях особые точки «выходят» в область решения задачи, при этом стационарное решение в классическом смысле перестаёт существовать. Более строгий анализ этого сценария дан ниже, в п. 3.5.4, при использовании точных решений модели, описывающих осесимметричные течения, см. также п. 3.6.2.

Охарактеризуем далее процесс разрушения стационарных решений без строгих доказательств с применением результатов п. 2.4.2. Из рис. 3.12 следует, что с точностью до ошибок округления действительных чисел НМБН даёт последовательность полиномиальных приближений искомого решения, погрешность которых убывает со скоростью близкой к экспоненциальной и характеризуется величиной  $q^N$ , где  $q < 1$  и  $|\log_{10} q|$  представляет тангенс угла наклона линий на рис. 3.12 при больших  $N$ . Следуя теореме Бернштейна (см. теорему I.7), констатируем, что искомые функции  $u(\alpha, \gamma)$  и  $Y(\alpha, \gamma)$ , как функции каждой переменной в отдельности, являются бесконечно гладкими и допускают аналитические продолжения в комплексную плоскость. Причём одно из этих продолжений имеет особую точку, лежащую на контуре эллипса Бернштейна с суммой полуосей  $\rho = 1/q$ . Наши исследования показывают, что с ростом значений  $W$  и  $\beta$  величина  $q$  увеличивается к единице (график логарифма погрешности стремится к горизонтальной прямой). Это означает, что особая точка приближается к области задачи, и при некоторых значениях параметров непрерывное стационарное решение перестаёт существовать.

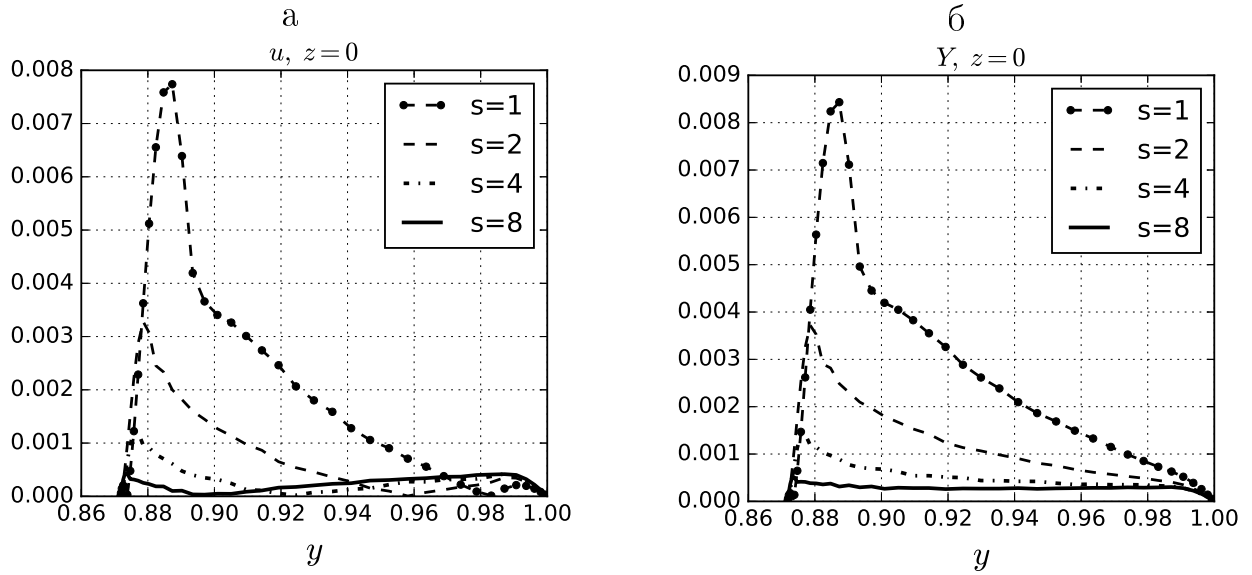
Итак, совпадения решений, полученных разными методами, подтверждает существование стационарного решения исходной задачи, а из теоремы Бернштейна следует, что при умеренных значениях  $W$  и  $\beta$  это решение, за-

писанное в эллиптической системе координат, является аналитической функцией. Однако приближения решения, полученные с помощью МКНК и МКЭ в декартовой системе координат, свидетельствуют о наличии существенных особенностей (пограничных слоёв) стационарного течения. Положения этих слоёв проще всего увидеть, если изобразить графики абсолютных отклонений решений, полученных с помощью МКНК и НМБН. Из рис. 3.13 видно, что максимальные отклонения достигаются в окрестностях точек  $A$  и  $B$ , отмеченных на рис. 3.7, а. В этих окрестностях отклонения на 1–2 порядка больше, чем в остальных точках области  $\tilde{\Omega}$ , что свидетельствует о наличии существенных особенностей. Их подробный анализ дан в [113].

Здесь отметим только, что МКНК и МКЭ имеют свои средства адаптации к таким особенностям. В МКНК можно адаптировать соотношения размеров ячеек, а в МКЭ можно сгущать сетку, варьируя параметр  $s$ , равный отношению размера  $h_{max}$  максимального элемента к размеру  $h_{min}$  минимального. Таким образом, при  $s = 1$  сетка является равномерной, а при  $s = 4$  сетка сгущается в 4 раза в окрестности точек  $A$  и  $B$ . Пример сетки со сгущением приведен на рис. 2.10, б. Табл. 22 демонстрирует уменьшение относительных отклонений решений МКЭ от НМБН при сгущении сетки. Этот эффект, который можно трактовать как уменьшение погрешности решения МКЭ при адаптации сетки, наглядно показан на рис. 3.14. Из этих расчётов видно, что оптимальное значение параметра  $s$  близко к восьми.



**Рис. 3.13.** Абсолютные отклонения численных результатов, полученных МКНК и НМБН для скорости (а) и температуры (б) при  $W = 0.01$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $r_0 = 0.11$ ,  $P_d = 10$



**Рис. 3.14.** Относительные отклонения решений МКЭ и НМБН в сечении  $z = 0$  при последовательном сгущении сетки МКЭ ( $s = 1, 2, 4, 8$ ):  $\tilde{D}_r^u$  (а),  $\tilde{D}_r^Y$  (б). Значения параметров  $W = 0.01$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $r_0 = 0.1$ ,  $P_d = 10$

**Таблица 22.** Относительные отклонения решений МКЭ и НМБН, в зависимости от степени сгущения сетки при различных значениях параметра  $P_d$

$h_{max}/h_{min}$	$P_d = 10$		$P_d = 51$		$P_d = 101$	
	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$	$\tilde{D}_r^u$	$\tilde{D}_r^Y$
0.02/0.02	1.27e-02	1.28e-02	1.27e-02	4.43e-03	1.18e-02	2.39e-03
0.02/0.01	7.17e-03	7.92e-03	7.17e-03	2.75e-03	6.71e-03	1.14e-03
0.02/0.005	1.83e-03	2.02e-03	1.83e-03	6.93e-04	1.71e-03	3.05e-04
0.02/0.0025	7.30e-04	8.06e-04	7.30e-04	2.81e-04	1.11e-03	3.17e-04
0.02/0.00125	4.57e-04	2.87e-04	4.61e-04	2.71e-04	1.07e-03	3.16e-04

### § 3.4. Нестационарные течения типа Пуазейля и их установление

В п. 3.2.2 показано, что уравнения построенной модели, описывающие стационарные пуазейлевские течения полимерной жидкости, допускают множественность решений. Эта множественность характеризуется тремя ветвями решения уравнения (3.35) – функции  $\sigma(\mu^2)$ . Более того, как видно из рис. 3.10, значения скорости и температуры, полученные при использова-

нии этих ветвей, могут отличаться в несколько раз. Возникает естественный вопрос: какое из трёх возможных решений краевой задачи для уравнений (3.33), (3.34) реализуется на практике? Для ответа на этот вопрос следует воспользоваться нестационарными уравнениями, полученными в п. 3.1.1. Для упрощения изложения в этом параграфе рассмотрим изотермический случай, зададим в уравнении (3.15) постоянный градиент давления  $P_d(t) \equiv \text{const}$  и будем искать численные решения уравнений (3.11), (3.12), (3.15) с нулевыми начальными данными:  $\alpha_{ij}|_{t=0} = u|_{t=0} \equiv 0$ , вплоть до выхода на стационарный режим течения при некотором  $t = t_s$ . Сопоставление скорости  $u(t_s, y, z)$  в стационарном режиме и решения соответствующей краевой задачи для уравнения (3.33), полученного при использовании разных ветвей функции  $\sigma_{1,2,3}(\mu^2)$ , покажет, какая ветвь описывает течение, реализующееся на практике.

### 3.4.1. Линеаризация уравнений

Для организации расчётов применим алгоритм, описанный в п. 2.1.2: введём сетку по времени с шагом  $\tau$  и узлами  $t_n = n\tau$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Обозначим  $u^n = u^n(y, z) = u(t_n, y, z)$ ,  $\alpha_{ij}^n = \alpha_{ij}^n(y, z) = \alpha_{ij}(t_n, y, z)$ , запишем уравнения (3.11), (3.12), (3.15) в изотермическом случае ( $Y \equiv 1$ ,  $\bar{\tau}_0 \equiv 1$ ) и аппроксимируем в них производные по времени разностными отношениями вида

$$u_t \approx \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau}, \quad u_{tt} \approx \frac{u^{n+1} - 2u^n + u^{n-1}}{\tau^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Далее необходимо провести линеаризацию указанных уравнений по Ньютону относительно неизвестных функций  $\alpha_{ij}$  и  $u$  и на каждом шаге по времени осуществлять итерации по нелинейности. Невязку этих итераций зададим равной  $10^{-10}$ . Запишем линеаризованные уравнения для функций  $\alpha_{ij}$  в виде

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_{11}^{n+1} - \alpha_{11}^n}{\tau} &= -\text{Re} \left[ \left( \frac{\bar{k}}{3} + 2\beta \right) \alpha_{11}^n + \frac{\bar{k}}{3} I^n + \varkappa^2 \right] \alpha_{11}^{n+1} + \\ &+ 2(\alpha_{12}^n u_y^n + \alpha_{13}^n u_z^n) + \frac{\text{Re} \bar{k}}{3} (\alpha_{11}^n)^2 - \beta \text{Re} [(\alpha_{12}^n)^2 + (\alpha_{13}^n)^2 - (\alpha_{11}^n)^2], \\ \frac{\alpha_{22}^{n+1} - \alpha_{22}^n}{\tau} &= - \left[ K_I^n + \text{Re} \left( \frac{\bar{k}}{3} + 2\beta \right) \alpha_{22}^n \right] \alpha_{22}^{n+1} + \\ &+ \text{Re} \left( \frac{\bar{k}}{3} (\alpha_{22}^n)^2 + \beta [(\alpha_{22}^n)^2 - (\alpha_{12}^n)^2 - (\alpha_{23}^n)^2] \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\alpha_{33}^{n+1} - \alpha_{33}^n}{\tau} &= - \left[ K_I^n + \operatorname{Re} \left( \frac{\bar{k}}{3} + 2\beta \right) \alpha_{33}^n \right] \alpha_{33}^{n+1} + \\
&\quad + \operatorname{Re} \left( \frac{\bar{k}}{3} (\alpha_{33}^n)^2 + \beta [(\alpha_{33}^n)^2 - (\alpha_{13}^n)^2 - (\alpha_{23}^n)^2] \right), \\
\frac{\alpha_{12}^{n+1} - \alpha_{12}^n}{\tau} &= [\beta \operatorname{Re} \alpha_{33}^n - \tilde{K}_I^n] \alpha_{12}^{n+1} + \alpha_2^n u_y^n + \alpha_{23}^n u_z^n - \beta \operatorname{Re} \alpha_{13}^n \alpha_{23}^n, \\
\frac{\alpha_{13}^{n+1} - \alpha_{13}^n}{\tau} &= [\beta \operatorname{Re} \alpha_{22}^n - \tilde{K}_I^n] \alpha_{13}^{n+1} + \alpha_{23}^n u_y^n + \alpha_3^n u_z^n - \beta \operatorname{Re} \alpha_{12}^n \alpha_{23}^n, \\
\frac{\alpha_{23}^{n+1} - \alpha_{23}^n}{\tau} &= [\beta \operatorname{Re} \alpha_{11}^n - \tilde{K}_I^n] \alpha_{23}^{n+1} - \beta \operatorname{Re} \alpha_{12}^n \alpha_{13}^n,
\end{aligned}$$

где  $I^n = \alpha_{11}^n + \alpha_{22}^n + \alpha_{33}^n$ ,  $K_I^n = \operatorname{Re} \left( \varkappa^2 + \frac{\bar{k}}{3} I^n \right)$ ,  $\tilde{K}_I^n = K_I^n + \beta \operatorname{Re} I^n$ ,  $\alpha_i^n = \alpha_{ii}^n + \varkappa^2$ ,  $i = 2, 3$ ,  $u_y^n, u_z^n$  – производные функции  $u(t, y, z)$  при  $t = t_n$ .

Для поиска функции  $u^{n+1}(y, z)$  из (3.15) несложно вывести следующее линеаризованное уравнение:

$$\begin{aligned}
\frac{u^{n+1} - 2u^n + u^{n-1}}{\tau^2} + \operatorname{Re} \varkappa^2 \left( \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} \right) - \varkappa^2 (u_{yy}^{n+1} + u_{zz}^{n+1}) &= \alpha_{22}^n u_{yy}^n + \\
+ \alpha_{33}^n u_{zz}^n + 2\alpha_{23}^n u_{yz}^n - \operatorname{Re} \left( \frac{\bar{k}}{3} + \beta \right) I^n \left( \frac{u^n - u^{n-1}}{\tau} \right) &+ \tilde{K}_I^n P_d(t_n) + F^n, \tag{3.55}
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
F^n &= [(\alpha_2^n)_y + (\alpha_{23}^n)_z] u_y^n + [(\alpha_{23}^n)_y + (\alpha_3^n)_z] u_z^n - \operatorname{Re} \left( \frac{\bar{k}}{3} + \beta \right) [I_y^n \alpha_{12}^n + I_z^n \alpha_{13}^n] - \\
&\quad - \beta \operatorname{Re} [(l_{22}^n)_z + (l_{33}^n)_y] + P'_d(t_n),
\end{aligned}$$

$I_{y,z}^n = (\alpha_{11}^n)_{y,z} + (\alpha_{22}^n)_{y,z} + (\alpha_{33}^n)_{y,z}$  – производные от функции  $I^n$ ,  $(l_{22}^n)_z = (\alpha_{12}^n \alpha_{23}^n - \alpha_{13}^n \alpha_{22}^n)_z$ ,  $(l_{33}^n)_y = (\alpha_{13}^n \alpha_{23}^n - \alpha_{12}^n \alpha_{33}^n)_y$ ,  $P'_d(t_n) = \frac{dP_d(t)}{dt}|_{t=t_n}$ . Отметим также, что при записи (3.55) использована аппроксимация

$$\tilde{K}_I u_t = \operatorname{Re} \varkappa^2 u_t + \operatorname{Re} \left( \frac{\bar{k}}{3} + \beta \right) I^n u_t \approx \operatorname{Re} \varkappa^2 \left( \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} \right) + \operatorname{Re} \left( \frac{\bar{k}}{3} + \beta \right) I^n \left( \frac{u^n - u^{n-1}}{\tau} \right).$$

Для приближения неизвестных функций в прямоугольнике  $\Omega$  (см. рис. 3.1) используем прямое произведение интерполяционных полиномов вида (1.20), затем, следуя методу из § 1.3 и п. 1.3.4, составим матрицы, аппроксимирующие первые и вторые производные по  $y$  и  $z$  соответственно. Отметим, что при



аппроксимации функций  $\alpha_{ij}^n$ ; выражения  $\sigma_j^1(\tilde{y})$  и  $\sigma_k^1(\tilde{z})$  в формуле (1.20) следует опустить. Матрицы, содержащие значения функций  $\alpha_{ij}^n$  и  $u^n$ , обозначим  $\Upsilon_{ij}^n$ ,  $U^n$  соответственно. В итоге, отбрасывая погрешности аппроксимации, приходим к линейным матричным уравнениям для выражения матриц  $\Upsilon_{ij}^{n+1}$ ,  $U^{n+1}$  через матрицы  $\Upsilon_{ij}^n$ ,  $U^n$ . Элементы  $\Upsilon_{ij}^{n+1}$  выражаются явно. Для выражения  $U^{n+1}$  необходимо использовать алгоритм из п. 2.1.2. Подробное изложение указанных аппроксимаций и решения задач линейной алгебры дано в [175].

### 3.4.2. Численный анализ установления нестационарных течений

Нестационарная задача для уравнений (3.11), (3.12), (3.15) в изотермическом случае решалась с нулевыми начальными данными и постоянным перепадом давления  $P_d(t) \equiv P_d = \text{const}$ . С применением алгоритма, описанного в п. 2.1.1, основанного на методе установления, при  $P_d = \text{const}$  решалась нелинейная стационарная задача (3.33). Отметим, что сходимость метода установления достигается только при использовании определённых ветвей решения  $\sigma(\mu)$  уравнения (3.35). Какие именно ветви обеспечивают сходимость, и какая ветвь соответствует предельному решению нестационарной задачи для уравнений (3.11), (3.12), (3.15), зависит от параметров модели.

В табл. 23 приведены описание и диапазоны значений основных параметров модели и алгоритма, использованные в расчётах. Обозначим время выхода течения на стационарный режим величиной  $t^*$ , т. е.  $t^* = n^* \tau$ , где  $n^*$  – номер итерации, на которой впервые реализуются условия стабилизации:

$$\frac{\|U^{n^*} - U^{n^*-1}\|}{\tau} \leq \varepsilon_{SS}, \quad \frac{\|\Upsilon_{ij}^{n^*} - \Upsilon_{ij}^{n^*-1}\|}{\tau} \leq \varepsilon_{SS}, \quad i = 1, 2, 3, \quad j = \overline{1, i},$$

$\varepsilon_{SS}$  – малое число. В проведённых экспериментах установлено, что  $t^*$  практически не зависит от параметров  $K$ ,  $M$  и  $\tau$ . Относительное отклонение нестационарной скорости течения в момент времени  $t^*$  от ближайшего решения стационарной задачи (3.33) обозначим  $D_u(y, z)$ . В экспериментах эта величина считалась как относительная разность двух массивов, содержащих значения соответствующих скоростей в узлах  $(y_j^{\text{ch}}, z_k^{\text{ch}})$  полинома вида (1.20).

В численных экспериментах установлено, что в случае  $c_k = 1$  и  $\beta < 0.5$  (именно такие значения использованы в [36, 47]) сходимость метода установления в стационарной задаче имеет место только при  $\sigma = \sigma_{1,3}$ , причём предель-

**Таблица 23.** Параметры модели и численного метода

Параметр	Описание	Значение
$\beta$	Феноменологический параметр	0.01–0.9
$c_k = k/\beta$	Феноменологический параметр	0.5–20
$P_d$	Безразмерный перепад давления	1–330
$W$	Число Вайсенберга	0.01–3
$2r$	Безразмерная ширина канала	0.02–2
$K, M$	Число узлов сетки вдоль осей $y$ и $z$	21–31
$\tau$	Шаг сетки по времени	0.0015–0.1
$\varepsilon_{SS}$	Погрешность стабилизации решения	$10^{-8}$

ное решение нестационарной задачи соответствует ветви  $\sigma = \sigma_3$ . В табл. 24 для этого случая приведены значения  $t^*$  и  $\|D_u(y, z)\|$  при вариации параметров  $W, P_d, r$  в некоторой окрестности предельных значений этих параметров. Под предельными здесь понимаются значения, при переходе через которые метод установления при решении стационарной задачи перестаёт сходиться для всех ветвей  $\sigma_{1,2,3}(\mu^2)$ . Эти значения найдены приближённо в расчётах и приведены в последних строках табл. 24, 25 с индексом *lim*. В табл. 25 указаны значения  $t^*$  и  $\|D_u(y, z)\|$  при вариации  $c_k$  и  $\beta$ .

Видно, что при значениях параметров  $W$  и  $P_d$ , близких к предельным, зависимость  $t^*$  от этих значений носит нелинейный характер. Время выхода на стационарный режим наиболее чувствительно к значению  $W$ . При  $W$ , близких к  $W^{lim}$ , и малых  $t$  имеют место колебания значений скорости и для установления течения требуется достаточно много времени (см. рис. 3.18). При уменьшении ширины канала  $r$  течение устанавливается намного быстрее и для бóльших значений  $W$  и  $P_d$ , однако относительное отклонение  $\|D_u(y, z)\|$  при этом возрастает (рис. 3.15, б). При достаточно малых  $r$  ( $r < 0.05$ ) время  $t^*$  практически не зависит от  $r$ .

Отметим, что зависимость  $t^*$  от  $\beta$  близка к линейной, и величина  $\|D_u(y, z)\|$  при  $\beta \rightarrow \beta^{lim}$  мало меняется. Интересная картина наблюдается при вариации  $c_k$  (см. табл. 25): отклонения  $\|D_u(y, z)\|$  при изменении  $c_k$  в широких диапазонах остаются малыми за исключением окрестности некоторой точки (в данном случае точки  $c_k \approx 1.52$ ), где они резко возрастают (см. рис. 3.15, в). Такая особенность связана с *переключением установившегося решения нестациона-*

нарной задачи с решения, соответствующего ветви  $\sigma_3$ , на решение, соответствующее ветви  $\sigma_1$ , стационарной задачи. Этот важный эффект, который далее будем именовать «переключение  $3 \rightarrow 1$ », обсудим чуть ниже.

**Таблица 24.** Значения  $t^*$  и  $\|D_u(y, z)\|$  при  $\beta = 0.1$ ,  $c_k = 1$  и вариации параметров  $W$ ,  $P_d$ ,  $r$

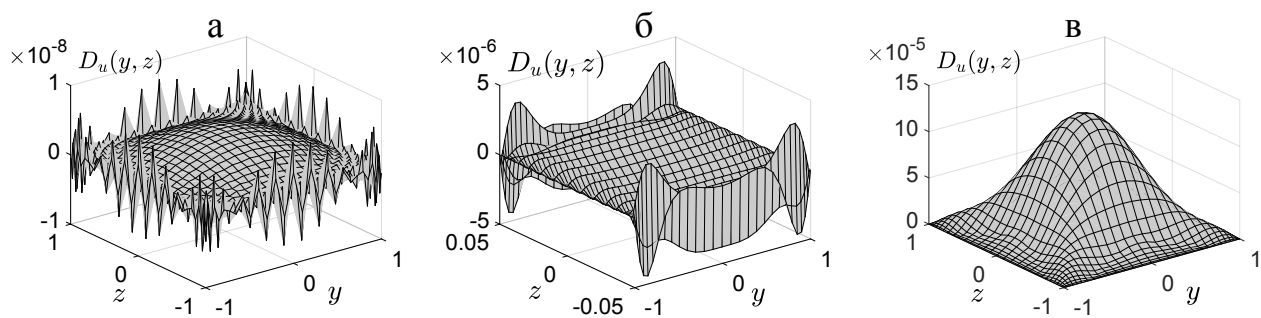
Вариация $W$ при $P_d = 1, r = 1$			Вариация градиента $P_d$ при $W = 0.01, r = 1$			Вариация $r$ при $P_d = 200, W = 0.05$		
$W$	$t^*$	$\ D_u(y, z)\ $	$P_d$	$t^*$	$\ D_u(y, z)\ $	$r$	$t^*$	$\ D_u(y, z)\ $
1.5	41.75	$6.23 \times 10^{-9}$	200	9.1	$1.32 \times 10^{-8}$	0.025	1.446	$4.49 \times 10^{-6}$
2.5	61.95	$2.62 \times 10^{-8}$	300	14.88	$4.62 \times 10^{-8}$	0.05	1.434	$1.1 \times 10^{-5}$
3	108.65	$4.64 \times 10^{-8}$	330	19.09	$5.31 \times 10^{-8}$	0.1	1.584	$1.32 \times 10^{-6}$
$W^{lim} \approx 3.4$			$P_d^{lim} \approx 335$			$r^{lim} \approx 0.115$		

**Таблица 25.** Значения  $t^*$  и  $\|D_u(y, z)\|$  при  $W = 0.01$ ,  $r = 1$ ,  $P_d = 20, 200$  и вариации параметров  $\beta$ ,  $c_k$

Вариация $\beta$ при $P_d = 200, c_k = 1$			Вариация $c_k$ при $P_d = 20, \beta = 0.37$		
$\beta$	$t^*$	$\ D_u(y, z)\ $	$c_k$	$t^*$	$\ D_u(y, z)\ $
0.15	10.4	$2.58 \times 10^{-8}$	1	5.1	$3.32 \times 10^{-10}$
0.2	13.32	$4.39 \times 10^{-8}$	1.52	5.1	$9.91 \times 10^{-5}$
0.26	18.12	$6.69 \times 10^{-8}$	2	5.15	$3.35 \times 10^{-10}$
$\beta^{lim} \approx 0.267$			неограничено		

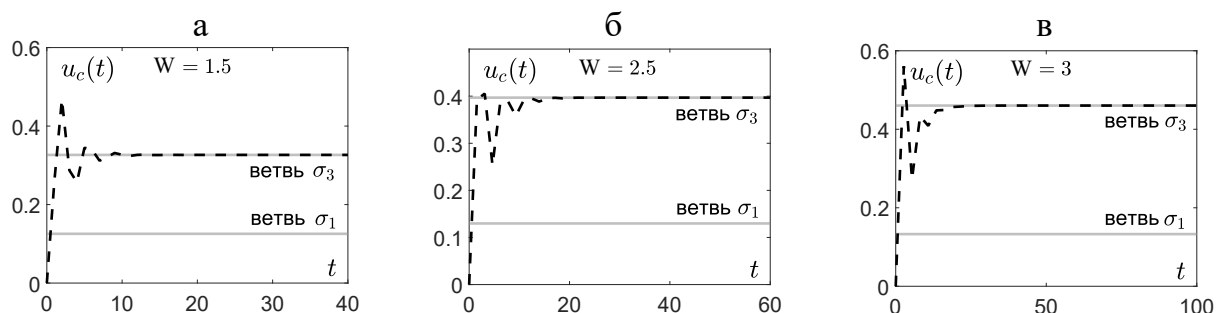
На рис. 3.15 для некоторых режимов течения показаны значения относительных отклонений  $D_u(y, z)$  предельных решений нестационарной задачи от решений стационарной задачи. В большинстве случаев отклонения имеют высокочастотные колебания, амплитуда которых возрастает в окрестности границ, достигая значений порядка  $10^{-10}$ – $10^{-8}$  (см. рис. 3.15, а). Проведённые эксперименты позволяют заключить, что такой характер поведения  $D_u(y, z)$  связан с вычислительной погрешностью и значениями  $K$ ,  $M$  и  $\varepsilon_{SS}$ . Однако в некоторых случаях наблюдаются конкретные тенденции в поведении  $D_u(y, z)$ . Например, рост этих значений при уменьшении ширины канала в окрестности стенок, имеющих большую длину (см. рис. 3.15, б); или рост отклонений в центре канала при переключении  $3 \rightarrow 1$  (см. рис. 3.15, в).

На рис. 3.16, 3.17 показаны зависимости скорости течения в центре канала от времени  $u_c(t) = u(t, 0, 0)$  (пунктир), полученные при решении нестационарной задачи для уравнений (3.11), (3.12), (3.15) с вариацией  $W$  и  $c_k$ . На этих



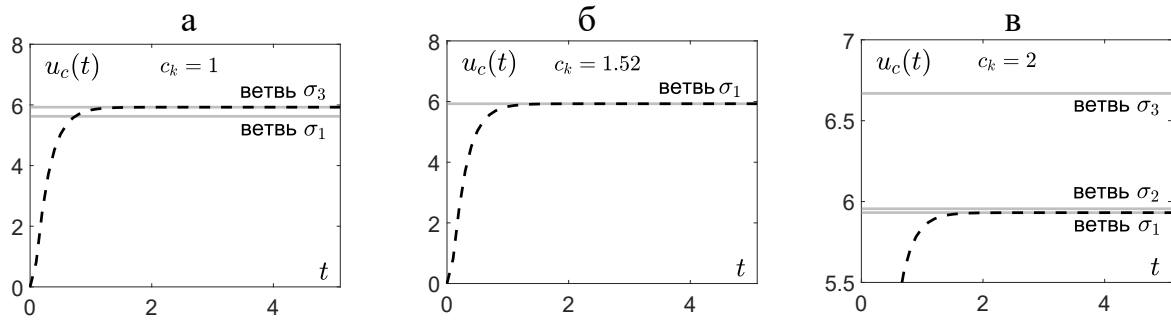
**Рис. 3.15.** Относительные отклонения  $D_u(y, z)$  при: а)  $P_d = 1$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $c_k = 1$ ,  $r = 1$ ,  $W = 1.5$  (стандартная ситуация); б)  $P_d = 200$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $c_k = 1$ ,  $W = 0.05$ ,  $r = 0.05$  (узкий канал); в)  $P_d = 20$ ,  $W = 0.01$ ,  $r = 1$ ,  $\beta = 0.37$ ,  $c_k = 1.52$  (переключение  $3 \rightarrow 1$  установившегося решения нестационарной задачи)

же графиках серыми сплошными линиями отмечены решения стационарной задачи (3.33) в точке  $y = 0$ ,  $z = 0$ , полученные при использовании тех ветвей функции  $\sigma(\mu)$ , которые обеспечивают сходимость метода установления. Значения параметров рассмотренных режимов см. в табл. 24, 25.

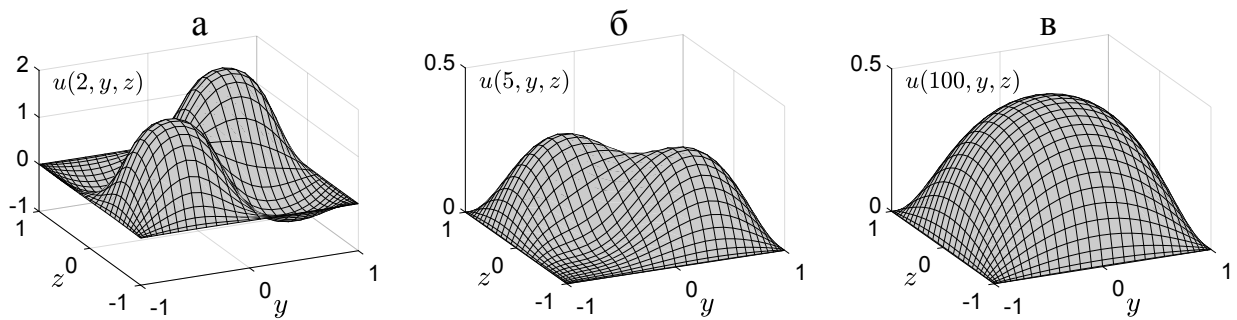


**Рис. 3.16.** Значения скорости  $u_c(t)$ , полученные при решении нестационарной задачи (пунктир), и соответствующие значения решений стационарной задачи в точке  $y = 0$ ,  $z = 0$  (серые линии) при  $P_d = 1$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $c_k = 1$ ,  $r = 1$  и разных  $W$ : а)  $W = 1.5$ , б)  $W = 2.5$ , в)  $W = 3$

Отметим, что колебания значений на рис. 3.16 характеризуют сложный процесс установления течения при достаточно больших  $W$ . Более подробно этот процесс прослеживается на рис. 3.18, где приведены распределения скорости  $u(t, y, z)$  в различные моменты времени  $t$ . Видно, что на начальных этапах (при малых  $t$ ) имеют место сильные колебания решения, а также течения в направлении, противоположном градиенту давления (области отрицательных значений скорости видны на рис. 3.18, а). При  $t \approx 8$  сильные колебания затухают и течение плавно выходит на стационарный режим.



**Рис. 3.17.** Значения скорости  $u_c(t)$  в решении нестационарной задачи (пунктир) и соответствующие значения решений стационарной задачи в точке  $y = 0, z = 0$  (серые линии) при  $W = 0.01, \beta = 0.37, P_d = 20, r = 1$  и разных  $c_k$ : а)  $c_k = 1$ , б)  $c_k = 1.52$ , в)  $c_k = 2$



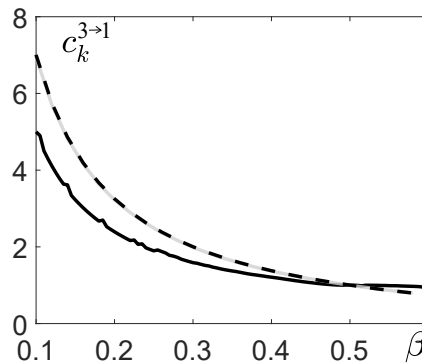
**Рис. 3.18.** Значения скорости  $u(t, y, z)$ , рассчитанные при  $P_d = 1, \beta = 0.1, c_k = 1, r = 1$  и  $W = 3$  в различные моменты времени: а)  $t = 2$ , б)  $t = 5$ , в)  $t = 100$

Рис. 3.17 показывает, что количество решений стационарной задачи (3.33), которые удаётся получить с помощью метода установления, меняется в зависимости от параметров задачи. Существенное влияние при этом оказывают параметры  $\beta$  и  $c_k$ . Причём при определённом соотношении этих параметров происходит переключение  $3 \rightarrow 1$ .

Более конкретно, при значениях параметров  $P_d = 20, W = 0.01, r = 1, \beta = 0.37$  и  $c_k < 1.515$  методом установления удаётся получить два стационарных решения, соответствующие ветвям  $\sigma_1, \sigma_3$ , при этом устойчивое решение соответствует ветви  $\sigma_3$  (см. рис. 3.17, а). При  $c_k \approx 1.515$  метод установления перестаёт сходиться для  $\sigma = \sigma_3$ , и происходит переключение  $3 \rightarrow 1$ . В диапазоне  $1.515 < c_k < 1.528$  удаётся получить единственное решение стационарной задачи для  $\sigma = \sigma_1$  (см. рис. 3.17, б). В диапазоне  $1.528 < c_k < 1.532$  – два решения для  $\sigma = \sigma_{1,2}$ . При  $c_k > 1.532$  – три решения для всех  $\sigma = \sigma_{1,2,3}$  (см. рис. 3.17, в). При этом для  $c_k > 1.515$  устойчивым остаётся решение, соответ-

ствующее ветви  $\sigma_1$ . Подчеркнём, что неравенства, указанные в этом примере, были получены в расчётах и являются приближёнными. Заметим, что описанный характер исчезновения и возникновения численных решений стационарной задачи при увеличении  $c_k$ , а также переключения  $3 \rightarrow 1$  сохраняется при вариации других параметров задачи.

Обозначим  $c_k^{3 \rightarrow 1}$  значение  $c_k$ , при котором происходит переключение  $3 \rightarrow 1$ . На рис. 3.19 показан график зависимости  $c_k^{3 \rightarrow 1}$  от  $\beta$  при различных значениях параметра  $W$ . Из рисунка видно, что при малых значениях  $W$  кривые  $c_k^{3 \rightarrow 1}(\beta)$  практически совпадают (серая и пунктирная линии), однако при увеличении  $W$  кривая меняется. Аналогичная картина наблюдается при увеличении  $P_d$ .



**Рис. 3.19.** Кривые  $c_k^{3 \rightarrow 1}(\beta)$  при  $P_d = 1$ ,  $r = 1$  и различных  $W$ :  $W = 0.01$  (пунктир),  $W = 0.1$  (серая линия),  $W = 1$  (чёрная линия)

Обозначим символом  $c_k^{1,2,3}$  минимальное значение параметра  $c_k$ , при котором стационарная задача имеет три решения, соответствующие ветвям  $\sigma_{1,2,3}$ , и рассмотрим зависимость  $c_k^{1,2,3}(\beta)$ . Из примера, приведённого выше, можно заключить, что  $c_k^{1,2,3}(0.37) \approx 1.532$ . При проведении вычислений установлено, что линия  $c_k^{1,2,3}(\beta)$  практически не меняется при вариации других параметров задачи и с высокой точностью аппроксимируется гиперболой  $c_k^{1,2,3}(\beta) \approx 3/(4\beta) - 0.5$ . График этой гиперболы визуально неотличим от серой линии на рис. 3.19. При уменьшении параметров  $W$  и  $P_d$  кривые перехода  $c_k^{3 \rightarrow 1}(\beta)$  стремятся к этой гиперболе снизу. При приближении значений  $W$  и  $P_d$  к предельным кривая  $c_k^{3 \rightarrow 1}(\beta)$  существенно отдаляется от  $c_k^{1,2,3}(\beta)$  и меняет форму. При малых значениях  $W$  и  $P_d$  и вариации  $r$  в широких диапазонах кривые  $c_k^{3 \rightarrow 1}(\beta)$  остаются в окрестности  $c_k^{1,2,3}(\beta)$ .

Нужно заметить, что реализуемость стационарного течения существенно

зависит от начальных данных. При проведении экспериментов здесь использованы нулевые начальные данные (3.16). Однако, если задать начальную функцию для скорости с достаточно большими значениями в центре канала либо функцию, несогласованную с граничными условиями, стационарное течение типа Пуазейля не реализуется.

Исследования, аналогичные описанным выше, были проведены и для пуазейлевских течений в каналах с эллиптическими сечениями [262]. Полученные результаты во многом соответствуют приведённым выше.

В качестве важных итогов этого параграфа отметим, во-первых, что в большинстве случаев установившиеся решения нестационарной задачи с высокой точностью (до 8–10 знаков) совпадают с решениями стационарной задачи, полученной при использовании ветви  $\sigma_1$  или  $\sigma_3$  из (3.36), что говорит о корректности всех проведённых выкладок и высокой точности разработанных численных методов. Во-вторых, наибольшие отклонения указанных решений наблюдаются при переключении  $3 \rightarrow 1$ , что связано с наличием точек ветвления в функциях (3.36), приближающихся к области решения задачи. В соответствии с классическими оценками погрешности (см. теорему I.16) при приближении особой точки к области задачи скорость сходимости используемых приближений существенно замедляется, что сказывается на указанных отклонениях. В-третьих, обнаруженный эффект переключения решений обусловлен множественностью стационарных состояний полученной модели (см. § 0.2 введения). Этот эффект связан с тем, что течения полимеров, в которых вклады изотропной составляющей сопротивления внешней среды превосходят вклады анизотропной составляющей ( $k > \beta$ ), существенно отличаются от течений полимеров с противоположными свойствами ( $k < \beta$ ). Адекватное моделирование предполагает учёт этих различий.

### **§ 3.5. Точные решения для течений в цилиндрическом канале, их существование и устойчивость**

Выше был проведён анализ течений типа Пуазейля и их установления, приводящий к задачам с двумя независимыми переменными в сечении канала. В настоящем параграфе рассмотрены осесимметричные постановки задач

о течении полимерной жидкости в цилиндрическом канале, решения которых можно найти в аналитическом виде. Такие решения очень полезны. В частности, они позволяют конструктивно описать процесс разрушения (потери устойчивости) ламинарного течения типа Пуазейля, что, как правило, инициирует ламинарно-турбулентный переход в течениях полимеров с прямыми линиями тока, причины которого до сих пор установлены не были, см. § 0.1 введения. Согласно критерию, полученному ниже, ключевую роль в указанном процессе с точки зрения механики играют размер и ориентация макромолекул полимерной жидкости, с точки зрения математики – особые точки найденных решений.

Ниже будут приведены ограничения на значения параметров модели, обеспечивающие существование действительных стационарных решений, а также проведён численный анализ сходимости нестационарных решений к стационарным. Показано, что в ряде случаев условия существования совпадают с условиями сходимости. Полученные соотношения на числа Рейнольдса и Вайсенберга, обеспечивающие существование и сходимость решений, соответствуют критериям, независимо обнаруженным в работах [186, 187] (более детальное обсуждение см. в п. 3.5.4).

В изотермическом случае при отсутствии магнитного и гравитационного полей система (3.1)–(3.5) может быть записана в виде

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \quad (3.56)$$

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} + \nabla P = \operatorname{div} \Pi, \quad (3.57)$$

$$\frac{1}{W} \Pi + \overset{\nabla}{\Pi} = \frac{2}{W \operatorname{Re}} D - \left( \operatorname{Re} \frac{k - \beta}{3} (\operatorname{tr} \Pi) \Pi + \beta \operatorname{Re} \Pi^2 \right). \quad (3.58)$$

В этом параграфе используем (3.56)–(3.58) для моделирования течений типа Пуазейля в канале цилиндрической формы с круглым сечением (рис. 3.20). Для описания таких течений удобно, во-первых, перейти в цилиндрическую систему координат  $(r, \varphi, z)$ , что после введения обозначения

$$\Pi = \begin{pmatrix} a_{rr} & a_{r\varphi} & a_{rz} \\ a_{\varphi r} & a_{\varphi\varphi} & a_{\varphi z} \\ a_{zr} & a_{z\varphi} & a_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.59)$$



приводит к таким выражениям для дифференциальных операторов модели:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + u\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial r} + \frac{v}{r}\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial\varphi} + w\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial z} + \mathbf{q}, \quad \mathbf{q} = \left(-\frac{v^2}{r}, \frac{uv}{r}, 0\right)^T, \quad (3.60)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial\varphi} + \frac{\partial w}{\partial z}, \quad \frac{d\alpha_{\Pi}}{dt} = \frac{\partial\alpha_{\Pi}}{\partial t} + u\frac{\partial\alpha_{\Pi}}{\partial r} + \frac{v}{r}\frac{\partial\alpha_{\Pi}}{\partial\varphi} + w\frac{\partial\alpha_{\Pi}}{\partial z}, \quad (3.61)$$

где  $\alpha_{\Pi}$  – любая из компонент тензора  $\Pi$ ,

$$\operatorname{div}\Pi = \begin{pmatrix} \frac{a_{rr}}{r} + \frac{\partial a_{rr}}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial a_{r\varphi}}{\partial\varphi} + \frac{\partial a_{rz}}{\partial z} - \frac{a_{\varphi\varphi}}{r} \\ 2\frac{a_{r\varphi}}{r} + \frac{\partial a_{r\varphi}}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial a_{\varphi\varphi}}{\partial\varphi} + \frac{\partial a_{\varphi z}}{\partial z} \\ \frac{a_{rz}}{r} + \frac{\partial a_{rz}}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial a_{\varphi z}}{\partial\varphi} + \frac{\partial a_{zz}}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (3.62)$$

$$\nabla\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial r} & \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} & \frac{\partial w}{\partial r} \\ \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial\varphi} & \frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial\varphi} + \frac{u}{r} & \frac{1}{r}\frac{\partial w}{\partial\varphi} \\ \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial v}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}. \quad (3.63)$$

Во-вторых, в соответствии с п. 3.1.1 для описания течений типа Пуазейля следует искать частное решение исходной системы вида

$$\begin{cases} u = v \equiv 0, & w = \hat{w}(t, r, \varphi), \\ P = \hat{P}(t, r, \varphi, z) = \mathcal{S}(t, r, \varphi) - \hat{P}_d(t)z, \\ a_{ij} = \hat{a}_{ij}(t, r, \varphi), \quad i, j \in \{r, \varphi, z\}. \end{cases} \quad (3.64)$$

Решение (3.64) соответствует течению полимерной жидкости под действием перепада давления  $\Delta P(t)$  вдоль оси канала  $r = 0$ . Здесь

$$\frac{\partial \hat{P}}{\partial z} = -\hat{P}_d(t) = -\frac{\Delta P(t)}{\rho u_H^2 h},$$

где « $-\Delta P(t)/(\rho u_H^2 h)$ » – безразмерный перепад давления на отрезке  $hl$  (см. рис. 3.20), причём размерная величина  $\Delta P(t) > 0$ .

В дальнейших выкладках опустим крышки над новыми переменными, определёнными в (3.64). После преобразований (3.56)–(3.58) с учётом (3.59)–(3.64) получаем систему уравнений:

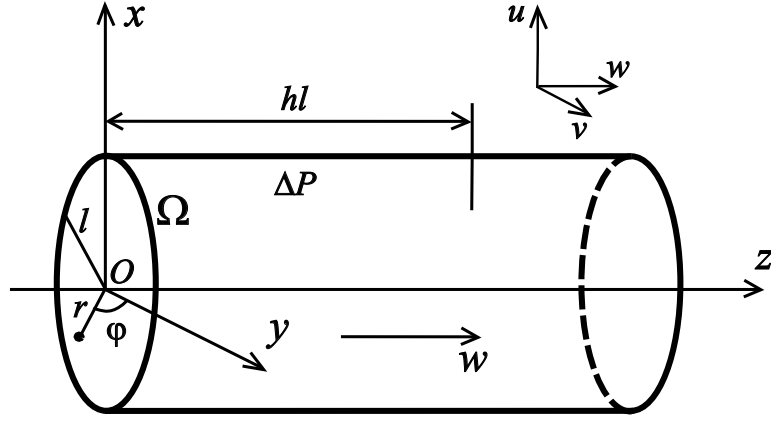


Рис. 3.20. Цилиндрический канал. Декартова и полярная системы координат

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\partial a_{rz}}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial a_{\varphi z}}{\partial \varphi} - \frac{1}{r} a_{rz} = P_d(t), \quad (3.65)$$

$$\frac{\partial a_{rz}}{\partial t} - \left( A_r \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{a_{r\varphi}}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi} \right) + \mathcal{L}_{rz} = 0, \quad (3.66)$$

$$\frac{\partial a_{\varphi z}}{\partial t} - \left( a_{r\varphi} \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{A_\varphi}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi} \right) + \mathcal{L}_{\varphi z} = 0, \quad (3.67)$$

$$\frac{\partial a_{zz}}{\partial t} - 2 \left( a_{rz} \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{a_{\varphi z}}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi} \right) + \mathcal{L}_{zz} = 0, \quad (3.68)$$

$$\frac{\partial a_{rr}}{\partial t} + \mathcal{L}_{rr} = 0, \quad \frac{\partial a_{\varphi\varphi}}{\partial t} + \mathcal{L}_{\varphi\varphi} = 0, \quad \frac{\partial a_{r\varphi}}{\partial t} + \mathcal{L}_{r\varphi} = 0, \quad (3.69)$$

где

$$\mathcal{L}_{rr} = K_I a_{rr} + \operatorname{Re} \beta \|\mathbf{a}_r\|^2, \quad \mathbf{a}_r = (a_{rr}, a_{r\varphi}, a_{rz}),$$

$$\mathcal{L}_{\varphi\varphi} = K_I a_{\varphi\varphi} + \operatorname{Re} \beta \|\mathbf{a}_\varphi\|^2, \quad \mathbf{a}_\varphi = (a_{r\varphi}, a_{\varphi\varphi}, a_{\varphi z}),$$

$$\mathcal{L}_{zz} = K_I a_{zz} + \operatorname{Re} \beta \|\mathbf{a}_z\|^2, \quad \mathbf{a}_z = (a_{rz}, a_{\varphi z}, a_{zz}),$$

$$\mathcal{L}_{r\varphi} = K_I a_{r\varphi} + \operatorname{Re} \beta (\mathbf{a}_r, \mathbf{a}_\varphi),$$

$$\mathcal{L}_{rz} = K_I a_{rz} + \operatorname{Re} \beta (\mathbf{a}_r, \mathbf{a}_z),$$

$$\mathcal{L}_{\varphi z} = K_I a_{\varphi z} + \operatorname{Re} \beta (\mathbf{a}_\varphi, \mathbf{a}_z),$$

$$K_I = \frac{1}{W} + \frac{k \operatorname{Re} I}{3}, \quad \bar{k} = k - \beta, \quad I = a_{rr} + a_{\varphi\varphi} + a_{zz} - \text{первый инвариант } \Pi;$$

$$A_r = a_{rr} + (\operatorname{Re} W)^{-1}, \quad A_\varphi = a_{\varphi\varphi} + (\operatorname{Re} W)^{-1}.$$

Дифференцируя уравнение (3.65) по  $t$ , уравнение (3.66) по  $r$ , уравнение (3.67) с множителем  $1/r$  по  $\varphi$  и суммируя результаты, получаем

$$\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - \tilde{\Delta} w - \tilde{A} \frac{\partial w}{\partial r} - \tilde{B} \frac{\partial w}{\partial \varphi} + K_I \left( \frac{\partial w}{\partial t} - P_d(t) \right) + F = P'_d(t), \quad (3.70)$$

где

$$\tilde{\Delta} = A_r \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2 \frac{a_{r\varphi}}{r} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi} + \frac{A_\varphi}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2},$$

$$\tilde{A} = \tilde{A}(t, r, \varphi) = \frac{\partial A_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \left( A_r + \frac{\partial a_{r\varphi}}{\partial \varphi} \right),$$

$$\tilde{B} = \tilde{B}(t, r, \varphi) = \frac{1}{r} \left( \frac{\partial a_{r\varphi}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial A_\varphi}{\partial \varphi} \right),$$

$$F = F(t, r, \varphi) = \frac{\operatorname{Re} \beta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial r} (r(\mathbf{a}_r, \mathbf{a}_z)) + \frac{\partial(\mathbf{a}_\varphi, \mathbf{a}_z)}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial K_I}{\partial r} a_{rz} + \frac{a_{\varphi z}}{r} \frac{\partial K_I}{\partial \varphi}.$$

В (3.70)  $P'_d(t)$  обозначает производную по времени от  $P_d(t)$ ,  $\mathbf{a}_r$ ,  $\mathbf{a}_\varphi$ ,  $\mathbf{a}_z$  – вектор-столбцы симметрической матрицы  $\Pi$ . Уравнение (3.70) является квазилинейным уравнением второго порядка для определения компоненты  $w$  вектора скорости. Уравнения (3.70), (3.66)–(3.69), по сути, записаны в полярной системе координат  $(r, \varphi)$  с центром в точке  $O$  (см. рис. 3.20). Пусть  $\Omega = \{(r, \varphi) : 0 \leq r \leq 1, 0 \leq \varphi < 2\pi\}$  – сечение канала. Дополним соотношения (3.70), (3.66)–(3.69) краевыми условиями

$$w(t, 1, \varphi) = 0, \quad t \geq 0 \quad (3.71)$$

и начальными данными

$$w(0, r, \varphi) = 0, \quad w_t(0, r, \varphi) = 0, \quad \alpha_\Pi(0, r, \varphi) = 0, \quad (r, \varphi) \in \Omega, \quad (3.72)$$

где  $\alpha_\Pi(t, r, \varphi)$  – любая из компонент тензора  $\Pi$ . Таким образом, приходим к начально-краевой задаче (3.66)–(3.72).

### 3.5.1. Осесимметричное течение

Будем полагать, что течение обладает осевой симметрией. Тогда все неизвестные модели зависят только от времени  $t \geq 0$  и от радиальной координаты  $r \in [0, 1]$ . Система (3.70), (3.66)–(3.68) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - A_r \frac{\partial^2 w}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial(r A_r)}{\partial r} \frac{\partial w}{\partial r} + K_I \left( \frac{\partial w}{\partial t} - P_d(t) \right) + \\ + \frac{\operatorname{Re} \beta}{r} \frac{\partial(r(\mathbf{a}_r, \mathbf{a}_z))}{\partial r} + \frac{\partial K_I}{\partial r} a_{rz} = P'_d(t), \end{aligned} \quad (3.73)$$

$$\frac{\partial a_{rz}}{\partial t} - A_r \frac{\partial w}{\partial r} + \mathcal{L}_{rz} = 0, \quad (3.74)$$

$$\frac{\partial a_{\varphi z}}{\partial t} - a_{r\varphi} \frac{\partial w}{\partial r} + \mathcal{L}_{\varphi z} = 0, \quad \frac{\partial a_{zz}}{\partial t} - 2a_{rz} \frac{\partial w}{\partial r} + \mathcal{L}_{zz} = 0.$$

Уравнения для остальных трёх компонент тензора анизотропии  $a_{rr}$ ,  $a_{\varphi\varphi}$  и  $a_{r\varphi}$  имеют вид (3.69). Как и ранее, полученная система уравнений дополняется краевыми и начальными условиями (3.71), (3.72).

Анализ поставленной начально-краевой задачи показывает, что некоторые из компонент тензора анизотропии могут быть заданы тождественно нулевыми. Действительно, распишем подробнее уравнения для  $a_{r\varphi}$  и  $a_{\varphi z}$ :

$$\frac{\partial a_{r\varphi}}{\partial t} + \beta \operatorname{Re}(a_{rr} + a_{\varphi\varphi})a_{r\varphi} + K_I a_{r\varphi} + \beta \operatorname{Re}a_{rz}a_{\varphi z} = 0,$$

$$\frac{\partial a_{\varphi z}}{\partial t} - a_{r\varphi} \frac{\partial w}{\partial r} + \beta \operatorname{Re}(a_{\varphi\varphi} + a_{zz})a_{\varphi z} + K_I a_{\varphi z} + \beta \operatorname{Re}a_{r\varphi}a_{rz} = 0.$$

Легко увидеть, что подстановка  $a_{r\varphi} \equiv 0$  и  $a_{\varphi z} \equiv 0$  в эти уравнения обращает их в тождества. Поскольку такие значения  $a_{r\varphi}$  и  $a_{\varphi z}$  соответствуют также начальным данным, они являются решениями. Аналогичные рассуждения, проведённые для  $a_{\varphi\varphi}$ , показывают, что  $a_{\varphi\varphi} \equiv 0$  также является решением. Далее будем искать только те решения начально-краевой задачи, для которых  $a_{r\varphi}$ ,  $a_{\varphi z}$  и  $a_{\varphi\varphi}$  являются тождественно нулевыми.

Запишем теперь уравнение (3.65) в случае осевой симметрии и решим его относительно функции  $a_{rz}$ :

$$a_{rz} = \frac{1}{r} \int_0^r \frac{\partial w(t, s)}{\partial t} s ds - P_d(t) \frac{r}{2}. \quad (3.75)$$

Отметим, что такой вид решения (3.65) получен с учётом требования ограниченности  $a_{rz}$  при  $r = 0$ .

**Утверждение 3.1.** *Предел при  $r \rightarrow 0$  функции  $a_{rz}$  существует и равняется нулю. Если функция  $\frac{\partial w(r, t)}{\partial t}$  является аналитической в окрестности точки  $r = 0$  при  $t \geq 0$ , то  $a_{rz}$  также является аналитической.*

Утверждение доказывается с помощью разложения в ряд Тейлора подынтегрального выражения (3.75) в окрестности точки  $r = 0$ .

Далее будет удобно преобразовать отдельно систему для определения функций  $a_{rr}$ ,  $a_{zz}$ :

$$\frac{\partial a_{rr}}{\partial t} + K_I a_{rr} + \beta \operatorname{Re}(a_{rr}^2 + a_{rz}^2) = 0, \quad (3.76)$$

$$\frac{\partial a_{zz}}{\partial t} - 2a_{rz} \frac{\partial w}{\partial r} + K_I a_{zz} + \beta \operatorname{Re}(a_{rz}^2 + a_{zz}^2) = 0. \quad (3.77)$$

В рамках этого параграфа используем обозначения  $\mathcal{A} = a_{rr} + a_{zz}$ ,  $\mathcal{B} = a_{zz} - a_{rr}$ ,  $\tilde{\gamma} = \beta + \bar{k}/3$ . Вычитая из (3.77) уравнение (3.76), получаем

$$\frac{\partial \mathcal{B}}{\partial t} + [W^{-1} + \operatorname{Re} \tilde{\gamma} \mathcal{A}] \mathcal{B} = 2a_{rz} \frac{\partial w}{\partial r}. \quad (3.78)$$

Складывая уравнения (3.76) и (3.77), приходим к выражению

$$\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t} + W^{-1} \mathcal{A} + \operatorname{Re} \tilde{\gamma} \mathcal{A}^2 + \frac{1}{2} \beta \operatorname{Re}(\mathcal{B}^2 - \mathcal{A}^2) = 2a_{rz} \left( \frac{\partial w}{\partial r} - \beta \operatorname{Re} a_{rz} \right). \quad (3.79)$$

Из уравнения (3.74) получаем

$$\frac{\partial w}{\partial r} = \frac{1}{A_r} \left( \frac{\partial a_{rz}}{\partial t} + \tilde{K}_I a_{rz} \right), \quad \tilde{K}_I = W^{-1} + \operatorname{Re} \tilde{\gamma} \mathcal{A}. \quad (3.80)$$

Подстановка последнего выражения в (3.78), (3.79) приводит к следующей системе:

$$\frac{\partial \mathcal{B}}{\partial t} - \frac{2a_{rz}}{A_r} \frac{\partial a_{rz}}{\partial t} = \left( \frac{2a_{rz}^2}{A_r} - \mathcal{B} \right) \tilde{K}_I, \quad (3.81)$$

$$\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t} - \frac{2a_{rz}}{A_r} \frac{\partial a_{rz}}{\partial t} + W^{-1} \mathcal{A} + \operatorname{Re} \tilde{\gamma} \mathcal{A}^2 + \frac{1}{2} \beta \operatorname{Re}(\mathcal{B}^2 - \mathcal{A}^2) = 2a_{rz}^2 \left( \frac{\tilde{K}_I}{A_r} - \beta \operatorname{Re} \right). \quad (3.82)$$

Уравнения (3.73), (3.75), (3.81), (3.82) дополняются следующими краевыми и начальными условиями:

$$\frac{\partial w}{\partial r}(t, 0) = 0, \quad w(t, 1) = 0, \quad t \geq 0, \quad (3.83)$$

$$w(0, r) = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial t}(0, r) = 0, \quad \mathcal{A}(0, r) = 0, \quad \mathcal{B}(0, r) = 0, \quad r \in [0, 1]. \quad (3.84)$$

### 3.5.2. Точные стационарные решения

Предположим, что переменные модели не зависят от времени  $t$ , и  $P_d(t) \equiv P_d$  есть безразмерный постоянный градиент давления в канале. Из уравнений (3.75), (3.81), (3.80) в таком случае последовательно находим:

$$a_{rz} = -P_d \frac{r}{2}, \quad (3.85)$$

$$a_{zz} = a_{rr} + \frac{2a_{rz}^2}{A_r} = a_{rr} + \frac{P_d^2}{2A_r} r^2, \quad (3.86)$$

$$\frac{\partial w}{\partial r} = \left\{ \frac{\tilde{\gamma}}{A_r} a_{rr} \left[ \frac{1}{W} \left( \frac{1}{\beta} - 1 \right) + \frac{2\bar{k}\text{Re}}{3\beta} \left( a_{rr} + \frac{P_d^2 r^2}{4A_r} \right) \right] - \frac{1}{2W} \right\} \frac{P_d}{A_r} r. \quad (3.87)$$

Преобразовывая (3.76) с учётом выражений (3.85), (3.86), приходим к уравнению

$$W^{-1} a_{rr} + \text{Re} \left( \frac{2\bar{k}}{3} + \beta \right) a_{rr}^2 + \text{Re} \frac{P_d^2 r^2}{4} \left( \frac{2\bar{k}}{3A_r} a_{rr} + \beta \right) = 0. \quad (3.88)$$

Уравнение (3.87) получено из (3.80) при использовании (3.76), выражения для  $K_I$  и формул (3.85), (3.86). Далее рассмотрим два случая.

#### I. Случай $\bar{k} = 0$ ( $k = \beta$ ).

В таком случае решения уравнений модели могут быть записаны в явном виде. При  $\bar{k} = 0$  (3.88) является квадратным уравнением относительно неизвестной функции  $a_{rr}$  и имеет две ветви решения:

$$a_{rr} = (-1 \pm \sqrt{1 - (\beta\Lambda_0 P_d)^2 r^2}) / (2\beta\Lambda_0), \quad \text{где } \Lambda_0 = \text{Re } W. \quad (3.89)$$

Откуда с учётом формулы (3.87) и второго из условий (3.83) находим

$$w(r) = \frac{1}{P_d \beta \Lambda_0 W} \left\{ (8(1 - \beta)\beta - 1) \log \left| \frac{\theta(r)}{\theta(1)} \right| \pm \hat{\beta} (\theta(r) - \theta(1)) \right\} \pm \frac{4(\theta(r) - \theta(1)) \hat{\beta} (\beta - 1)}{P_d W \Lambda_0 \theta(r) \theta(1)}, \quad (3.90)$$

где  $\hat{\beta} = 2\beta - 1$ ,  $\theta(r) = \pm \hat{\beta} + \sqrt{1 - (P_d \beta \Lambda_0)^2 r^2}$ .

Здесь верхний из знаков « $\pm$ » соответствует ветви решения (3.89) со знаком «+», нижний – ветви со знаком «-».

Опишем далее условия существования действительных решений (3.89), (3.90). По сути, они обусловлены двумя требованиями.

1. Для любых  $r \in [0, 1]$  подкоренные выражения должны быть неотрицательными:

$$-1 \leq P_d \beta \Lambda_0 \leq 1. \quad (3.91)$$

2. Для любых  $r \in [0, 1]$  числитель и знаменатель аргумента функции «log» не должны обращаться в ноль, что приводит к дополнительным ограничениям на существование каждой из двух ветвей решения (3.90). Для ветви со знаком «+», при  $\hat{\beta} \leq 0$  ( $\beta \leq 1/2$ ), и для ветви со знаком «-», при  $\hat{\beta} \geq 0$  ( $\beta \geq 1/2$ ), необходимо потребовать, чтобы

$$\beta^2 P_d^2 r^2 \Lambda_0^2 + \hat{\beta}^2 - 1 \neq 0, \text{ для любых } r \in [0, 1].$$

Отсюда при  $0 < \beta < 1$  получаем

$$\Lambda_0 < \sqrt{1 - \hat{\beta}^2} / (P_d \beta). \quad (3.92)$$

Сопоставляя (3.91), (3.92), приходим к выводу, что итоговое ограничение на  $\Lambda_0$  в указанных при формулировке требования 2 случаях определяется выражением (3.92). В остальных случаях, т.е. для ветви (3.90) со знаком «+», при  $\hat{\beta} > 0$  ( $\beta > 1/2$ ), и для ветви со знаком «-», при  $\hat{\beta} < 0$  ( $\beta < 1/2$ ), ограничение на  $\Lambda_0$  определяется выражением (3.91).

Отметим, что в случаях  $\beta = 0$ ,  $\beta = 1/2$  и  $\beta = 1$  решения (3.89), (3.90) существенно упрощаются.

Случай  $\beta = 0$ . Из (3.88) и (3.90) имеем

$$a_{rr}(r) \equiv 0, \quad w(r) = \operatorname{Re} P_d (1 - r^2) / 4, \quad (3.93)$$

что, вообще говоря, соответствует классическому решению Пуазейля, которое существует при любых значениях параметров  $\operatorname{Re}$  и  $P_d$ .

В случае  $\beta = 1/2$  имеем  $\hat{\beta} = 0$  и

$$a_{rr}(r) = \frac{-2 \pm \sqrt{4 - (P_d \Lambda_0)^2 r^2}}{2 \Lambda_0}, \quad w(r) = \frac{1}{P_d \Lambda_0 W} \log \left| \frac{4 - (P_d \Lambda_0)^2 r^2}{4 - (P_d \Lambda_0)^2} \right|. \quad (3.94)$$

Отметим, что в данном случае двум ветвям функции  $a_{rr}(r)$  соответствует единственное выражение  $w(r)$ . При этом существование решения определяется неравенством:  $\Lambda_0 < 2/P_d$ .

В случае  $\beta = 1$  имеем  $\hat{\beta} = 1$ ,  $a_{rr}(r) = (-1 \pm \sqrt{1 - (P_d\Lambda_0)^2 r^2})/(2\Lambda_0)$  и

$$w(r) = \frac{1}{P_d\Lambda_0 W} \left( \pm (\theta(r) - \theta(1)) - \log \left| \frac{\theta(r)}{\theta(1)} \right| \right). \quad (3.95)$$

Однако, учитывая, что при  $r = 0$  ветвь функции  $\theta(r) = -1 + \sqrt{1 - (P_d\Lambda_0)^2 r^2}$  принимает значение 0, заключаем, что в случае  $\beta = 1$  при  $\Lambda_0 < 1/P_d$  существует единственное ограниченное решение с верхним из знаков « $\pm$ ».

Случай  $\beta = (P_d\Lambda_0)^{-1} \leq 1$  представляет отдельный интерес, являясь предельным с точки зрения существования гладкого решения. При этом в формулах (3.89), (3.90)  $\theta(r) = \pm\hat{\beta} + \sqrt{1 - r^2}$ ,  $\theta(1) = \pm\hat{\beta}$ . В этом случае

$$a_{rr}(r) = \frac{P_d}{2} (-1 \pm \bar{\rho}(r)),$$

$$w(r) = \frac{1}{W} \left( (8(1 - \beta)\beta - 1) \log \left| 1 \pm \frac{\bar{\rho}(r)}{\hat{\beta}} \right| \pm \hat{\beta} \bar{\rho}(r) \pm \frac{4\beta(\beta - 1)\bar{\rho}(r)}{\hat{\beta} + \bar{\rho}(r)} \right), \quad (3.96)$$

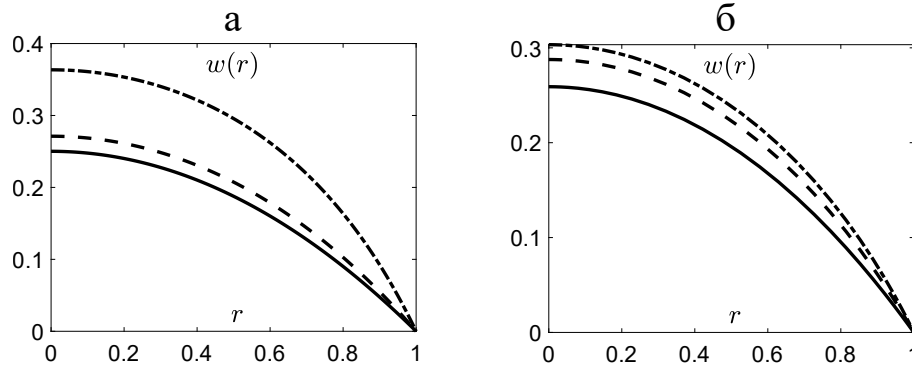
где  $\bar{\rho}(r) = \sqrt{1 - r^2}$ . Требуя, чтобы аргумент логарифма не обращался в ноль, приходим к выводу, что при  $\beta < 1/2$  существуют два решения вида (3.96). При  $\beta \geq 1/2$  существует одно решение вида (3.96) со знаком «+» вместо « $\pm$ ». При  $\beta = (P_d\Lambda_0)^{-1}$  из (3.87) несложно получить, что  $\left. \frac{\partial w}{\partial r} \right|_{r=1} = \frac{1}{\hat{\beta}^2 W}$ . В связи с этим заключаем, что производные всех решений (3.96) на отрезке  $r \in [0, 1]$  ограничены, кроме производной решения при  $\beta = 1/2$  ( $P_d\Lambda_0=2$ ), которая обращается в бесконечность в точке  $r = 1$ .

**Замечание 3.7.** Отметим, что при  $\beta > 0$  задача увеличения потока (пропускной способности) канала в отличие от случая течения классической жидкости не решается с помощью повышения градиента давления  $P_d$ . Действительно в формуле (3.90) при  $P_d \rightarrow \infty$  выражение  $w(r)$  становится независимым от  $P_d$ , в формуле (3.94) это выражение вообще является убывающим. Конечно, для корректного анализа случая больших  $P_d$  необходимо также учитывать ограничения (3.91), (3.92). Таким образом, задача о максимизации



потока полимерной жидкости за счёт вариации градиента давления в канале требует отдельного анализа.

На рис. 3.21 изображены профили скорости (3.90) при разных значениях параметров.



**Рис. 3.21.** Решения (3.90): а) при  $Re = 1$ ,  $P_d = 1$ ,  $\beta = 0.25$ ,  $W = 0.1, 1, 2$  – сплошная линия, пунктир и штрих-пунктир соответственно; б) при  $Re = 1$ ,  $W = 1$ ,  $P_d = 1$ ,  $\beta = 0.1, 0.5, 0.9$  – сплошная линия, пунктир и штрих-пунктир соответственно

Отметим, что в статье [180] рассматривалась аналогичная постановка задачи о течении в трубе с круглым сечением. При этом было получено разрешающее уравнение второго порядка для скорости  $w(r)$  с явными выражениями коэффициентов при  $\beta = 1/2$  и  $\beta = 1$  (см. краевую задачу для уравнения (33') и выражения для коэффициентов, приведённые в конце раздела 1 статьи [180]). В обозначениях, сделанных выше, указанное уравнение имеет вид

$$\frac{1}{2\sqrt{1+4W^2w_r^2}}w_{rr} + \frac{1}{r}w_r = -\frac{\sqrt{1+4W^2w_r^2}+1}{2}, \quad \beta = 1/2, \quad (3.97)$$

$$\frac{1-W^2w_r^2}{1+W^2w_r^2}w_{rr} + \frac{1}{r}w_r = -(1+W^2w_r^2), \quad \beta = 1. \quad (3.98)$$

Здесь нижний индекс у функции  $w$  означает дифференцирование по  $r$ . Краевые условия, сформулированные в [180], совпадают с (3.83).

Нетрудно проверить, что выражения (3.94), (3.95) являются решениями (3.97), (3.98) и удовлетворяют граничным условиям, что говорит о корректности выкладок, приведённых выше и в статье [180].

## II. Случай $\bar{k} \neq 0$ ( $\beta \neq k$ ).

Следуя [263], можем отметить, что предложенная модель хорошо согласуется с экспериментальными наблюдениями для течений некоторых видов полимерной жидкости, в частности, растворов линейного полибутадиена различной молекулярной массы при комнатной температуре при  $\beta = 1.2k$ . В таком случае  $\bar{k} \neq 0$ .

При  $\bar{k} \neq 0$  уравнение (3.88) после подстановки выражения для  $A_r$  сводится к кубическому уравнению относительно неизвестной функции  $a_{rr}$ :

$$aa_{rr}^3 + ba_{rr}^2 + c(r)a_{rr} + d(r) = 0, \quad (3.99)$$

где  $a = 4\Lambda_0\tilde{\beta}$ ,  $b = 4(\tilde{\beta} + 1)$ ,  $c(r) = 4\Lambda_0^{-1} + \tilde{\beta}\Lambda_0P_d^2r^2$ ,  $d(r) = \beta P_d^2r^2$ ,  $\tilde{\beta} = 2\bar{k}/3 + \beta$ . Следуя формулам Кардано, введём обозначения

$$p(r) = \frac{3ac(r) - b^2}{3a^2}, \quad q(r) = \frac{2b^3 - 9abc(r) + 27a^2d(r)}{27a^3}, \quad \mathbb{Q}(r) = \frac{p^3(r)}{27} + \frac{q^2(r)}{4}.$$

После преобразований получаем

$$\begin{aligned} p(r) &= \frac{P_d^2}{4}r^2 - \frac{1 - \tilde{\beta} + \tilde{\beta}^2}{3\tilde{\beta}^2\Lambda_0^2}, \\ q(r) &= \frac{\tilde{g}}{27\tilde{\beta}^3\Lambda_0^3} - \frac{1 - 3\beta + \tilde{\beta}}{12\tilde{\beta}\Lambda_0}P_d^2r^2, \quad \tilde{g} = (\tilde{\beta} - 2)(\tilde{\beta} + 1)(2\tilde{\beta} - 1); \\ \mathbb{Q}(r) &= -\frac{(\tilde{\beta} - 1)^2}{108\tilde{\beta}^4\Lambda_0^6} + \frac{\beta\tilde{g} - \tilde{\beta}(1 - 4\tilde{\beta} + \tilde{\beta}^2)}{216\tilde{\beta}^4\Lambda_0^4}P_d^2r^2 - \\ &\quad - \frac{1 - 27\beta^2 + (\tilde{\beta} - 10)\tilde{\beta} + 18\beta(1 + \tilde{\beta})}{1728\tilde{\beta}^2\Lambda_0^2}P_d^4r^4 + \frac{1}{1728}P_d^6r^6. \end{aligned}$$

Далее нас будут интересовать только вещественные корни (3.99), см. также п. 3.2.2. При  $\mathbb{Q}(r) > 0$  существует единственный вещественный корень:

$$a_{rr,1}(r) = \sqrt[3]{-q(r)/2 + \sqrt{\mathbb{Q}(r)}} + \sqrt[3]{-q(r)/2 - \sqrt{\mathbb{Q}(r)}} - b/3a,$$

при  $\mathbb{Q}(r) = 0$  имеются два корня:

$$a_{rr,1}(r) = -\sqrt[3]{4q(r)} - b/3a, \quad a_{rr,2}(r) = \sqrt[3]{q(r)/2} - b/3a,$$

при  $\mathbb{Q}(r) < 0$  имеются три вещественных корня:

$$a_{rr,1}(r) = 2 \cos \alpha(r) \left| \sqrt[6]{\frac{q^2(r)}{4} - \mathbb{Q}(r)} \right| - \frac{b}{3a},$$

$$a_{rr,2,3}(r) = \left| \sqrt[6]{\frac{q^2(r)}{4} - \mathbb{Q}(r)} \right| (\cos \alpha(r) \pm \sqrt{3} \sin \alpha(r)) - \frac{b}{3a},$$

где  $\alpha(r) = \arctan [2\sqrt{-\mathbb{Q}(r)}/q(r)]/3$ . Анализ множественности решений проведён в п. 3.2.2.

Для выражения функции  $w(r)$ , как и ранее, можно использовать формулу (3.87) и второе граничное условие (3.83). Однако в общем случае записать результат явно не удаётся, имеется только интегральное выражение:

$$w(r) = \int_1^r \left\{ \frac{\tilde{\gamma}}{A_r} a_{rr}(s) \left[ \frac{\zeta}{W} + \frac{2\bar{k}\operatorname{Re}}{3\beta} \left( a_{rr}(s) + \frac{P_d^2 s^2}{4A_r} \right) \right] - \frac{1}{2W} \right\} \frac{P_d s}{A_r} ds, \quad (3.100)$$

где  $A_r = A_r(s) = a_{rr}(s) + \Lambda_0^{-1}$ ,  $a_{rr}(s)$  – любое из действительных решений (3.99),  $\zeta = 1/\beta - 1$ .

В силу ограничений  $k, \beta \geq 0$  несложно видеть, что  $\tilde{\beta} > 0$ , и решения (3.99) ограничены. Следовательно, неограниченный рост подынтегрального выражения в (3.100) возможен только при  $A_r(s) \rightarrow 0$ . Используя (3.99) и выражение для  $A_r$ , приходим к уравнению

$$4\tilde{\beta}\Lambda_0 A_r^3 + 4(1 - 2\tilde{\beta})A_r^2 + (4(\tilde{\beta} - 1)\Lambda_0^{-1} + P_d^2 \tilde{\beta}\Lambda_0 r^2)A_r + P_d^2(\beta - \tilde{\beta})r^2 = 0,$$

из которого следует, что  $A_r \rightarrow 0$  тогда и только тогда, когда  $\tilde{\beta} \rightarrow \beta$ , т. е. когда  $\bar{k} \rightarrow 0$ , что не совпадает с рассматриваемым случаем.

Таким образом, подынтегральное выражение (3.100) ограничено, а значит, при любом  $r \in [0, 1]$  интеграл сходится. Подчеркнём, что в силу наличия в формулах для  $a_{rr}$  корней квадратных, кубических и шестой степени функция  $w(r)$ , определяемая (3.100), имеет особенности – точки ветвления.

Заметим, что при  $\bar{k} \neq 0$  существуют два случая, когда приведённые выше формулы заметно упрощаются.

В случае  $\beta = 0$  ( $\bar{k} = k$ ) уравнение (3.99) имеет три корня:

$$a_{rr,1}(r) \equiv 0, \quad a_{rr,2,3}(r) = \frac{-(2k + 3) \pm \sqrt{(2k - 3)^2 - (2kP_d\Lambda_0)^2 r^2}}{4\Lambda_0 k}. \quad (3.101)$$

Используя (3.80), (3.85), (3.86), при  $\beta = 0$  получаем

$$\frac{\partial w}{\partial r} = - \left\{ \frac{1}{2W} + \operatorname{Re} \frac{k}{3} \left( a_{rr} + \frac{P_d^2 r^2}{4A_r} \right) \right\} \frac{P_d}{A_r} r.$$

Интегрируя это равенство, находим, что функциям (3.101) соответствуют

$$w_1(r) = \frac{1}{48} (1 - r^2) P_d \operatorname{Re} [12 + P_d^2 \Lambda_0^2 k (1 + r^2)], \quad w_{2,3}(r) \equiv 0.$$

Решение  $w_1(r)$  существует при любых значениях параметров; решения  $w_{2,3}(r)$  существуют при  $k \neq 3/2$  и  $\Lambda_0 \leq \frac{|2k - 3|}{2k P_d}$ .

В случае  $\beta = 1$  имеем  $\bar{k} = k - 1$  и  $\tilde{\beta} = \frac{2k + 1}{3}$ . Уравнение (3.99) преобразуется к виду

$$(\tilde{\beta} a_{rr} + \Lambda_0^{-1})(4\Lambda_0 a_{rr}^2 + 4a_{rr} + \Lambda_0 P_d^2 r^2) = 0$$

и, следовательно, имеет три корня:

$$a_{rr,1}(r) \equiv -\frac{3}{(2k + 1)\Lambda_0}, \quad a_{rr,2,3}(r) = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - \Lambda_0^2 P_d^2 r^2}}{2\Lambda_0}.$$

Этим корням соответствуют

$$w_1(r) = \frac{P_d \operatorname{Re}}{192(k - 1)^2} (1 - r^2) [P_d^2 \Lambda_0^2 (2 + k)(1 + 2k)^2 (1 + r^2) - 72(k - 1)],$$

$$w_{2,3}(r) = \frac{1}{W P_d \Lambda_0} \left( \pm(\theta(r) - \theta) + \log \left| \frac{\theta \pm 1}{\theta(r) \pm 1} \right| \right),$$

где

$$\theta(r) = \sqrt{1 - \Lambda_0^2 P_d^2 r^2}, \quad \theta = \theta(1) = \sqrt{1 - \Lambda_0^2 P_d^2}.$$

Решение  $w_1(r)$  существует при любых значениях параметров; решение  $w_2(r)$  (решение со знаками «+») существует, если  $\Lambda_0 \leq 1/P_d$ ; решение  $w_3(r)$  (решение со знаками «-») неограниченно растёт в окрестности  $r = 0$  при любых значениях параметров, поэтому его следует исключить. Отметим, что  $w_2(r)$  не зависит от значений параметра  $k$  и совпадает с решением (3.95).

### 3.5.3. Численный анализ установления нестационарных решений

Отметим, что существование решений рассмотренной стационарной постановки как таковых ещё не означает, что соответствующие течения реализуются на практике. Так, решения Пуазейля для ньютоновской жидкости

существуют при любых значениях параметров, однако на практике с ростом  $\text{Re}$  эти решения разрушаются при  $\text{Re} = \text{Re}_c \approx 1700\text{--}2300$  (см., например, [264]). Для исследования процесса разрушения следует решать нелинейную нестационарную задачу с начальными данными, существенно отличающимися от полученных стационарных решений (например, с нулевыми значениями (3.84)). Сходимость решения нестационарной задачи к решению стационарной свидетельствует об устойчивости последнего на нелинейном уровне и является серьёзным аргументом в пользу его реализуемости на практике.

В этом пункте приведены численные результаты, полученные для нестационарной задачи (3.73), (3.75), (3.81)–(3.84), показывающие, что условия устойчивости в некоторых случаях совпадают с условиями существования стационарных решений, а в других случаях – нет. Такие вычисления позволяют также определить, какая из ветвей найденного стационарного решения устойчива. Кроме того, высокоточное совпадение численного решения нестационарной задачи при больших  $t$  с одной из ветвей полученных аналитических выражений служит подтверждением корректности всех проведённых выкладок и полученных результатов (по этому поводу см. также § 3.4).

Для реализации алгоритма были выполнены три следующих шага:

1. Аппроксимация производных по времени в уравнениях (3.73), (3.81), (3.82) разностными отношениями со вторым порядком на равномерной сетке  $t_n = n\tau$ ,  $n = 0, 1, \dots$  с шагом  $\tau$  и линеаризация этих уравнений по Ньютону относительно неизвестных функций  $w^n(r) = w(t_n, r)$ ,  $\mathcal{A}^n(r) = \mathcal{A}(t_n, r)$ ,  $\mathcal{B}^n(r) = \mathcal{B}(t_n, r)$ .
2. Аппроксимация функций  $\mathcal{A}^n(r)$ ,  $\mathcal{B}^n(r)$  на отрезке  $[0, 1]$  полиномом (1.1) на сетке  $\{r_1, \dots, r_N\}$ ; а функции  $w^n(r)$  – модифицированным полиномом (1.3), (1.10) с узлами  $\{r_0, r_1, \dots, r_N\}$ , где  $r_1, \dots, r_N$  – образы узлов Чебышёва под действием линейного отображения отрезка  $[-1, 1]$  на  $[0, 1]$ ,  $r_0 = 0$ . Для расчёта интеграла в формуле (3.75) использована квадратурная формула Clenshaw–Curtis [151].
3. Решение задач линейной алгебры, полученных из уравнений (3.73), (3.81), (3.82) после описанной аппроксимации, т. е. расчёт векторов значений  $w^n(r_j)$ ,  $j = \overline{0, N}$ ;  $\mathcal{A}^n(r_j)$ ,  $\mathcal{B}^n(r_j)$ ,  $j = \overline{1, N}$ , с использованием соответствующих значений  $w^{n-1}$ ,  $\mathcal{A}^{n-1}$ ,  $\mathcal{B}^{n-1}$  на предыдущем шаге по вре-

мени. Реализация итераций по Ньютону с невязкой  $10^{-10}$  и перехода от момента времени  $t_{n-1}$  к моменту  $t_n$ . Алгоритм решения строился с применением первого подхода, описанного в п. 2.1.2.

Указанный алгоритм допускает два варианта остановки:

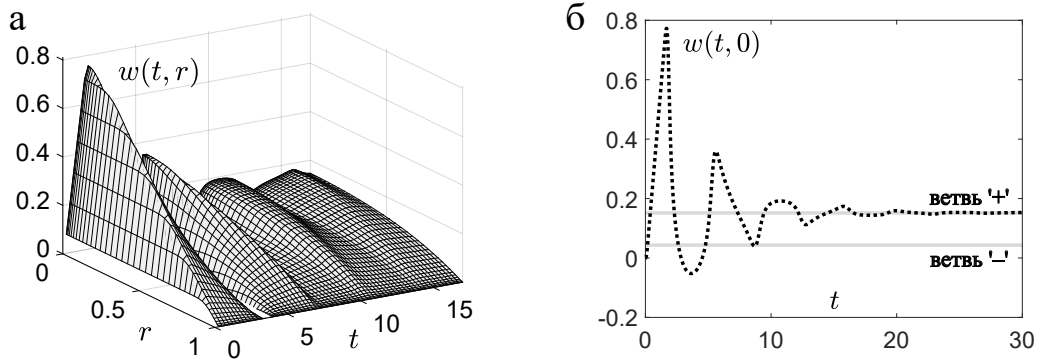
I) относительная разность решений на текущем и предыдущем шаге по времени стала меньше  $\varepsilon_{SS} = 10^{-8}$  (решение установилось);

II) количество итераций метода Ньютона превысило  $10^3$ , или количество шагов по времени превысило  $10^5$ , или относительная разность решений на соседних шагах по времени превысила  $10^5$  (решение не устанавливается).

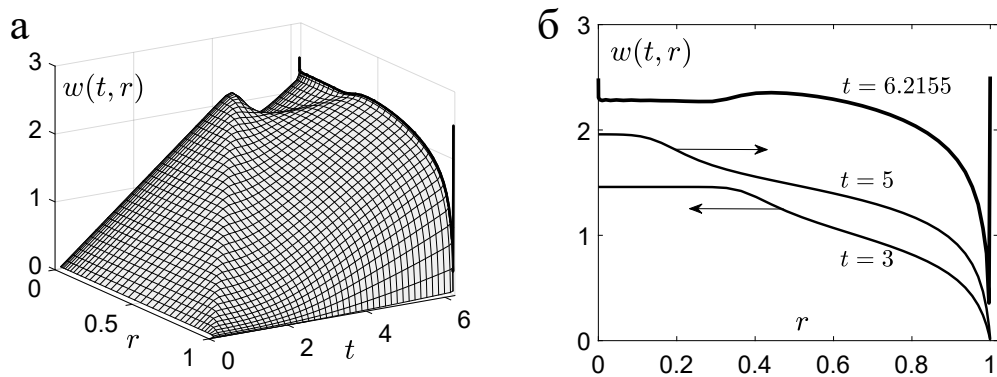
Решение нестационарной задачи (3.73), (3.75), (3.81)–(3.84) вычислялось с помощью алгоритма при  $\bar{k} = 0$  в широком диапазоне значений  $Re$ ,  $W$ ,  $P_d$  и  $\beta$ . Величины  $N = 101$ ,  $\tau = 5 \times 10^{-3}$  были фиксированы. В результате обнаружены режимы, в которых решение нестационарной задачи устанавливается к ветви решения (3.90), и режимы, в которых установления нет.

Характерная картина установления показана на рис. 3.22. Отметим три важных факта. Во-первых, как видно из графика а, процесс установления носит сложный колебательный характер. При этом в некоторые моменты времени (см. графики в окрестности  $t = 4$ ) направление течения может меняться на противоположное. Во-вторых, при любых значениях параметров, для которых удалось достичь установления, предельное решение с высокой точностью совпадает с ветвью решения (3.90) с верхним из знаков «±». В-третьих, относительные отклонения указанных предельного нестационарного и стационарного решений имеют значения порядка  $10^{-8}$  на всём множестве значений параметров за исключением малой окрестности тех значений, где наблюдается расходимость.

На рис. 3.23 показано характерное поведение решения нестационарной задачи при отсутствии установления. Из графиков а, б видно, что у решения в начальные моменты времени формируется фронт, который сначала движется от внутренней стенки канала к центру, а затем обратно. В некоторый момент времени, прежде чем фронт достигает стенки (в данном случае при  $t \approx 6.19$ ), у решения возникает возмущение в окрестности  $r = 1$ , которое стремительно растёт и превращается в пик, что приводит к расходимости при  $t = 6.2155$ . В расчётах при  $t > 6.19$  шаг по времени был уменьшен до  $\tau = 5 \times 10^{-4}$ .



**Рис. 3.22.** Сходимость нестационарных решений к ветви стационарного решения (3.90) при  $Re = 1$ ,  $W = 3$ ,  $\beta = 0.25$ : а) профили скорости при различных  $t$ ; б) зависимость скорости в центре канала от  $t$  (пунктир) и соответствующие значения стационарных решений (сплошные линии)

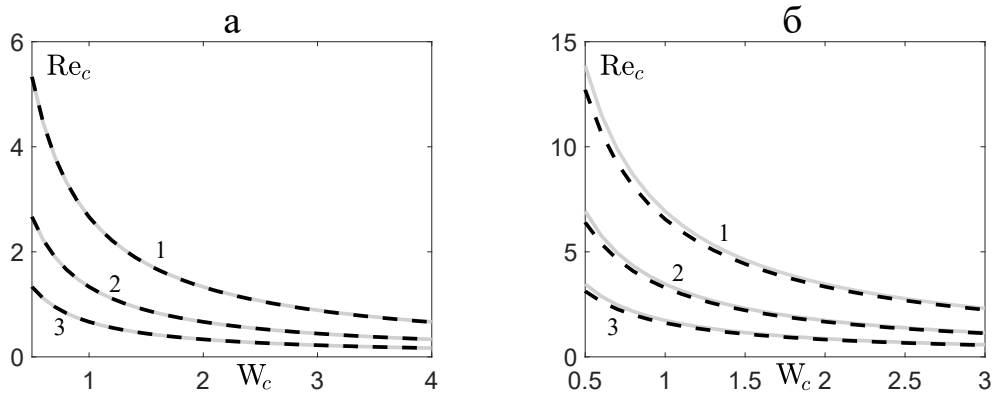


**Рис. 3.23.** Расходимость нестационарных решений при  $Re = 7$ ,  $W = 3$ ,  $\beta = 0.25$ : а) профили скорости при различных  $t$ ; б) профили скорости при  $t = 3$ ,  $t = 5$ ,  $t = 6.2155$ , стрелками показаны направления движения фронтов

Дальнейшие вычисления направлены на поиск критических значений числа Рейнольдса,  $Re_c$ , при превышении которых решение нестационарной задачи перестаёт устанавливаться. На рис. 3.24 пунктиром изображены зависимости этих значений от числа Вайсенберга,  $W$ , при нескольких значениях градиента давления  $P_d$ ,  $\beta = 0.25$  и  $\beta = 0.75$  серыми сплошными линиями показаны соответствующие ограничения, полученные из (3.91), (3.92).

Значения  $Re_c$  были рассчитаны следующим образом. По значениям  $W$  задана сетка с шагом 0.1 и узлами  $W_k = 0.1k$ ,  $k = 0, 1, \dots$ . Для каждого  $W_k$  заданы границы, в которых лежит  $Re_c$  – отрезок  $[10^{-2}, 10^2]$ . Затем реализован метод деления отрезка пополам, на каждом шаге которого значение  $Re$  определялось как центр отрезка, запускался расчёт на установление и выяс-

нялось, устанавливается ли решение при заданном значении  $Re$  (см. варианты остановки I, II, указанные выше). Если решение устанавливалось, то левая граница отрезка заменялась на  $Re$ , если нет – то правая. Процесс деления отрезка продолжался до тех пор, пока его длина не становилась меньше  $10^{-5}$ . Таким образом, для каждого  $W_k$  локализовалось критическое значение  $Re_c$ . Именно эти значения изображены пунктиром на рис. 3.24.

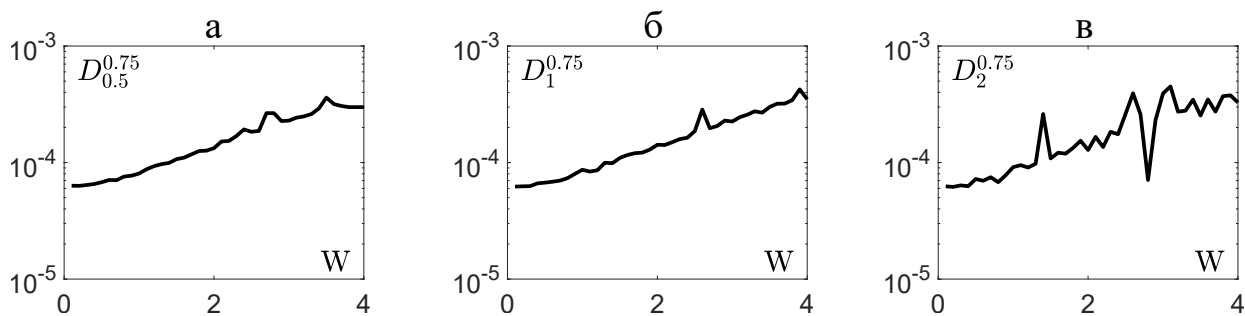


**Рис. 3.24.** Критические значения числа Рейнольдса в зависимости от числа Вайсенберга: а)  $\beta = 0.75$  и случаи  $P_d = 0.5$  – линии 1,  $P_d = 1$  – линии 2,  $P_d = 2$  – линии 3; б)  $\beta = 0.25$  для тех же значений  $P_d$ . Серые сплошные линии соответствуют ограничениям (3.91)(а), (3.92)(б), пунктирные линии получены при численном анализе сходимости нестационарных решений

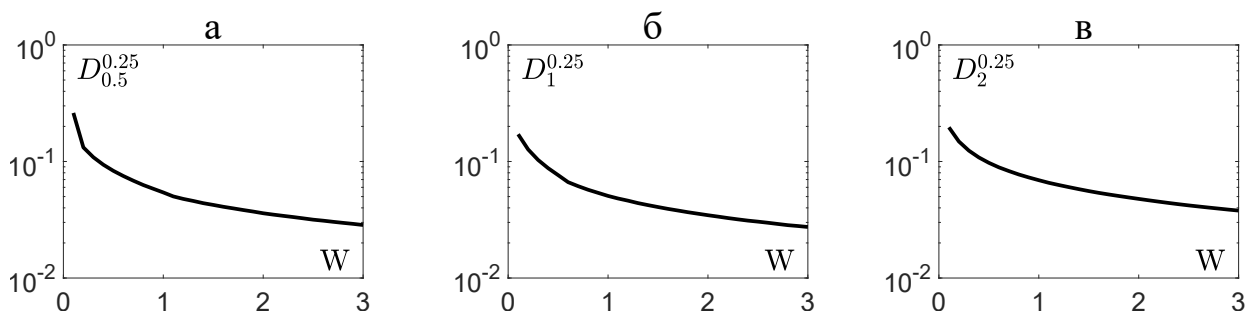
На рис. 3.25 для случая  $\beta = 0.75$  изображены относительные отклонения значений  $Re_c$  от пороговых значений  $Re$ , полученных из (3.91), при превышении которых действительные решения стационарной задачи перестают существовать. Относительные отклонения имеют значения порядка  $10^{-4}$  и осциллируют, что свидетельствует о значительном вкладе вычислительной погрешности. Отсюда можно заключить, что рассчитанные значения  $Re_c$  совпадают с ограничениями (3.91) с точностью до вычислительной погрешности. Аналогичная картина наблюдается для любых  $\beta \geq 0.5$ .

Относительные отклонения значений  $Re_c$  от пороговых значений  $Re$ , полученных из (3.92) для случая  $\beta = 0.25$ , изображены на рис. 3.26. Отклонения имеют существенно бóльшие значения и регулярный характер поведения, что свидетельствует о том, что они отражают свойства модели, а не вычислительную погрешность. Аналогичная картина наблюдается для любых  $\beta < 0.5$ . Иначе говоря, при  $\beta < 0.5$  сходимость решений нестационарной задачи, которую можно ассоциировать с устойчивостью, прекращается при меньших





**Рис. 3.25.** Относительные отклонения  $D_{P_d}^\beta$  критических значений числа Рейнольдса, полученных из ограничения (3.91) и найденных численно из анализа сходимости нестационарных решений при  $\beta = 0.75$  и  $P_d = 0.5$  (а),  $P_d = 1$  (б) и  $P_d = 2$  (в)



**Рис. 3.26.** Относительные отклонения  $D_{P_d}^\beta$  критических значений числа Рейнольдса, полученных из ограничения (3.92) и найденных численно из анализа сходимости нестационарных решений при  $\beta = 0.25$  и  $P_d = 0.5$  (а),  $P_d = 1$  (б) и  $P_d = 2$  (в)

значениях  $Re$ , чем значения, обеспечивающие существование стационарных решений. Как следует из графиков на рис. 3.26, отклонения этих двух критических значений  $Re$  при малых  $W$  могут достигать нескольких десятков процентов и уменьшаются с ростом  $W$ .

### 3.5.4. Обсуждение полученных результатов

Основываясь на полученных результатах, можно констатировать существенное отличие мезоскопического описания одномерных течений полимерной жидкости в цилиндрическом канале от описания такого течения на основе верхнеконвективной модели Максвелла (модели Oldroyd-B при нулевой вязкости растворителя, см. (3.8), (3.9)). Решение, полученное в рамках модели Максвелла, представляет частный случай решения уравнений модели Покровского–Виноградова, когда размерами и ориентацией макромолекуляр-

ных клубков полимера пренебрегается, и решение совпадает с классическим решением Пуазейля, см. (3.93). Общий же случай описывает более сложную структуру течения и позволяет исследовать нюансы, связанные с существованием ламинарных течений и их устойчивостью в нелинейной постановки.

В частности, проведённый анализ выявил механизм разрушения стационарных решений типа Пуазейля за счёт возникновения у них точек ветвления и выхода этих точек в область решения задачи при определённых значениях параметров. Кривая на плоскости  $Re-W$ , при пересечении которой особая точка попадает внутрь области, представляет собой гиперболу  $Re_c(W)$  (см. рис. 3.24, а; 3.25). Интересно заметить, что такая обратнопропорциональная зависимость критических значений  $Re$  и  $W$  может быть получена на основе совершенно других принципов. Например, в работе [186] использована модель Oldroyd-B при ненулевой вязкости растворителя для поиска непрерывного перехода между режимами чисто упругой и классической инерционной турбулентности в двумерных течениях. Асимптотика критических значений параметров в промежуточном режиме между упругой и упруго-инерционной турбулентностью имеет вид  $Re_c \sim (E(1-b))^{-1/2}$ , где  $b$  – отношение вязкостей растворителя и полимерного раствора,  $E = W/Re$  – характеристика эластичности, см. рис. 4 в статье [186] и комментарии к нему. Нетрудно видеть, что эта асимптотика соответствует соотношению  $Re_c \sim W_c^{-1}$ . В указанной работе также имеются ссылки на экспериментальные данные, подтверждающие такую асимптотику. В другой экспериментальной работе [187] независимо получено точно такое же соотношение между критическими значениями чисел Рейнольдса и Вайсенберга при анализе течений растворов полимеров высокой молекулярной плотности при высоких значениях эластичности в микроскопических каналах различного диаметра.

Важным обстоятельством является то, что в расчётах на установление, проведённых в диссертации, показано, что при фиксированном  $W$  с ростом  $Re$  разрушению решения стационарной задачи может предшествовать потеря устойчивости. Значения  $Re$ , при которых развивается неустойчивость, могут оказаться на несколько десятков процентов меньше пороговых значений  $Re_c$ , а кривая, на которой они лежат, также хорошо аппроксимируется гиперболой, см. рис. 3.24, б; 3.26. Проведённые эксперименты показали, что реализуемость

конкретного из двух указанных сценариев разрушения ламинарных течений зависит от ориентации макромолекул полимера, характеризуемой параметром  $\beta$ . Другими словами, ключевым эффектом, обеспечивающим тот или иной сценарий является наведённая анизотропия при течении полимера.

Отметим также, что разрушение как стационарного, так и нестационарного решения происходит в окрестности границы канала, где в экспериментах фиксируются предвестники ламинарно-турбулентного перехода – критические и сдвиговые слои, в которых течение становится существенно двумерным, см. [265]. Таким образом, описанные сценарии разрушения ламинарных течений можно ассоциировать с возникновением критических слоёв.

В заключение заметим, что помимо описания ламинарно-турбулентного перехода найденные точные решения типа Пуазейля представляют интерес с точки зрения анализа зависимости расхода жидкости от реологических параметров. Как следует из полученных формул, эта зависимость весьма нетривиальна (замечание 3.7). Существенным является также обнаруженный при  $\beta = 0$ ,  $\bar{k} \neq 0$  режим течения, характерный для бингамовских пластиков, когда жидкость остаётся в покое при наличии ненулевой нагрузки и внутреннего напряжения. Причём, в соответствии с (3.101), это напряжение зависит от реологических параметров жидкости. Применимость предложенной модели для описания течений определённых видов бингамовских пластиков выходит за рамки диссертационного исследования.

### **§ 3.6. Численный анализ неизотермических МГД течений между двумя соосными цилиндрами с контролем погрешности**

Обобщённая мезоскопическая модель, описанная в § 3.1, использована в [266] для описания пуазейлевских течений несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости между двумя соосными цилиндрами при наличии магнитного поля, сонаправленного с осью цилиндров, и температурных полей. Отметим, что такое течение соответствует перспективному решению для технологий печати, в котором внешний цилиндр представляет дюзу печатающего устройства, а внутренний — тонкий нагревательный элемент, изготовленный

из парамагнетика. Безразмерный радиус нагревательного элемента обозначим  $r_0 : 0 < r_0 < 1$ .

Рассмотрим далее стационарные осесимметричные течения при  $k = \beta$  ( $\bar{k} = 0$ ). Тогда, проводя выкладки, аналогичные приведённым в § 3.5, но для неизотермического случая, получаем:

$$r\bar{\gamma}w'' + \Gamma w' = -r\widehat{G}\mathcal{K}, \quad (3.102)$$

$$\Gamma = 1 + rY' \frac{Y - \bar{\gamma}(\bar{E}_A + Y)}{Y^2}, \quad \widehat{G} = \widehat{D} + \mathfrak{T} \frac{Y - 1}{\bar{\theta}},$$

где штрихом обозначена производная по радиальной переменной  $r \in [r_0, 1]$ ,  $\mathfrak{T} = \frac{\text{Ra Re}}{\text{Pr}}$ ,  $\widehat{D} = \text{Re}P_d$ ,  $\bar{\theta}$  – относительная разность температур между внутренним и внешним цилиндрами ( $\bar{\theta} > 0$  – нагрев изнутри,  $\bar{\theta} < 0$  – нагрев снаружи) является постоянной, выражения для  $\bar{\gamma}$  и  $\mathcal{K}$  приведены в замечании 3.5, причём для расчёта  $\tilde{t}$  в этих выражениях выбирается ветвь со знаком «+», поскольку, как показано в п. 3.5.3, она является устойчивой.

Переходя в уравнениях (3.14) от декартовых к полярным координатам  $(r, \varphi)$ , используя обозначения компонент тензора  $\Pi$  из § 3.5, получаем

$$Y'' + Y'/r + A_T Y a_{rz} w_r = 0, \quad (3.103)$$

$$L'' + L'/r = 0.$$

Поставим для системы уравнений (3.102), (3.103) краевую задачу:

$$w(r_0) = w(1) = 0, \quad Y(r_0) = Y_H, \quad Y(1) = 1, \quad (3.104)$$

где  $Y_H$  – безразмерная температура поверхности внутреннего цилиндра. Краевые условия для  $L$  обсуждаются в [266].

### 3.6.1. Анализ погрешности полученных решений

Рассмотрим далее случай отсутствия диссипации ( $A_T = 0$ ). Тогда решение краевой задачи для уравнения (3.103) можно представить в аналитическом виде:  $Y = 1 + \bar{\theta} \ln r / \ln r_0$ . Подставим это решение в выражения коэффициентов и правой части уравнения (3.102) и будем решать краевую задачу для

скорости течения с помощью алгоритма, описанного в п. 2.1.1 с применением апостериорных оценок погрешности, описанных в § 2.4. Важно отметить, что алгоритм позволяет также получить информацию о гладкости искомых решений и об их особенностях в комплексной плоскости.

Для вывода оценки вычислительной погрешности  $\varepsilon_R$  напомним, что приближённое решение ищется в итерационном процессе метода установления, каждый шаг которого можно представить как  $U^{[n]} = S(U^{[n-1]})$ , где  $S: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$  – нелинейный оператор,  $U^{[n]}$  – вектор, содержащий значения приближённого решения в узлах  $\{r_1, \dots, r_N\}$ , полученный на  $n$ -й итерации. Здесь  $r_j$ ,  $j = \overline{1, N}$  – образы узлов Чебышёва под действием линейного отображения отрезка  $[-1, 1]$  на  $[r_0, 1]$ , для приближения решения использован полином  $\tilde{p}_N^1(w, r)$ , см. (1.3), (1.6).

Последовательность решений  $U^{[n]} \in \mathbb{R}^N$  под действием  $S$  должна сходиться к вектору  $U \in \mathbb{R}^N$  значений полинома  $\tilde{p}_N^1(w, r)$  в узлах  $r_j$ ,  $j = \overline{1, N}$ , которые удовлетворяют исходному нелинейному уравнению (3.102), записанному в этих узлах (мы полагаем, что соответствующая система из  $N$  нелинейных уравнений имеет решение). Для выполнения этого условия необходимо и достаточно, чтобы  $S$  было сжимающим отображением [218].

Действительно, если  $S$  – сжимающее отображение, то оно имеет неподвижную точку, что обеспечивает монотонную сходимость метода установления со скоростью геометрической прогрессии. На практике монотонной сходимости не получается. Рассмотрим рис. 3.27.

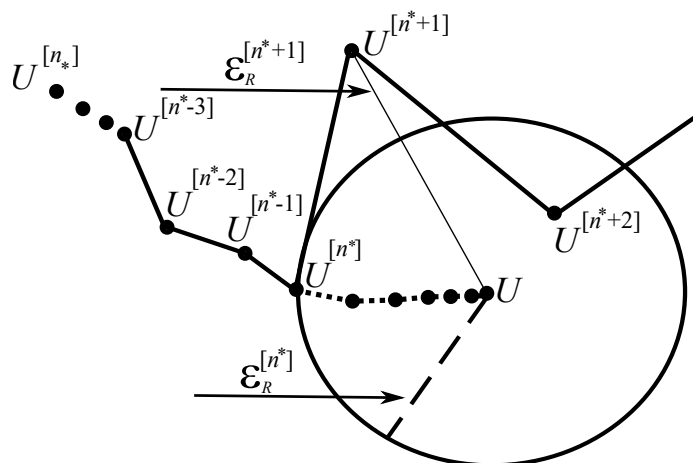


Рис. 3.27. Процесс сходимости метода установления к точному решению

На временном слое  $n^*$ , когда  $U^{[n^*]}$  попадает в малую окрестность точного решения (на рисунке эта окрестность обозначена овалом), нарушается монотонная сходимост. Последующие решения могут выходить из окрестности (пример обозначен сплошной линией), отходя от точного решения дальше, чем решение на предыдущей итерации. Это происходит из-за наличия вычислительной погрешности  $\varepsilon_R$ . При отсутствии  $\varepsilon_R$  последовательность  $U^{[n]}$  продолжала бы сходиться к точному решению с уменьшением значений нормы  $\|U^{[n]} - U^{[n-1]}\|$  по закону геометрической прогрессии (показано точками).

Наша идея заключается в оценке длины пути от  $U^{[n^*]}$  до  $U$ , при условии, что сходимост остается монотонной (эта длина складывается из длин отрезков, обозначенных точками). Зафиксируем номер шага  $n = n_* < n^*$  такой, что на отрезке  $[n_*, n^*]$  сходимост метода является монотонной,  $\mathbb{K} = n^* - n_*$  (характерные значения  $\mathbb{K}$  приведены ниже в табл. 26). Введем обозначения:

$$z_n = \frac{\|U^{[n+1]} - U^{[n]}\|}{\|U^{[n]} - U^{[n-1]}\|}, \quad \chi_{max}^N = \max_{n=n_*, \dots, n^*} (z_n), \quad U^{[n]} \in \mathbb{R}^N. \quad (3.105)$$

Будем следить за величиной  $z_n$ . Если  $z_n < 1$ , то сходимост монотонная. Если вблизи от точного решения (при малых  $\|B_t w^{[n]}\|$ , см. (2.11)) оказалось  $z_n > 1$ , т. е. решения попали в овал на рис. 3.27 ( $n = n^*$ ), то монотонная сходимост пропадает (такие рассуждения корректны лишь при сходимости метода установления). С этого момента прекращаем подсчет  $z_n$  и ищем  $\chi_{max}^N$ . Считаем, что величина  $\chi_{max}^N$  аппроксимирует коэффициент сжатия оператора  $S(U)$  с хорошей точностью, поскольку в расчетах находим ее как максимум по большому числу итераций (обычно  $\mathbb{K} > 50$ ). Пусть  $\varepsilon_R^{[n^*]}$  – оценка расстояния от  $U^{[n^*]}$  до  $U$ . По теореме 1 из [218, п. 33.2]

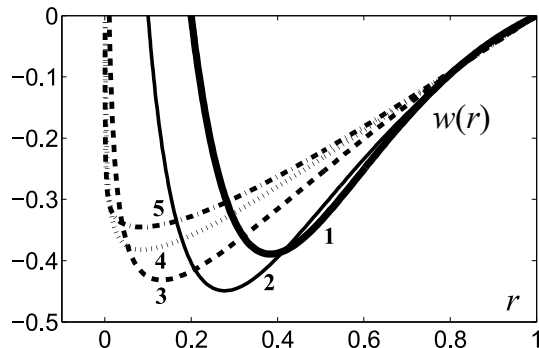
$$\varepsilon_R^{[n^*]} \leq \frac{\|U^{[n_*]} - U^{[n_*-1]}\|}{1 - \chi_{max}^N} (\chi_{max}^N)^{n^* - n_*}.$$

Оценим, насколько может увеличиться погрешност  $\varepsilon_R$  при переходе на следующий  $(n^* + 1)$ -й шаг, используя формулу (2.42) со следующими замечаниями: 1) для расчёта величины  $\Psi = \Psi(\varepsilon_R^{[n^*]})$  необходим тщательный анализ всех операций, выполняемых для расчёта  $f(w, x) = -(\Gamma w' + r\widehat{G}K)/r\bar{\gamma}$ ; 2) погрешност  $\delta_U$ , возникающая при расчёте правой части  $f(w, x)$ , равняется погрешности  $\varepsilon_R^{[n^*]}$ , полученной на шаге  $n^*$ . Формулы для расчёта  $\Psi$  приведены

в приложении статьи [177]. Ниже на рис. 3.30 пунктиром показаны значения оценки  $\varepsilon_R^{[n^*+1]}$ , полученной по формуле (2.42), в зависимости от  $N$ .

В экспериментах зафиксируем значения параметров  $\beta = 0.1$ ,  $\widehat{D} = -1$ ,  $\overline{E}_A = 9$ ,  $W = 0.01$ ,  $\overline{\theta} = 9$ , будем уменьшать  $r_0$  от значения  $r_0 = 0.2$  до  $r_0 = 0.0002$  и вычислять решения  $w(r_j)$ ,  $j = \overline{1, N}$ , с помощью разработанного алгоритма. Затем для этих решений построим оценки погрешностей  $\varepsilon_M$  и  $\varepsilon_R$  в зависимости от количества узлов  $N$ , используя метод из § 2.4 .

На рис. 3.28 представлены профили скорости  $w(r)$ , найденные для пяти различных значений  $r_0$ . Данные о работе алгоритма при расчёте этих профилей занесены в табл. 26. Здесь  $N$  – минимальное количество узлов, при котором метод сходится и обеспечивает приемлемые значения погрешности  $\varepsilon_M$  (не превышающие 0.01);  $\mathbb{K}$  – количество итераций метода установления, на которых сходимость была монотонной;  $t_{solve}$  – время работы алгоритма в миллисекундах (расчёты проводились на одном ядре ЭВМ Intel Core i5-3337U, 1.8 GHz, 6 Gb DIMM DDR3 RAM );  $\chi_{max}^N < 1$  определён в (3.105). По этим данным можно сделать вывод, что алгоритм работает быстро даже для предельно малых  $r_0$ , не требуя большого количества узлов.



**Рис. 3.28.** Численные решения задачи (3.102), (3.104) при  $A_T = 0$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $\widehat{D} = -1$ ,  $\overline{E}_A = 9$ ,  $W = 0.01$ ,  $\overline{\theta} = 9$  ( $Ra \cdot Re / Pr = 1$ ) и различных значениях  $r_0$  ( $r_0 = 0.2$  – эксперимент 1,  $r_0 = 0.1$  – эксп. 2,  $r_0 = 0.01$  – эксп. 3,  $r_0 = 0.001$  – эксп. 4,  $r_0 = 0.0002$  – эксп. 5)

На рис. 3.29 точками изображены значения  $\lambda_N$  ( $N \in \mathbb{N}$  – чётное) для пяти рассмотренных экспериментов, рассчитанные по формулам (2.47). Видно, что при умеренных значениях  $N$  эти величины колеблются не слишком сильно и демонстрируют сходимость к некоторым предельным значениям  $q = \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_N$ . Затем, когда погрешность метода снижается до уровня погрешности машин-

**Таблица 26.** Параметры численного метода

$r_0$	$N$	$\mathbb{K}$	$t_{solve}$ , мс	$\varepsilon_M$	$\chi_{max}^N$	$\tau$	$k_1$	$k_2$
0.2	6	21	2.4	0.0142	0.974	0.5	1	1
0.1	9	27	3.2	0.0104	0.9766	0.5	1	1
0.01	26	207	9.7	0.0178	0.9617	1.1	100	1
0.001	82	53	37.4	0.0185	0.9697	2.1	100	1
0.0002	194	53	116.5	0.0196	0.9667	3.1	500	1

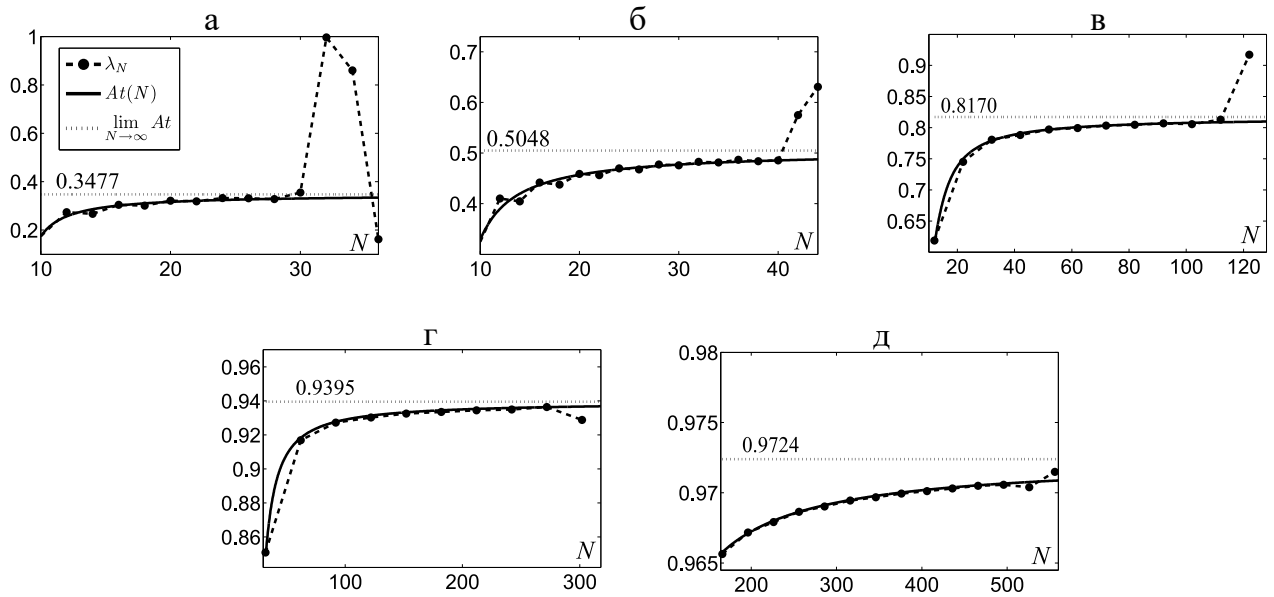
ной арифметики, начинаются хаотические осцилляции  $\lambda_N$ , вызванные ошибками округления действительных чисел в памяти ЭВМ. Пусть  $N_0$  – минимальное значение  $N$ , при котором метод сходится;  $N_1$  – значение  $N$ , при котором начинаются хаотические осцилляции (оно легко находится из графика). Для определения величины  $q$  значения  $\lambda_N$  на отрезке  $N \in [N_0, N_1]$  были аппроксимированы функцией

$$At(N) = b_1 \arctan(b_2 N + b_3) + b_4.$$

Коэффициенты  $b_1 - b_4$  найдены с помощью методов нелинейной невыпуклой оптимизации, реализованных в пакете программ OPTCON [267]: минимизировалось среднеквадратичное отклонение (MSE) функции  $At(N)$  от набора данных  $\lambda_N$  по всем чётным  $N$  из отрезка  $[N_0, N_1]$ . Учитывая, что  $\arctan(x) \rightarrow \pi/2$  при  $x \rightarrow \infty$ , аппроксимируем значение  $q$  величиной  $\hat{q} = b_1 \pi/2 + b_4$  ( $\hat{q}$  указаны на рис. 3.29). Величина MSE служит характеристикой точности такого приближения. Отметим ещё, что на рис. 3.29, во избежание нагромождений из большого числа точек, изображены не все  $\lambda_N$ . Однако функция  $At(N)$  построена с использованием всех этих значений. Конкретные значения  $N_0$ ,  $N_1$ ,  $b_1 - b_4$ ,  $\hat{q}$  и MSE для пяти рассмотренных решений приведены в табл. 27.

Как следует из приведённых данных ( $q \approx \hat{q} < 1$ ), реализуется второй вариант оценки погрешности метода, описанный в п. 2.4.2 (экспоненциальная сходимость, см. случай 2). Тогда в оценке (2.45)  $\varepsilon_N \approx \hat{q}$ . Причём, чем меньше значения  $r_0$ , тем ближе  $\hat{q}$  к единице. Из этого, в силу обратной теоремы I.7 теории приближений, следует, что искомая функция  $w(r)$  имеет особенность в комплексной плоскости, и чем меньше  $r_0$ , тем ближе эта особенность к отрезку  $[r_0, 1]$ . Таким образом, характер пограничного слоя течения в окрестности





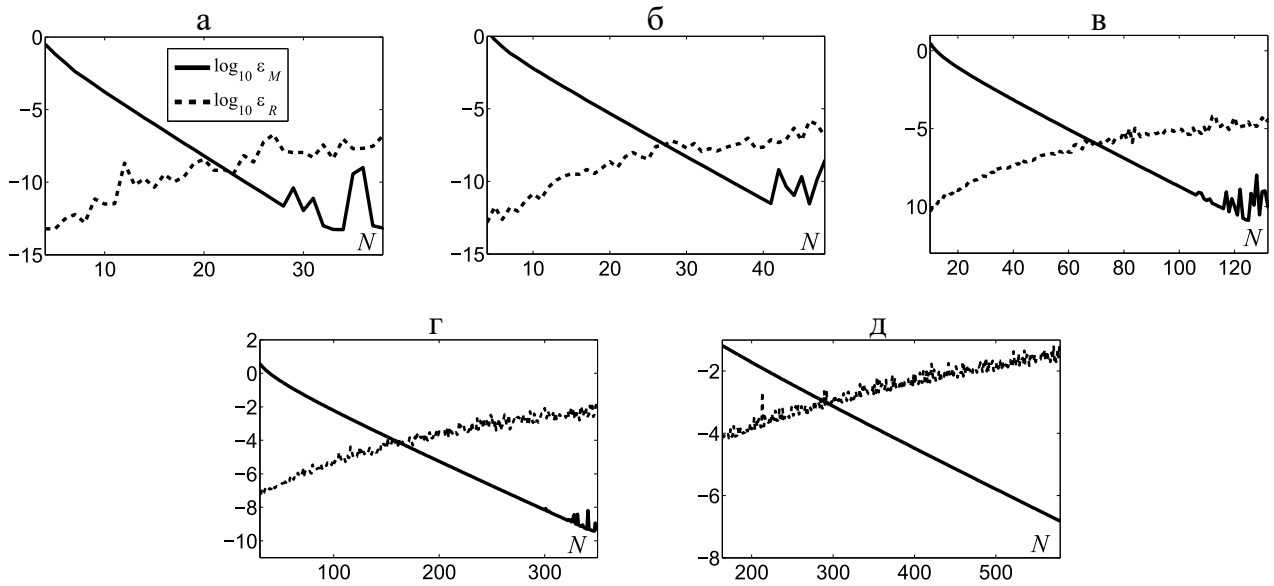
**Рис. 3.29.** Значения  $\lambda_N$  (большие точки), график функции  $At(N)$  (сплошная линия), предельное значение  $\hat{q}$  (точки) для случаев:  $r_0 = 0.2$  (а);  $r_0 = 0.1$  (б);  $r_0 = 0.01$  (в);  $r_0 = 0.001$  (г);  $r_0 = 0.0002$  (д)

**Таблица 27.** Параметры приближения  $At(N)$

$r_0$	$[N_0, N_1]$	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4$	$\hat{q}$	MSE
0.2	[7,30]	0.858	2.267	-17.733	-1.0	<b>0.3477</b>	8.7e-04
0.1	[10,40]	0.958	1.467	-9.248	-1.0	<b>0.5048</b>	9.02e-04
0.01	[10,110]	0.170	0.2	-1.986	0.55	<b>0.817</b>	5.81e-04
0.001	[30,260]	0.12	0.151	-3.751	0.751	<b>0.9395</b>	3.95e-05
0.0002	[165,570]	0.055	0.071	-3.496	0.886	<b>0.9724</b>	3.42e-07

$r = r_0$  является не экспоненциальным, а степенным.

На рис. 3.30 приведены значения погрешности метода  $\varepsilon_M$  и вычислительной погрешности  $\varepsilon_R = \varepsilon_R^{[n^*+1]}$  в логарифмической шкале. Из графиков видно, что с ростом  $N$  значения  $\varepsilon_M$  уменьшаются по экспоненциальному закону, значения  $\varepsilon_R$  увеличиваются по закону, близкому к степенному. Это связано со степенным ростом норм аппроксимирующих матриц и обусловленности  $\text{cond}_{R_A}^\infty$  в оценке (2.42).

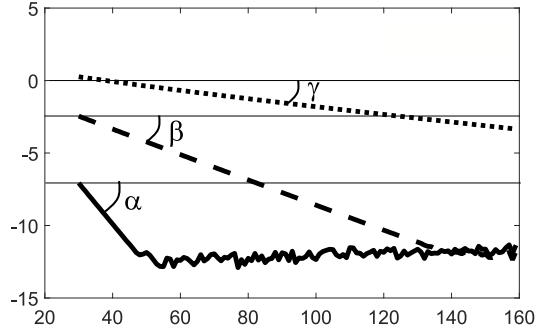


**Рис. 3.30.** Значения  $\log_{10} \varepsilon_M$  и  $\log_{10} \varepsilon_R$  для случаев:  $r_0 = 0.2$  (а);  $r_0 = 0.1$  (б);  $r_0 = 0.01$  (в);  $r_0 = 0.001$  (г);  $r_0 = 0.0002$  (д)

### 3.6.2. Численный анализ особенностей течений

Мы видим, что с помощью разработанного алгоритма возможно решать сложные вычислительные задачи с контролем погрешности. Этот факт является значительным преимуществом метода. На рис. 3.31 продемонстрированы значения логарифма погрешности метода  $\varepsilon_M$  для трех значений радиусов нагревательного элемента  $r_0$ . Прямые линии свидетельствуют о том, что сходимость в данном случае носит экспоненциальный характер. Легко заметить, что с уменьшением значения  $r_0$  (см. рис. 3.31) эти прямые линии становятся более пологими, а углы между осью абсцисс и графиками уменьшаются. Имеют место неравенства  $\alpha > \beta > \gamma$ . Чтобы продолжить дальнейшие рассуждения, обратимся к теоремам о сходимости.

Теоремы I.16, I.7 позволяют по углу наклона указанного графика однозначно восстановить эллипс аналитичности (эллипс Бернштейна) для продолжения решения задачи в комплексную плоскость. Однако узнать, где именно на контуре эллипса лежит ближайшая к отрезку  $[r_0, 1]$  особая точка решения, с применением указанных теорем невозможно. Для локализации особенности можно воспользоваться приближениями Чебышёва–Паде и алгоритмом, описанным в п. 2.1.3.

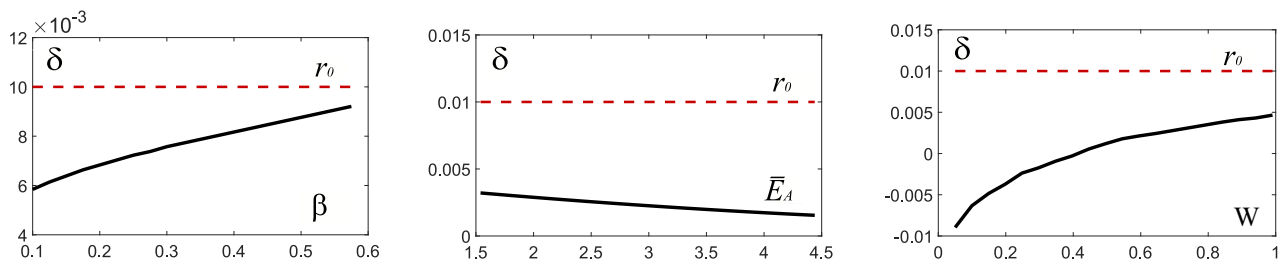


**Рис. 3.31.** Логарифмы погрешности метода  $\varepsilon_M$  для различных значений радиуса внутреннего цилиндра  $r_0$ :  $r_0 = 0.1$  (сплошная линия);  $r_0 = 0.01$  (пунктир);  $r_0 = 0.001$  (точки)

После применения этого алгоритма к найденным численным решениям установлено, что во всех случаях мнимая координата  $\varepsilon$  особой точки близка к нулю, а действительная координата  $\delta < r_0$  лежит в непосредственной близости от левой границы  $r_0$  и приближается к ней с уменьшением  $r_0$ . Казалось бы, что ситуация идентична случаю классического решения Пуазейля для течения между соосными цилиндрами:  $u(r) = \frac{\text{Re}P_d}{4}(r^2 + (1 - r_0^2) \ln r / \ln r_0 - 1)$ , в котором положение особенности определяется функцией  $\ln r$ , а расстояние от особой точки  $(\delta, \varepsilon) = (0, 0) \in \mathbb{C}$  уменьшением  $r_0$  также уменьшается.

Однако расчёты, проведённые для полимерной жидкости, показали намного более сложную картину, чем в случае течений классической жидкости: на положение особой точки влияет не только радиус  $r_0$ , но и реологические параметры жидкости. Таким образом, особенности, вызванные геометрическими свойствами, «смешиваются» с особенностями, связанными с реологическими свойствами жидкости. На рис. 3.32 приведены действительные координаты  $\delta$  особенности решения краевой задачи (3.102), (3.104) в зависимости от значений параметров  $\beta$ ,  $\overline{E}_A$  и  $W$  (мнимые координаты  $\varepsilon \approx 0$ ). Для вычисления  $\delta$  проводились расчёты на сетке, содержащей  $N = 51$  узел интерполяции. Проверено, что с увеличением  $N$  координата  $\delta$  меняется не значительно (меняется второй–третий знак).

Видно, что  $\overline{E}_A$  не оказывает значительного влияния на координату  $\delta$ , в то время как с ростом параметра  $\beta$  и  $W$  координата особенности приближается к  $r_0$ , т. е. к левой границе расчетного отрезка. Этот результат объясняет сложность расчетов для режимов с большими  $\beta$  и  $W$ .



**Рис. 3.32.** Зависимость вещественной координаты особенности  $\delta$  от феноменологического параметра  $\beta$ , энергии активации  $\bar{E}_A$  и числа Вайсенберга,  $W$ . Для всех случаев  $r_0 = 0.01$ . Пунктирной линией показана левая граница области решения  $[r_0, 1]$

Найденные решения ещё раз подтверждают сценарий разрушения ламинарных течений, описанный в § 3.5: при выходе особой точки на границу области, решение типа Пуазейля разрушается, что можно ассоциировать с переходом к сложной пространственной динамике и к турбулентности.

**Основные результаты главы 3** состоят в следующем.

1. Для описания неизотермических МГД течений несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости предложена обобщённая мезоскопическая модель. Проведена идентификация параметров модели по данным экспериментов.
2. Для уравнений модели даны постановки задач о течениях пуазейлевского типа в каналах с сечениями прямоугольной, эллиптической и круглой форм, содержащих внутренние включения – нагревательные элементы. Исследована неединственность решений поставленных задач.
3. Дан многопараметрический численный анализ стационарных течений, их свойств, а также процесса установления нестационарных течений. Осуществлена верификация найденных решений при сравнении с результатами, полученными методом конечных элементов и методом коллокаций и наименьших квадратов.
4. Для одномерной осесимметричной задачи получены точные решения. Разработан математический аппарат для описания процесса разрушения (потери устойчивости) ламинарных течений пуазейлевского типа. Показано, что полученные критерии потери устойчивости и результаты расчётов соответствуют экспериментальным данным.

# Волновая турбулентность в физических системах, описываемых нелинейным уравнением Шрёдингера

## § 4.1. Верификация теории волновой турбулентности

В последние годы был достигнут существенный прогресс в области строгого математического обоснования теории волновой (слабой) турбулентности (ТВТ). Одним из новейших является результат [88] о том, что при определенных требованиях к начальным условиям решение КУ (0.14) и спектр решения трехмерного уравнения Гросса–Питаевского (УГП) (0.9) совпадают на начальных этапах эволюции с высокой точностью. Характерная длина временного интервала, в котором доказано это совпадение, есть  $\tilde{\delta} \cdot T_{kin}$ , где  $T_{kin}$  – характерное время эволюции решения КУ (время, по прошествии которого значения спектра изменяются двукратно),  $\tilde{\delta} \ll 1$ . При этом  $\tilde{\delta}$  не зависит от вклада нелинейных эффектов (который считается пренебрежимо малым) и от размера физической системы. Таким образом, этот результат является волновым аналогом известной теоремы Лэнфорда (Lanford’s theorem [86, 87]), имеющей место для кинетического уравнения Больцмана, описывающего столкновение частиц. Однако в приложениях, большинство из которых рассматривается на временных интервалах длины  $\gtrsim T_{kin}$ , этого результата явно недостаточно.

Основной целью исследований, проведённых в этом параграфе, является верификация ТВТ в случае однородного изотропного взаимодействия волн при  $t \gtrsim T_{kin}$ . Для этого мы сопоставим спектры решений 3D УГП (0.9), найденных путём прямого численного моделирования, с решениями КУ (0.17). Аналогичные сопоставления проведём для *функции плотности вероятности (ФПВ)* интенсивности волн и для связанных с ней статистических величин, конкретно, для *кумулянтов* различного порядка. В результате для КУ и УГП удаётся показать высокоточное совпадение как спектров волнового действия, так и ФПВ на временных интервалах  $\gtrsim T_{kin}$ , а также охарактеризовать

их отклонения в более поздние моменты времени.

Первые исследования подобного рода были проведены в [268] для случая трёхволнового взаимодействия в двумерной физической системе (моделирование проводилось до времён  $t \sim 0.3T_{kin}$ ). Полученные результаты свидетельствуют о высокой точности предсказаний ТВТ на таких временах. В диссертации рассмотрены четырёхволновые взаимодействия в трёхмерной системе и проведено моделирование до времени  $t \sim 10T_{kin}$ . Кроме того, в отличие от [268], для вычисления ФПВ мы используем аналитические выражения, полученные в [269] и включающие значения спектра волнового действия, что позволяет получить более достоверные результаты.

Отметим также работы [270–272], в которых проведено сравнение численных решений КУ и спектров исходной модели динамики волн на поверхности глубокой воды. Эти работы ориентированы на практическую задачу о возникновении волн на поверхности морей и океанов с учётом эффектов неоднородной накачки и диссипации, НД, энергии. Сравнения спектров проводились лишь на качественном уровне (их графики сопоставлялись визуально).

Диссертационное исследование направлено в большей мере на фундаментальные аспекты применимости ТВТ, нежели чем на моделирование конкретного волнового явления. При этом для получения наглядных результатов в этом параграфе рассматривается свободная эволюция спектров без НД. В качестве меры отклонения спектров здесь используются *центроиды энергии и волнового действия* (их смысл описан также в [60, sec. 2.1.3]). Далее будет удобно ввести обозначения

$$\eta_{\omega}(t) = \int_{\Delta_{\omega}} \mathcal{P}_{\omega 23} n_c n_2 n_3 d\omega_2 d\omega_3, \quad \gamma_{\omega}(t) = \int_{\Delta_{\omega}} \mathcal{P}_{\omega 23} [n_c(n_2 + n_3) - n_2 n_3] d\omega_2 d\omega_3 \quad (4.1)$$

и переписать уравнение (0.17) в виде

$$\frac{d}{dt} n_{\omega} = \eta_{\omega}(t) - n_{\omega}(t) \gamma_{\omega}(t). \quad (4.2)$$

Поскольку мы исследуем изотропное взаимодействие волн, естественно ввести спектры волнового действия и энергии, осреднённые по сфере в пространстве Фурье (в  $\mathbf{k}$ -пространстве). Определим их следующим образом:

$$n^{\text{rad}}(k, t) = \int n_{\mathbf{k}}(t) k^2 dS, \quad (4.3)$$

$$E^{\text{rad}}(k, t) = \int n_{\mathbf{k}}(t) k^4 dS = k^2 n^{\text{rad}}(k, t), \quad (4.4)$$

где  $dS$  – элемент поверхности единичной сферы в трёхмерном  $\mathbf{k}$ -пространстве,  $k = |\mathbf{k}|$ . Отметим, что  $n^{\text{rad}}(k, t)$  и  $E^{\text{rad}}(k, t)$  обозначают распределения частиц и энергии по  $k$ ; таким образом, для плотности частиц (0.18) и энергии (0.19) имеют место соотношения

$$N = \int_0^{\infty} n^{\text{rad}}(k, t) dk \quad \text{и} \quad H_2 = \int_0^{\infty} E^{\text{rad}}(k, t) dk. \quad (4.5)$$

#### 4.1.1. Волновая турбулентность и статистика высокого порядка

Хорошо известна гипотеза о том, что статистика случайных слабонелинейных волновых взаимодействий близка к гауссовой. Уравнения эволюции ФПВ для интенсивностей волн, полученные в [76], подтверждают эту гипотезу, однако из них также следует, что характерное время эволюции ФПВ и спектра идентичны. В этой связи можно утверждать, что в нестационарных системах статистика волновых взаимодействий может существенно отличаться от гауссовой, если начальные волновые распределения не являются гауссовыми. Подчеркнём, что негауссовы (детерминированные) начальные условия типичны для численного моделирования в ГВТ. Также нет оснований считать, что начальное волновое поле, возникающее в естественных условиях, например морские волны, возбуждаемые ветром, должно подчиняться гауссовой статистике (ГС). Таким образом, изучение эволюции статистики волновых систем важно как для понимания природы нелинейных процессов, так и для решения практических задач, например, для прогнозирования волновой погоды. Ниже мы используем общее решение уравнения для ФПВ, полученное в [269], а также выражения для моментов и кумулянтов ФПВ из [273].

Пусть  $a_{\mathbf{k}}$  – переменная волнового действия, см. (0.10). Функция плотности вероятности  $\mathcal{P}(s_{\mathbf{k}}, t)$  интенсивности волны  $J_{\mathbf{k}} = |a_{\mathbf{k}}|^2$  определяется стандартным образом, т. е. вероятность того, что  $J_{\mathbf{k}}$  находится в диапазоне от  $s_{\mathbf{k}}$  до  $s_{\mathbf{k}} + ds_{\mathbf{k}}$ , есть  $\mathcal{P}(s_{\mathbf{k}}, t) ds_{\mathbf{k}}$ . Отсюда следует, что

$$\mathcal{P}(s_{\mathbf{k}}, t) = \langle \delta(s_{\mathbf{k}} - J_{\mathbf{k}}) \rangle, \quad (4.6)$$

где, как и в § 0.1 введения, угловые скобки означают осреднение по ансамблю начальных данных. В [76] при использовании ПСФА и предположения о слабой нелинейности взаимодействия волн получено следующее уравнение, описывающее эволюцию  $\mathcal{P}(s_{\mathbf{k}}, t)$ :

$$\frac{\partial \mathcal{P}(s_{\mathbf{k}}, t)}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial s_{\mathbf{k}}} = 0, \quad F = -s_{\mathbf{k}} \left( \gamma_{\mathbf{k}} \mathcal{P} + \eta_{\mathbf{k}} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial s_{\mathbf{k}}} \right), \quad (4.7)$$

$$\eta_{\mathbf{k}}(t) = 4\pi \int \delta_{23}^{\mathbf{k}1} \delta(\omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2} - \omega_{\mathbf{k}_3}) n_{\mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}_2} n_{\mathbf{k}_3} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3,$$

$$\gamma_{\mathbf{k}}(t) = 8\pi \int \delta_{23}^{\mathbf{k}1} \delta(\omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2} - \omega_{\mathbf{k}_3}) \left[ n_{\mathbf{k}_1} (n_{\mathbf{k}_2} + n_{\mathbf{k}_3}) - n_{\mathbf{k}_2} n_{\mathbf{k}_3} \right] d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3,$$

где  $\delta_{23}^{\mathbf{k}1} = \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)$  – дельта-функция Дирака. Отметим, что, используя обозначения  $\eta_{\mathbf{k}}$  и  $\gamma_{\mathbf{k}}$ , КУ (0.14) можно представить в виде  $\frac{\partial}{\partial t} n_{\mathbf{k}} = \eta_{\mathbf{k}} - \gamma_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$ . В изотропном случае  $\eta_{\mathbf{k}} = \eta_{\omega}$ ,  $\gamma_{\mathbf{k}} = \gamma_{\omega}$ , см. (4.1).

Как правило, характерное время эволюции ФПВ и решения КУ совпадают и определяются выражением  $T_{kin} \sim \min(1/\gamma_{\mathbf{k}}, n_{\mathbf{k}}/\eta_{\mathbf{k}})$ . Исключения представляют случаи, когда спектр близок к стационарному решению КУ (например, к спектру КЗ), либо когда ФПВ близка к стационарной (соответствующей ГС). В первом случае время эволюции спектра может существенно превышать время эволюции ФПВ, а во втором случае – наоборот.

Фиксируем волновой вектор, опустим индекс  $\mathbf{k}$  и введём функцию Грина  $\mathcal{P}_J(s, t)$ , как решение (4.7), удовлетворяющее детерминированным начальным данным  $\mathcal{P}(s, 0) = \delta(s - J)$ . Тогда решение с произвольными начальными данными  $\mathcal{P}(J, 0)$  можно представить в виде

$$\mathcal{P}(s, t) = \int_0^\infty \mathcal{P}(J, 0) \mathcal{P}_J(s, t) dJ. \quad (4.8)$$

Применяя преобразование Лапласа и метод характеристик, получим (см. [269])

$$\mathcal{P}_J(s, t) = \frac{e_J(s, \tilde{n})}{2\pi i} \lim_{T \rightarrow +\infty} \int_{T-i\infty}^{T+i\infty} \frac{\exp(s\rho + \bar{a}/\rho)}{\rho} d\rho = e_J(s, \tilde{n}) I_0(2\sqrt{\bar{a}s}), \quad (4.9)$$

где

$$\tilde{n} = n(t) - J \exp\left(-\int_0^t \gamma(\tau) d\tau\right), \quad n(0) = J, \quad (4.10)$$

$e_J(s, \tilde{n}) = \exp(-s/\tilde{n} - \bar{a}\tilde{n})/\tilde{n}$ ,  $\bar{a} = J \exp\left(-\int_0^t \gamma(\tau) d\tau\right)/\tilde{n}^2$ ,  $I_0(x)$  – модифицированная функция Бесселя первого рода нулевого порядка. Подчеркнём, что в



(4.10) функция  $n(t)$  считается заданной. Таким образом, нахождение ФПВ представляет собой двухэтапный процесс: во-первых, нужно найти  $n_{\mathbf{k}}(t)$  путем численного решения КУ; а во-вторых, подставить результат в указанные выше формулы. Отметим, что для гауссовых полей ФПВ есть  $\mathcal{P}_G = e^{-s/n}/n$ .

Скорость сходимости ФПВ к ГС выше при тех значениях волновых чисел, для которых начальные значения спектра меньше. Действительно, в пределе  $J = n(0) \rightarrow 0$  имеем  $\tilde{n} \rightarrow n$  и  $\bar{a} \rightarrow 0$ , так что  $\mathcal{P}_J \rightarrow \mathcal{P}_G = e^{-s/n}/n$ . Однако при больших  $t$  и  $\bar{a}s \gg 1$ , учитывая, что  $\lim_{x \rightarrow \infty} I_0(x) = e^x/\sqrt{2\pi x}$ , имеем

$$\mathcal{P}_J(s, t) \rightarrow \frac{\mathcal{P}_G}{(2\pi)^{1/2}(\bar{a}s)^{1/4}} e^{2\sqrt{\bar{a}s} - \bar{a}s} \ll \mathcal{P}_G. \quad (4.11)$$

Таким образом, существует фронт  $s \sim s^*(t) = 1/\bar{a}$ , движущийся в сторону больших  $s$  при  $t \rightarrow \infty$ . Значения ФПВ перед этим фронтом существенно меньше значений ФПВ, характерных для гауссовой статистики (ФПВ ГС). За фронтом ФПВ сходится к значениям ФПВ ГС асимптотически.

Ниже мы также будем исследовать эволюцию момента порядка  $p$ . Для фиксированного  $\mathbf{k}$  имеем

$$M^{(p)} = \langle |a_{\mathbf{k}}|^{2p} \rangle, \quad p = 1, 2, 3, \dots$$

Спектр волнового действия  $n_{\mathbf{k}}$  совпадает с первым моментом  $M^{(1)}$ , тогда как моменты более высокого порядка содержат информацию о случайных флуктуациях спектра и о его среднем значении. Например, для стандартного отклонения имеем выражение

$$\hat{\sigma} = (\langle |a_{\mathbf{k}}|^4 \rangle - \langle |a_{\mathbf{k}}|^2 \rangle^2)^{1/2} = (M^{(2)} - (M^{(1)})^2)^{1/2}. \quad (4.12)$$

Если амплитуды волн детерминированы, то  $M^{(p)} = (M^{(1)})^p$  и  $\hat{\sigma} = 0$ . Для противоположного случая больших флуктуаций имеем  $M^{(p)} \gg (M^{(1)})^p$ . Такое неравенство означает, что спектр сильно разрежен в  $k$ -пространстве и характеризуется небольшим количеством прерывистых пиков.

Для волновых полей, подчиняющихся ГС, можно записать:  $M^{(p)} = p! (M^{(1)})^p$ . С целью анализа отклонений от такой статистики полезно рассмотреть также относительные кумулянты

$$F^{(p)} = \frac{M^{(p)} - p! (M^{(1)})^p}{p! (M^{(1)})^p}, \quad p = 1, 2, 3, \dots \quad (4.13)$$

По определению  $F^{(1)}$  всегда равен нулю;  $F^{(2)}$  характеризует ширину распределения амплитуд коэффициентов Фурье и определяет стандартные отклонения случайных флуктуаций спектра волнового действия:  $\widehat{\sigma}^2 = M^{(2)} - (M^{(1)})^2 = (M^{(1)})^2(2F^{(2)} + 1)$ .

#### 4.1.2. Построение вычислительных моделей для УГП и КУ

С целью верификации ТВТ для УГП и КУ сформулируем задачи Коши с идентичными начальными данными в виде спектров гауссовой формы:

$$n^{\text{rad}}(k, 0) = g_0 \exp\left(\frac{-(k - k_s)^2}{\sigma^2}\right). \quad (4.14)$$

Выбор значений  $k_s$ ,  $\sigma$ ,  $g_0$ , с одной стороны, должен обеспечивать достаточно продолжительную свободную эволюцию спектра в сторону нулевой моды  $k = 0$  до формирования конденсата. С другой стороны, значение  $k_s$  не должно быть слишком большим, чтобы прямой каскад энергии [59, 60] мог развиваться в течение достаточно длительного времени, прежде чем фронт спектра коснётся линии  $k = k_{\text{cutoff}}$  — правой границы расчетной области в пространстве Фурье. С учётом этих факторов были выбраны следующие значения параметров:  $g_0 = 1$ ,  $k_s = 22$ ,  $\sigma = 2.5$  и  $k_{\text{cutoff}} = 43$ .

Для сравнения решений КУ и спектров решений УГП используем дисперсионное соотношение  $\omega = k^2$  и формулу

$$n^{\text{rad}}(k, t) = 4\pi k^2 n_\omega(t). \quad (4.15)$$

Таким образом, для КУ устанавливаем  $n_\omega(0) = n^{\text{rad}}(\sqrt{\omega}, 0)/4\pi\omega$ .

Здесь и далее будем рассматривать УГП (0.9) в трехмерном физическом пространстве, считая  $\psi(\mathbf{r}, t)$  комплекснозначной функцией, периодической по каждой из координат  $\mathbf{r}$  с периодом  $L$ . Начальные данные для УГП задаём в виде  $\hat{\psi}_{\mathbf{k}}(0) = |\hat{\psi}_{\mathbf{k}}(0)| \exp(i\phi_{\mathbf{k}}(0))$  с детерминированными начальными значениями амплитуд  $|\hat{\psi}_{\mathbf{k}}(0)| = \sqrt{\frac{n^{\text{rad}}(k, 0)}{4\pi k^2}} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$  и начальными фазами  $\phi_{\mathbf{k}}(0)$ , являющимися независимыми случайными величинами, распределенными равномерно на интервале  $[0, 2\pi)$ . Такая постановка задачи для УГП обеспечивает

выполнение ПСФА при  $t = 0$ , а также приводит к тому, что начальные данные для ФПВ интенсивностей  $J_{\mathbf{k}} = |\hat{\psi}_{\mathbf{k}}|^2$  представляются  $\delta$ -функцией.

Опишем кратко вычислительные модели для УГП и КУ.

Для решения (0.9) использован пакет программ FROST [274] с параллельной реализацией быстрого преобразования Фурье (библиотека FFTW [245]) и схемой Рунге–Кутты четвертого порядка [275] для итераций по временной переменной. Численные решения УГП, представленные ниже, получены Ying Zhu и Giorgio Krstulovic в рамках работы [85]. Для сравнения этих решений с результатами, полученными соискателем для КУ, удобно рассматривать осреднённый спектр  $n^{\text{rad}}(k, t)$ , см. (4.3). Для его приближённого вычисления по решениям УГП использована формула

$$n^{\text{rad}}(k, t) = \frac{1}{D_k} \sum_{\mathbf{k} \in \Gamma_k} |\hat{\psi}(\mathbf{k}, t)|^2. \quad (4.16)$$

Здесь  $\Gamma_k$  – сферический слой со срединной поверхностью  $|\mathbf{k}| = k$  и с толщиной  $D_k$ , равной расстоянию  $2\pi/L$  между узлами сетки используемого метода в пространстве Фурье. Такой способ осреднения является корректным для случая изотропного взаимодействия волн. Отметим также, что для расчёта осреднённого спектра (4.16) и ФПВ для интенсивностей волн  $J_{\mathbf{k}}$ , строго говоря, необходимо запускать программу большое количество раз и набирать статистику. Однако такие вычисления будут чрезмерно ресурсоёмкими. Вместо многократного запуска программы, основываясь на свойстве изотропии спектра, мы получаем статистическое осреднение за счет использования всех волновых векторов, содержащихся в сферическом слое  $\Gamma_k$ . Подчеркнём, что начальные условия для УГП являются изотропными, и это свойство сохраняется в процессе моделирования до тех пор, пока спектр не достигает границы  $k_{\text{cutoff}}$  частотной области, в которой решается УГП.

Решение УГП рассчитывалось с разрешениями  $N_p = 128, 256$  и  $512$  при фиксированном максимальном значении  $|\mathbf{k}|$ , равном  $k_{\text{cutoff}}$ . Длина периода  $L$  задавалась как  $L = 2\pi, 4\pi$  и  $8\pi$  соответственно. Для каждого значения  $N_p$  установлен постоянный шаг по времени так, что относительное изменение инвариантов (плотности числа частиц и энергии) не превышает  $10^{-4}$ .

В рамках этого параграфа для решения КУ (0.17) использованы методы расчёта интеграла столкновений и приближения спектра, разработанные

в п. 2.2.1, 2.2.2. Однако для реализации итераций по временной переменной оказалось достаточно использовать схему Рунге–Кутты второго порядка. Решение КУ разыскивалось в спектральном диапазоне  $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$ , где  $\omega_{\min} = 0.1^2$ ,  $\omega_{\max} = 86^2$ . При этом для расчёта интеграла столкновений использовано продолжение функции  $n_\omega(t)$  на отрезок  $\omega \in [0, \omega_{\min}]$  постоянным значением  $n_{\omega_{\min}}(t)$ , а для всех  $t > 0$  и  $\omega > \omega_{\max}$  задано  $n_\omega(t) = 0$ .

Размер частотного диапазона, в котором решалось КУ, представляет 6–7 декад. Шаг по времени и сгущение узлов пространственной сетки (параметры отображения (2.32)) заданы так, чтобы обеспечить сохранение инвариантов с высокой точностью. Отметим, что решение задачи Коши для КУ, как правило, демонстрирует неограниченный рост (blow-up) в некоторый конечный момент времени  $t^*$  в окрестности нулевой моды  $\omega = 0$ , см. детальное исследование этого эффекта в § 4.4 и в [79–81, 182]. В рамках рассматриваемой постановки  $t^* \approx 126.7$ . Для времён  $t \in [0, 100]$ , далеких от  $t^*$ , использована сетка по частотной переменной с 128 узлами. Максимальные относительные отклонения плотностей частиц и энергии от их начальных значений в таком случае составляют  $4.7 \times 10^{-5}$  и  $7.6 \times 10^{-4}$  соответственно. Это незначительное нарушение законов сохранения происходит главным образом из-за утечки частиц и энергии через границу  $\omega_{\max}$ . Для расчёта спектра в момент времени  $t = 125.7$ , лежащий довольно близко к  $t^*$  (см. рис. 4.4), для уменьшения утечки спектральная область расширена до  $[\omega_{\min}, \omega_{\max}] = [0.001, 100^2]$  и использована более подробная сетка из 1024 узлов. При этом наибольшее относительное отклонение от начальных значений,  $3.69 \times 10^{-4}$ , наблюдается для плотности частиц. Заметим, что это отклонение сопровождается довольно большой, порядка 15%, погрешностью аппроксимации спектра в окрестности  $\omega_{\min}$ . Эту погрешность удалось оценить путем сравнения результатов, полученных на сетках из 1024 и 512 узлов. В целом, из проведённых экспериментов на сходимость следует, что даже в моменты времени, предельно близкие к  $t^*$ , разработанный метод решения КУ дает адекватное описание волновой кинетики. Более подробную информацию можно найти в приложении статьи [85].

**Расчёт ФПВ.** Амплитуды начальных данных в наших расчётах детерминированы, поэтому ФПВ может быть рассчитана через функцию Грина  $\mathcal{P}_J(t, s)$ , см. (4.8), с начальными значениями  $\delta(s - J)$ . Для анализа  $\mathcal{P}_J(t, s)$ ,

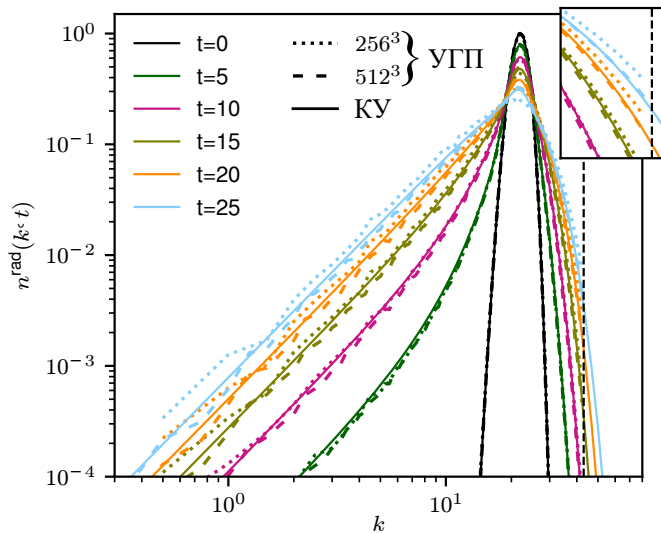
определённых по формуле (4.9), при различных  $k = |\mathbf{k}|$  удобно нормировать переменную  $s$  и ФПВ так, чтобы первый момент, посчитанный с использованием новой переменной, был равен единице.

Введём нормированную ФПВ,  $\tilde{\mathcal{P}}_J(t, \tilde{s}) = \langle s \rangle P_J(t, \tilde{s}/\langle s \rangle)$ , с новой случайной переменной  $\tilde{s} = s/\langle s \rangle$ , где  $\langle s \rangle$  представляет осреднение интенсивности волн  $J_{\mathbf{k}}$  по ансамблю реализаций в момент времени  $t$ . После такой перенормировки ФПВ ГС приобретает вид  $\mathcal{P}_G(\tilde{s}) = \exp(-\tilde{s})$ .

Для вычисления нормированной ФПВ,  $\tilde{\mathcal{P}}(t, \tilde{s})$ , необходимо сначала численно решить КУ, применяя описанный выше алгоритм. Затем, в соответствии с формулой (4.9), найденное решение КУ нужно использовать для расчёта  $\mathcal{P}_J(t, s)$ . Для вычисления интеграла от  $\gamma(\tau)$  в выражении (4.10) применена квадратурная формула Гаусса с девятью узлами. В расчётах проверялось, что ФПВ нормирована правильно, а среднее значение  $\tilde{s}$  равняется единице с погрешностью, не превышающей  $3 \times 10^{-4}$ .

### 4.1.3. Сравнение кратковременной эволюции спектров УГП и КУ

На рис. 4.1 изображено сравнение эволюции спектров волнового действия  $n^{\text{rad}}(k, t)$ , полученных при решении УГП и КУ с начальными данными (4.14).



**Рис. 4.1.** Эволюция  $n^{\text{rad}}(k, t)$  на коротком временном интервале  $t \in [0, 25]$ . Спектры решений УГП, полученных с разрешениям  $256^3$  и  $512^3$ , и решения КУ в моменты времени  $t = 0, 5, 10, 15, 20, 25$ . Вертикальная пунктирная линия показывает предельное волновое число  $k_{\text{cutoff}} \approx 43$

Под характерным временем  $T_{kin}$  эволюции спектра здесь и далее будем понимать время, за которое максимум спектра уменьшается до половины его начального значения. Для рассмотренной постановки имеем  $T_{kin} \approx 15$ . Решения УГП и КУ демонстрируют высокоточное соответствие до момента времени  $t = 25$ . Результаты для УГП, полученные с разрешением  $512^3$ , лучше согласуются с решениями КУ, чем результаты с разрешением  $256^3$ , т. е. имеет место сходимост. Скорость движения спектрального фронта для УГП в сторону малых  $k$  при использовании разрешения  $256^3$  сначала (при  $t < 10$ ) немного меньше, а затем (при  $t > 10$ ) немного больше, чем скорость движения фронта решения КУ. Спектры, полученные с помощью решения УГП с разрешением  $512^3$ , эволюционируют с незначительным отставанием от решений КУ. В ультрафиолетовой области – при больших  $k$  – решения УГП с разрешениями  $256^3$  и  $512^3$  начинают заметно отклоняться друг от друга при  $t > 20$ , причем первое из них демонстрирует также значительные отклонения от решений КУ (см. увеличенный график в правом верхнем углу рис. 4.1). Вертикальная пунктирная линия на рис. 4.1 соответствует максимальному значению частоты  $k_{cutoff} \approx 43$ , используемому в методе решения УГП. Максимальное волновое число при решении КУ в два раза больше:  $k_{max} = \sqrt{\omega_{max}} = 2k_{cutoff} = 86$ .

Из рис. 4.1 видно, что при малых  $k$  у спектра решения УГП появляются колебания, приводящие к незначительным отклонениям результатов, полученных для УГП и КУ. Такие колебания связаны с дискретностью  $k$ -пространства при решении УГП. Количественное сравнение результатов, полученных для УГП и КУ, можно провести, анализируя *центроиды волнового действия и энергии*  $K_N$  и  $K_E$  (их можно определить как волновые числа, содержащие наибольшее количество частиц и энергии соответственно; см. также [60, sec. 2.1.3]) и их среднеквадратичные отклонения  $\Delta_{K_N}$  и  $\Delta_{K_E}$  на интервале  $[0, k_{cutoff}]$ . Эти величины выражаются следующим образом:

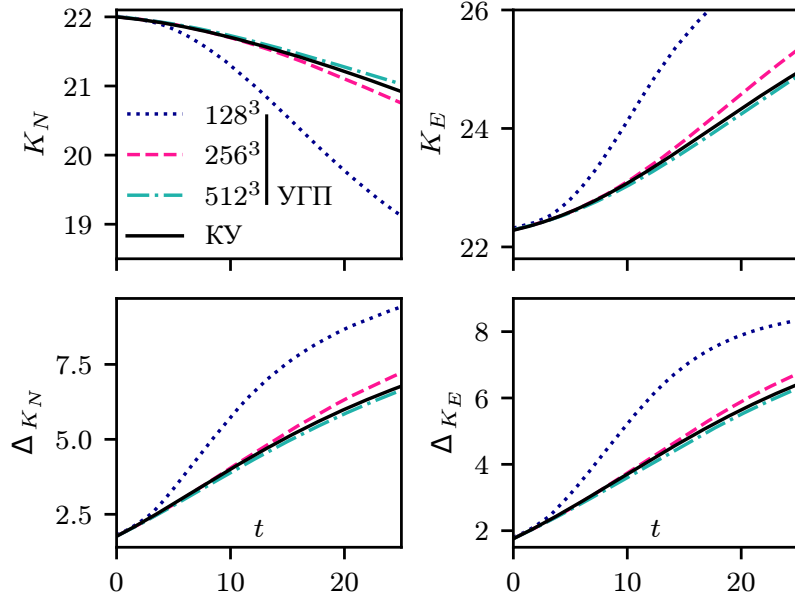
$$K_N(t) = \frac{1}{N_c(t)} \int_0^{k_{cutoff}} kn^{rad}(k, t) dk,$$

$$\Delta_{K_N}(t) = \sqrt{\frac{1}{N_c(t)} \int_0^{k_{cutoff}} (k - K_N)^2 n^{rad}(k, t) dk},$$

$$K_E(t) = \frac{1}{H_c(t)} \int_0^{k_{\text{cutoff}}} k E^{\text{rad}}(k, t) dk,$$

$$\Delta_{K_E}(t) = \sqrt{\frac{1}{H_c(t)} \int_0^{k_{\text{cutoff}}} (k - K_E)^2 E^{\text{rad}}(k, t) dk}.$$

Здесь, в соответствии с (4.3)–(4.5), осреднённый энергетический спектр КУ (он совпадает с линейной компонентой спектра энергии УГП) есть  $E^{\text{rad}}(k, t) = k^2 n^{\text{rad}}(k, t)$ ;  $N_c(t) = \int_0^{k_{\text{cutoff}}} n^{\text{rad}}(k, t) dk$  и  $H_c(t) = \int_0^{k_{\text{cutoff}}} E^{\text{rad}}(k, t) dk$ . Для УГП  $N_c(t) = N$  является постоянной величиной, но  $H_c(t) = H_2(t)$  отклоняется от своего начального значения примерно на 1% при  $t = 25$  (УГП сохраняет плотность полной энергии  $H$ , включая энергию нелинейной динамики, см. (0.12)). Для КУ  $N_c(t)$  и  $H_c(t)$  также не являются постоянными, поскольку имеет место утечка этих величин в область  $k > k_{\text{cutoff}}$ .



**Рис. 4.2.** Динамика центроидов  $n^{\text{rad}}(k, t)$  и  $E^{\text{rad}}(k, t)$  и их отклонений  $\Delta_{K_N}$  и  $\Delta_{K_E}$  на интервале  $t \in [0, 25]$ . Результаты, полученные при решении УГП с разрешениями  $128^3$ ,  $256^3$  и  $512^3$ , и при решении КУ

На рис. 4.2 показаны значения центроидов и их среднеквадратичных отклонений при  $t \in [0, 25]$ . Эти величины получены путем решения КУ и УГП с разрешениями  $128^3$ ,  $256^3$  и  $512^3$ . На коротких временных интервалах при  $t < 3$  указанные величины для УГП и КУ совпадают с высокой точностью. Отклонения между решениями УГП с разрешениями  $256^3$  и  $512^3$  остаются весьма небольшими до гораздо более поздних времен,  $t \sim 25$ . Поскольку хо-

рошая точность достигается при решении УГП с разрешением  $512^3$ , далее все результаты УГП приводятся с этим разрешением.

Важно заметить, что в проведённых расчётах верифицированы условия, необходимые для реализации слабонелинейных четырёхволновых взаимодействий. Во-первых, в рассмотренных режимах эволюции спектра конденсация отсутствует: при  $t \leq 25$  величина  $C_0 = \frac{|\hat{\psi}_0|^2}{N}$  ограничена значением  $5 \times 10^{-7}$ , а размер области конденсации в волновом пространстве  $0 \leq k < k_\xi = \sqrt{N} = 2.21$  достаточно мал (здесь  $N$  – плотность числа частиц, см. (0.11)). Это означает, что почти для всех волновых чисел  $k > k_\xi$  влияние конденсации незначительно, а дисперсионное соотношение  $\omega = k^2$  выполняется с высокой точностью.

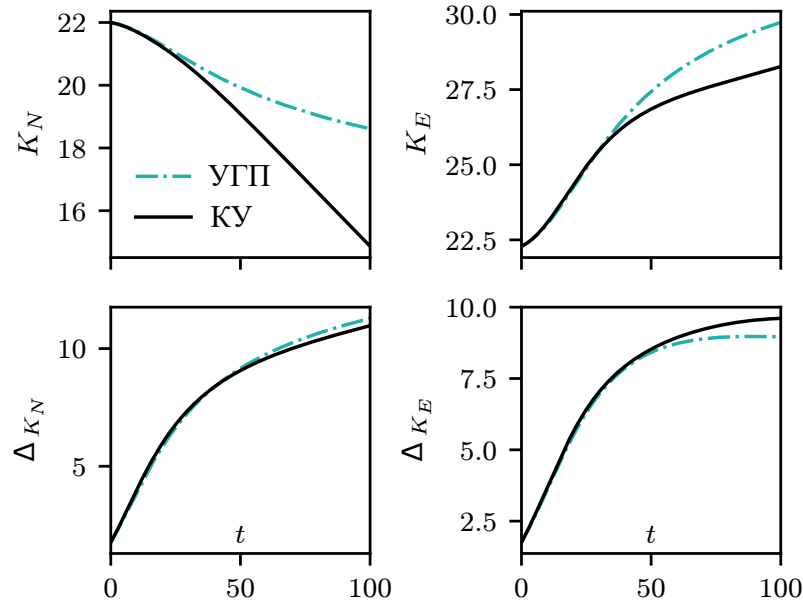
Во-вторых, для среднеквадратичного отклонения  $\delta(k)$  значений пространственно-временной спектральной плотности решения УГП от параболы  $\omega = k^2 + 2N$  ( $2N$  – нелинейная поправка) в большинстве точек плоскости  $k - \omega$  имеют место следующие ограничения: 1)  $\delta(k) < \omega(k)$  и 2)  $\Delta\omega(k) < \delta(k)$ , где  $\Delta\omega(k)$  – расстояния между соседними модами в частотном пространстве. Выполнение таких ограничений означает, что мы находимся в режиме слабой нелинейности: между линейным и нелинейным временными масштабами. Кроме того, второе ограничение обеспечивает возможность нелинейных резонансных и квазирезонансных взаимодействий между волнами [60]. Указанные ограничения подробно обсуждаются в [85], см. также [276–281]. Важно отметить, что с течением времени диапазон точек плоскости  $k - \omega$ , в котором выполняются ограничения 1), 2), становится уже.

В-третьих, эффекты дискретности спектра решения УГП проявляются наиболее существенно в области малых  $k$ , лежащих в небольшой окрестности левой границы рассматриваемого волнового диапазона.

#### 4.1.4. Сравнение долговременной эволюции спектров УГП и КУ

Выше показано высокоточное соответствие спектров УГП и решений КУ на временах порядка  $2T_{kin}$ . Продолжая расчёт, мы можем наблюдать, как отклонение спектров постепенно возрастает, но при этом соответствие их важных качественных свойств сохраняется. На рис. 4.3 изображены графики центроидов и их среднеквадратичных отклонений при  $t \in [0, 100]$ . Центроиды спектров волнового действия УГП и КУ начинают отклоняться несколько



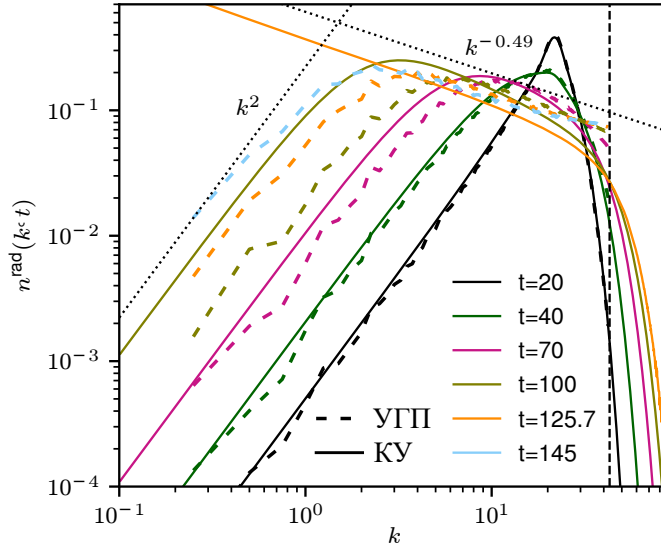


**Рис. 4.3.** Динамика центроидов  $n^{\text{rad}}(k, t)$  и  $E^{\text{rad}}(k, t)$  и среднеквадратичных отклонений. Результаты, полученные при решении УГП с разрешением  $512^3$  и КУ при  $t \in [0, 100]$

раньше, чем центроиды энергетических спектров. Значения  $\Delta_{K_N}$  и  $\Delta_{K_E}$ , посчитанные для КУ и УГП, отклоняются меньше, чем значения центроидов — их графики остаются очень близкими вплоть до момента времени  $t \approx 50$ .

Сравнение спектров УГП и решений КУ вплоть до момента  $t = 100$  представлено на рис. 4.4. Стремительный рост их отклонений наблюдается как при малых, так и при больших  $k$ , начиная примерно с  $t = 40$ . Спектр решения УГП в прямом каскаде (при  $k > k_s$ ) эволюционирует быстрее, чем решение КУ, а в обратном каскаде (при  $k < k_s$ ) — медленнее. Этот эффект можно также наблюдать на рис. 4.3 — эволюция  $K_N$  для УГП в область малых  $k$  происходит медленнее, чем эволюция  $K_N$  для КУ. Для эволюции  $K_E$  в область больших  $k$  наблюдается противоположная ситуация.

Важно отметить, что несмотря на существенные отклонения значений спектров при долговременной эволюции, все спектры при малых  $k$  демонстрируют глобальное термодинамическое равновесие, соответствующее степенному выражению  $k^2$  (линия из точек слева на рис. 4.4). При этом характерные времена эволюции таких спектров для случая КУ и УГП различны. Дело в том, что для адекватного описания долговременной эволюции спектров нужно учитывать прогноз о неограниченном росте (blow-up) решения



**Рис. 4.4.** Долговременная эволюция спектра  $n^{\text{rad}}(k, t)$ . Результаты, полученные при решении УГП с разрешением  $512^3$  и при решении КУ в моменты времени  $t = 20, 40, 70, 100, 125.7, 145$  (решение при  $t = 145$  получено только для УГП)

КУ в точке  $\omega = 0$  в конечный момент времени  $t^*$  [79–81, 182]. Найти решение КУ при  $t > t^*$  без модификации модели для учёта эволюции конденсата в точке  $\omega = 0$  не представляется возможным. При численном анализе задачи Коши (0.17), (4.14) с заданными параметрами было установлено, что  $t^* \approx 126.7$ .

В окрестности момента времени  $t = t^*$  имеет место автомодельная эволюция спектра, причём спектр имеет степенной вид:  $n^{\text{rad}}(k) \sim k^{-\bar{x}^*}$ . Значение  $\bar{x}^*$  отличается от показателя стационарного спектра КЗ, равного в данном случае  $1/3$ . Неклассический автомодельный спектр детально изучен ниже в § 4.4 при решении нелинейной спектральной задачи для КУ (см. также [182, 282]). Из рис. 4.4 видно, что при  $t \approx t^*$  решения КУ близки к степенной функции  $k^{-0.49}$  (она показана точками), а спектр решения УГП является немного более пологим, что, вероятно, связано с его возрастанием вблизи границы  $k_{\text{cutoff}}$ .

Дадим несколько комментариев по поводу отличия спектров прямого и обратного каскадов, полученных при решении УГП и КУ, связанного с подходами к дискретизации уравнений. Легко видеть, что при малых волновых числах (при  $k < 10$ ) спектры УГП начинают достаточно сильно колебаться при  $t = 40$ , в то время как решения КУ на всём временном интервале  $t \in [0, 125.7]$  сохраняют высокую гладкость. В этом проявляется *высокая практическая ценность методов приближения, разработанных в гл. 1*. Действительно, в

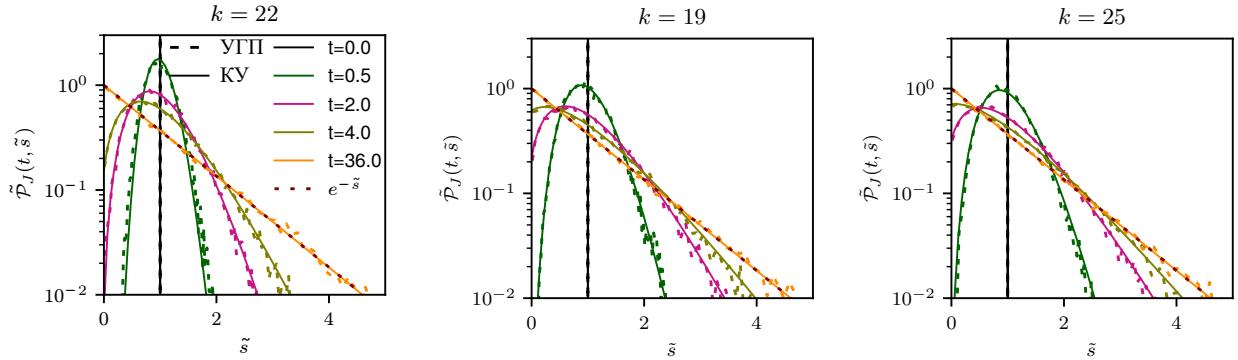
рамках ТВТ в силу осреднения по ансамблю реализаций естественно полагать высокую гладкость спектров, но при этом спектры могут иметь существенные особенности (blow-up при  $t = t^*$ , крутые градиенты спектров НД). В связи с этим применение здесь методов без насыщения и разработанных дробно-рациональных приближений строго соответствует принципу адекватности, изложенному в начале введения. Спектры решений УГП не усреднены по ансамблю реализаций (или по времени): единственное усреднение происходит в 3D пространстве Фурье при использовании формулы (4.16). И нужно заметить, что при уменьшении  $k$  сферический слой  $\Gamma_k$  в (4.16) содержит всё меньше волновых мод. Именно этот факт приводит к значительным колебаниям спектра УГП при малых  $k$ .

Значительное отставание спектра УГП от решения КУ в обратном каскаде, описывающем процесс пре-конденсации, можно объяснить, вспомнив критерий из [114] – необходимое условие образования конденсата в системах с ограниченным максимальным волновым числом  $k_{\max}$  есть  $H_2/N < k_{\max}^2/3$ , где  $N$  и  $H_2$  – плотность числа частиц и энергии, см. (4.5). Важные нюансы, связанные с применением этого условия при решении КУ, обсуждаются в п. 4.3.1 и 4.3.2. В расчётах для УГП,  $k_{\max} = k_{\text{cutoff}} = 43$ , а для КУ  $k_{\max} = 86$ . Указанное условие выполнялось как для КУ, так и для УГП, но при поиске решений УГП соотношение  $H_2/N$  было существенно ближе к  $k_{\max}^2/3$ , что влияет на скорость формирования конденсата. Увеличение же  $k_{\text{cutoff}}$  при расчёте УГП связано со значительными сложностями: во-первых, требуется существенно повысить пространственное разрешение (что ведёт к многократному росту времени расчётов); во-вторых, рост  $k_{\text{cutoff}}$  ведёт к формированию так называемого «бутылочного горлышка» ("*bottleneck*" *phenomenon*) [283–286] – численного эффекта блокировки потока энергии на высоких частотах, мешающего адекватному описанию волновой кинетики.

#### 4.1.5. Статистика низкого и высокого порядков

Прежде всего приведём результаты сравнений ФПВ и кумулянтов малых порядков, полученных при численном решении УГП и КУ. Рассмотрим эволюцию ФПВ от детерминированных начальных амплитуд к экспоненциальной ФПВ ГС. Для этого будем решать численно УГП и КУ с начальными

данными (4.14) и анализировать эволюцию нормированной ФПВ и относительных кумулянтов при  $k = k_s = 22$ , т. е. в точке максимума спектра начальных данных, и при  $k = 19$  и  $k = 25$ , т. е. в точках, расположенных симметрично относительно  $k = 22$ . Рис. 4.5 и 4.6 демонстрируют эволюцию  $\tilde{\mathcal{P}}_J(t, \tilde{s})$  и  $F^{(p)}(t)$  соответственно.

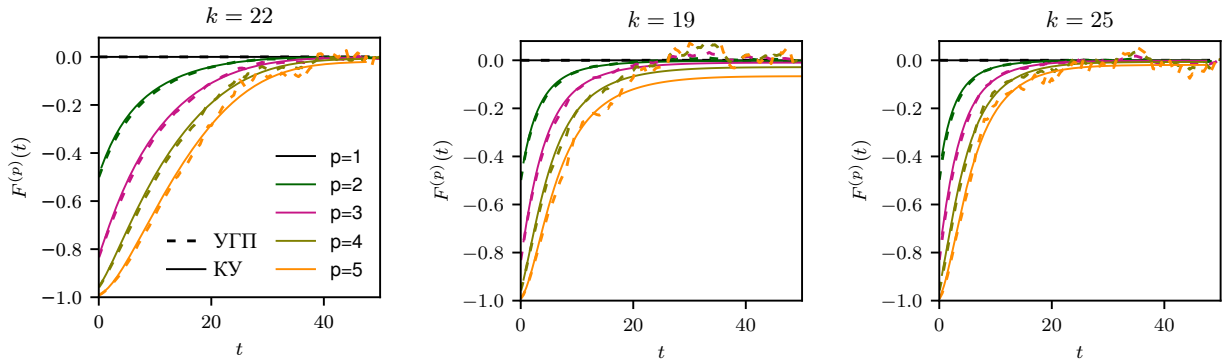


**Рис. 4.5.** Эволюция нормированных функций плотности вероятности  $\tilde{\mathcal{P}}_J(t, \tilde{s})$ . Результаты, полученные при решении УГП с разрешением  $512^3$  и КУ для  $k = 22, 19, 25$

Как и ожидалось, для всех трех мод нормированные ФПВ эволюционируют от  $\delta(\tilde{s} - 1)$  при  $t = 0$  к окончательному экспоненциальному распределению  $e^{-\tilde{s}}$ . В целом, результаты, полученные с помощью УГП, хорошо согласуются с прогнозами на основе КУ. Кроме того, из рис. 4.5 видно, что ФПВ при  $k = 22$  сходятся к гауссовому распределению медленнее, чем ФПВ при  $k = 19$  и  $k = 25$ , т. е. скорость сходимости к гауссовому распределению быстрее для тех  $k$ , в которых исходный спектр  $n^{\text{rad}}(k, 0)$  имеет меньшие значения.

Эволюция относительных кумулянтов первого–пятого порядков, показанная на рис. 4.6, служит дополнительным подтверждением статистических прогнозов на основе КУ. Значения всех кумулянтов с ростом времени сходятся к нулю – состоянию, соответствующему ГС волнового поля (к тому же, скорость сходимости при  $k = 19$  и  $k = 25$  выше, чем при  $k = 22$ ). Для более высоких порядков ( $p = 4, 5$ ) с ростом времени наблюдаются отклонения кумулянтов, полученных при решении УГП, от кумулянтов, найденных при решении КУ. Как объяснялось выше, дискретность спектров УГП и проведённая операция осреднения в определённых случаях не позволяют получить достаточно точное описание ФПВ, особенно для больших значений  $\tilde{s}$ . Дискретизация по времени оказывает большее влияние на точность вычисления моментов высокого порядка, чем моментов низкого порядка. Как следствие,

на рис. 4.6 при  $t < 20$  видно достаточно точное соответствие относительных кумулянтов УГП и КУ вплоть до пятого порядка при  $k = 22$ , но при  $k = 19$  и  $k = 25$  такое соответствие наблюдается лишь при  $p \leq 4$ .



**Рис. 4.6.** Эволюция относительных кумулянтов  $F^{(p)}(t)$ . Результаты, полученные при решении УГП с разрешением  $512^3$  и КУ для  $k = 22, 19, 25$

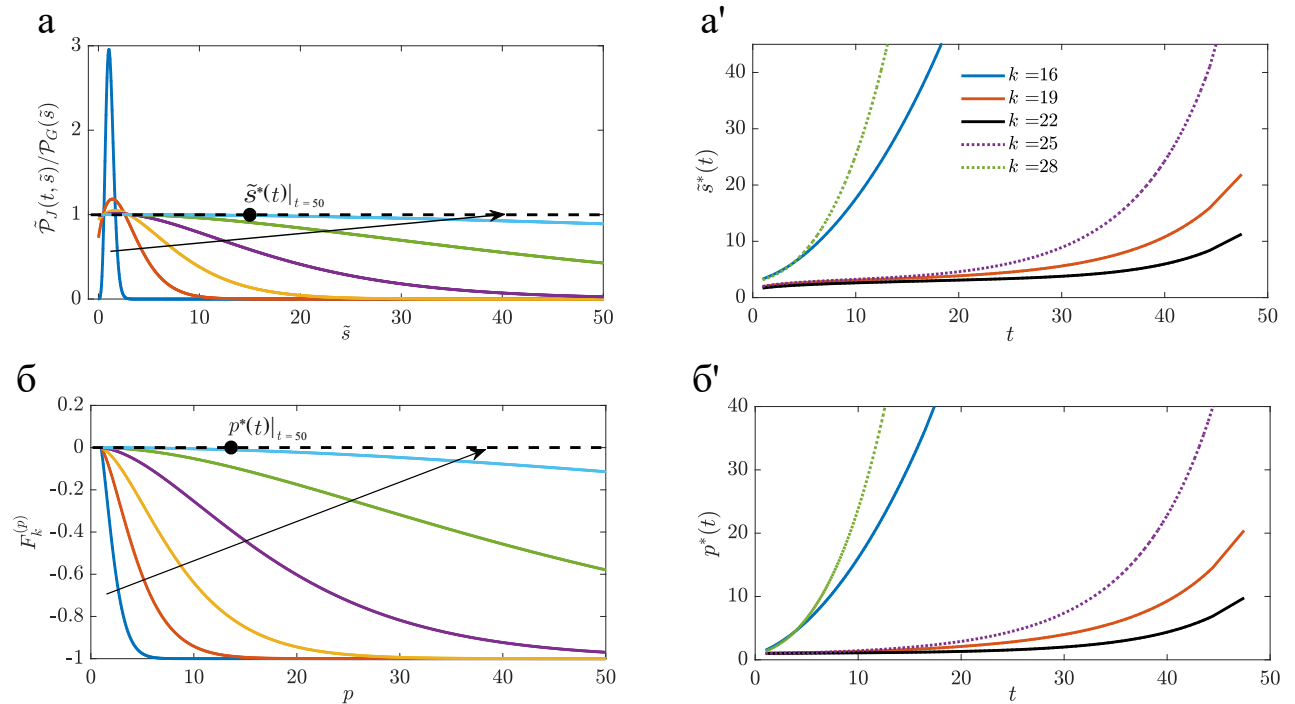
Изучение статистики высокого порядка (с большими значениями  $\tilde{s}$  и  $p$ ) для исходной динамической модели на основе УГП требует реализации большого числа экспериментов, набора статистики и осреднения спектров по ансамблю реализаций. Провести такую работу в силу ограниченности вычислительных ресурсов на данный момент не представляется возможным. Наряду с этим отметим, что имеется инструмент эффективного исследования статистики высокого порядка в рамках ТВТ.

Действительно, для вычисления ФПВ при больших  $\tilde{s}$  в рамках ТВТ, сначала вычислим решение КУ,  $n(t) = n_\omega(t)$  (для этого применим алгоритм, разработанный в § 2.2). Затем используем точное решение уравнения (4.7) для ФПВ, т. е. формулы (4.8)–(4.10), где детерминированные начальные данные  $J$  как функции переменной  $k$  имеют вид (4.14). Для вычисления кумулянтов  $F^{(p)}(t)$  при больших  $p$  используем формулу (4.13), в которой моменты  $M^{(p)}$  являются интегралами от функций  $\tilde{s}^p \tilde{\mathcal{P}}_J(\tilde{s}, t)$ . Таким образом, зная численное решение КУ в рамках ТВТ, можно восстановить статистику высокого порядка по точным формулам.

Из полученных результатов следует, что переход от детерминированных начальных данных к ГС можно представить как движение фронтов вдоль переменных  $\tilde{s}$  и  $p$ . Перед фронтами ФПВ и кумулянты существенно отклоняются от ГС, тогда как за фронтами они с высокой точностью подчиняются этой статистике. Для определения таких фронтов установим пороговое зна-

чение относительного отклонения статистики от гауссовой, равное 1%. Затем для каждого момента времени  $t$  находим точки  $\tilde{s}$  и  $p$ , для которых относительная ФПВ  $\tilde{P}(t, \tilde{s})/\mathcal{P}_G(\tilde{s})$  и кумулянт  $F^{(p)}(t)$  отклоняются от соответствующих кривых ГС на 1%. Далее для этих точек будем использовать обозначения  $\tilde{s}^*(t)$  и  $p^*(t)$  соответственно.

На рис. 4.7, а приведены относительные ФПВ, рассчитанные при  $k = 22$ . Черной точкой показано значение  $\tilde{s} = \tilde{s}^*(t)$ , где кривая, соответствующая  $t = 50$ , отклоняется от предельной линии (обозначенной пунктиром) на 1%, т. е. где отношение текущей ФПВ и ФПВ ГС составляет 0.99. Положение точки  $\tilde{s}^*(t)$  определяет положение фронта, движущегося в сторону больших  $\tilde{s}$  при  $t \rightarrow \infty$ . За этим фронтом ФПВ стремится к гауссовой, тогда как перед фронтом ФПВ отклоняется от гауссовой более чем на 1%. На рис. 4.7, а' при различных  $k$  показаны графики  $\tilde{s}^*(t)$ . Видно, что при достаточно больших  $t$  имеет место ускорение  $\tilde{s}^*$ , которое зависит от волнового числа.



**Рис. 4.7.** Графики относительных функций плотности вероятности (а) и кумулянтов (б), рассчитанных при численном решении КУ в точке  $k = 22$  (стрелки показывают эволюцию во времени и проходят слева направо через кривые, соответствующие  $t = 1, t = 10.8, t = 20.6, t = 30.4, t = 40.1, t = 50$ ; горизонтальная линия показывает распределение Гаусса). Графики  $\tilde{s}^*(t)$  (а') и  $p^*(t)$  (б'), демонстрирующие движение фронтов при различных значениях  $k$

Рассмотрим теперь зависимости значений относительных кумулянтов высокого порядка от  $p$ . На рис. 4.7, б показаны графики этих зависимостей в разные моменты времени при  $k = 22$ . Точке  $p^*(t)$  соответствует значение  $p$ , для которого в момент времени  $t$  кумулянт  $F_k^{(p)}$  принимает значение  $-0.01$ . На рис. 4.7, б' показано распространение фронта, связанное с движением точки  $p^*(t)$ . Следует отметить очевидное сходство эволюции относительных ФПР как функций  $\tilde{s}$  и кумулянтов как функций  $p$ , когда  $t$  достаточно велико.

#### 4.1.6. Обсуждение полученных результатов

Подчеркнём, что цель данного параграфа состоит в верификации ТВТ путем сравнения численных решений уравнения Гросса–Питаевского (УГП) и соответствующего кинетического уравнения (КУ). При таком сравнении необходимо учитывать несколько фундаментальных ограничений.

Во-первых, в рамках ТВТ предполагается, что волновое взаимодействие должно быть достаточно слабым, чтобы характерное время нелинейного процесса передачи энергии между волновыми модами существенно превосходило временной масштаб динамики линеаризованного уравнения. Но при этом нелинейные взаимодействия должны быть достаточно сильными, чтобы инициировать передачу энергии между соседними модами и обеспечить возможность перехода к непрерывному  $k$ -пространству. Используя обозначения  $\delta(k)$ ,  $\Delta\omega(k)$ , введённые в п. 4.1.3, указанные ограничения можно записать так:  $\Delta\omega(k) < \delta(k) < \omega(k)$ . Подробный анализ этих ограничений в рассмотренной постановке дан в [85], где показано, что они выполняются для достаточно широкого диапазона значений  $k$ .

Весьма примечательно, что мы обнаружили высокоточное соответствие спектров УГП и решений КУ вплоть до  $t \sim 30$ , что примерно равно удвоенному характерному времени эволюции решения КУ,  $2T_{kin}$  (на этом временном интервале значения спектра изменяются примерно в 4 раза). Другой любопытный факт заключается в том, что даже использование относительно низкого разрешения  $256^3$  при численном решении УГП приводит к достаточно точному соответствию результатов, полученных для КУ и УГП, хотя, естественно, с ростом разрешения до  $512^3$  точность повышается.

Для функции плотности вероятности (ФПВ) получен аналогичный ре-

зультат: высокоточное совпадение на ранних этапах эволюции (до  $t \sim 30$ ) и хорошее качественное соответствие далеко за пределами этого времени. Важно подчеркнуть, что полученные численные результаты подтвердили теоретические предсказания из [60, 77, 269]. А именно, показано, что ФПВ интенсивностей волн эволюционируют к экспоненциально убывающим функциям ФПВ ГС, и при этом характерное время такой эволюции совпадает с кинетическим временным масштабом  $T_{kin}$  (в нашем случае  $T_{kin} \sim 15$ ). Заметим однако, что последнее утверждение следует скорректировать при наличии пиков у ФПВ. Из уравнения (4.7) для ядра ФПВ ( $s \sim n$ ) мы имеем следующую оценку характерного времени эволюции ФПВ:  $T_{pdf} \sim T_{kin}(\delta_s/n)^2$ , где  $\delta_s$  – ширина пика ФПВ. В частности, использование детерминированных начальных данных с ФПВ в виде  $\delta$ -функции формально приводит к тому, что начальное характерное время эволюции ФПВ близко к нулю.

Во-вторых, базовой гипотезой ГВТ является свойство «распространения хаоса»: необходимо, чтобы предположение о случайных фазах и амплитудах (ПСФА) исходных данных сохранялось в ходе нелинейной эволюции спектра на временных интервалах порядка  $T_{kin}$  [60, 75, 76]. Казалось бы, что справедливость ПСФА легко проверить численно, анализируя статистические данные по набору из множества Фурье-мод. Однако более детальный анализ показывает, что ПСФА не может сохраняться в чистом виде для всего набора волновых мод. Это предположение можно проверить лишь косвенно, наблюдая, например, распределения моментов и ФПВ на небольшом количестве волн, см. [60, 77]. Мы видим косвенное подтверждение «распространения хаоса» в том, что КУ описывает волновой спектр УГП с высокой точностью и в широких временных диапазонах вплоть до  $2T_{kin}$ .

Важно отметить, что качественное соответствие спектров УГП и решений КУ наблюдается в ещё больших диапазонах времени, до  $t \sim 100$  и даже дальше. Это соответствие нарушается лишь в окрестности момента времени  $t^*$ , где решение КУ разрушается. Однако заметим, что отклонения результатов УГП и КУ наблюдаются для малых и больших  $k$  уже при  $t \gtrsim 40$ . Эти расхождения связаны, во-первых, с нарушением условия о достаточно (но не слишком) слабом нелинейном взаимодействии волн и, во-вторых, с различиями в значениях максимальных волновых чисел  $k_{max}$ , заданных при поиске численных



решений УГП и КУ. Причины, по которым эти значения не удалось привести в соответствие, обсуждались выше, в конце п. 4.1.4. Два указанных фактора также оказали существенное влияние на расхождения значений спектров на больших временах, причём значимость этих факторов одинаково высока.

## § 4.2. Каскадные процессы и точные стационарные решения кинетического уравнения

Во многих нелинейных физических системах при наличии накачки и диссипации, НД, энергии, действующих на существенно разных частотах, возникает нетривиальное неравновесное состояние, в котором энергия передаётся между разномасштабными возмущениями. Такие состояния характеризуются постоянным потоком энергии (и/или других инвариантов) между масштабами и называются *каскадами*. Процесс переноса инварианта от больших масштабов к малым называется *прямым каскадом*, а от малых масштабов к большим – *обратным каскадом*.

Каскады играют центральную роль в понимании нелинейных гидродинамических процессов и волновой турбулентности (ВТ). В гидродинамике они возникают за счет вихревых взаимодействий, а в ВТ – за счет случайного нелинейного взаимодействия волн. В качестве примеров отметим ВТ гравитационных волн [287]; волн Кельвина на вихрях сверхтекучих жидкостей [288]; ВТ во вращающихся стратифицированных жидкостях [289, 290]; а также ВТ бозе-газа при формировании конденсата Бозе–Эйнштейна (КБЭ) [73]. В отличие от гидродинамической турбулентности, где большинство предсказаний основываются на так называемом «соображении размерности» [55, 56], ТВТ позволяет описать каскадный процесс с помощью точного стационарного решения КУ, содержащего значения соответствующих потоков и волновых чисел в дробных степенях. ТВТ также позволяет определить направление каскада и значения универсальных констант, присутствующих в решении [60].

Примечательно, что недавние эксперименты с КБЭ позволили получить турбулентный процесс в режиме прямого энергетического каскада [70, 71]. График зависимости спектра от волнового числа в логарифмической шкале, построенный по экспериментальным данным, имеет заметно более крутой

наклон, чем предсказывает теория [73].

В этом параграфе мы находим точные стационарные решения КУ (0.17), описывающие прямой каскад энергии и обратный каскад частиц в бозе-газах при отсутствии конденсата с точностью до универсальных безразмерных постоянных. Полученные точные решения проверены при численном анализе КУ (0.17), а также сопоставлены со спектрами УГП (0.9). Проведённые исследования позволяют объяснить повышенный угол наклона спектра из [70].

### 4.2.1. Вывод стационарных решений

Подставим спектр степенного вида  $n_\omega = A_c \omega^{-x}$  в КУ (0.15) и перепишем его следующим образом:

$$\frac{\partial n_\omega}{\partial t} = 4\pi^3 A_c^3 \omega^{-3x+2} I(x), \quad (4.17)$$

где  $I(x)$  – интеграл столкновений вида

$$I(x) = \int [\min(1, q_1, q_2, q_3)]^{\frac{1}{2}} (q_1 q_2 q_3)^{-x} (1 + q_1^x - q_2^x - q_3^x) \delta(q_{23}^{01}) d_{123}. \quad (4.18)$$

Здесь  $q_i = \omega_i/\omega$  – новая переменная,  $i = 1, 2, 3$ ,  $\delta(q_{23}^{01}) = \delta(1 + q_1 - q_2 - q_3)$ ,  $d_{123} = dq_1 dq_2 dq_3$ . Интеграл (4.18) берется по области  $q_1, q_2, q_3 > 0$ .

Сделаем в (4.18) замену переменных интегрирования, которую часто называют *преобразованием Захарова*, см. [59]. Формулы перехода к новым переменным  $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \tilde{q}_3$  зависят от подобласти области интегрирования  $I(x)$ :

$$\begin{aligned} q_2 = 1/\tilde{q}_2, \quad q_1 = \tilde{q}_3/\tilde{q}_2, \quad q_3 = \tilde{q}_1/\tilde{q}_2, \quad \text{при} \quad q_2 > 1, 0 < q_3 < 1, \\ q_3 = 1/\tilde{q}_3, \quad q_1 = \tilde{q}_2/\tilde{q}_3, \quad q_2 = \tilde{q}_1/\tilde{q}_3, \quad \text{при} \quad 0 < q_2 < 1, q_3 > 1, \\ q_1 = 1/\tilde{q}_1, \quad q_2 = \tilde{q}_3/\tilde{q}_1, \quad q_3 = \tilde{q}_2/\tilde{q}_1, \quad \text{при} \quad q_2, q_3 > 1, \end{aligned} \quad (4.19)$$

где в силу сдвигового свойства  $\delta$ -функции  $q_1 = q_2 + q_3 - 1$ . В подобласти  $0 < q_1, q_2, q_3 < 1$  остаются прежние переменные. Опустим тильды над новыми переменными и получим для  $I(x)$  следующее выражение:

$$I_{\text{ЗТ}}(x) = \int_{\square} q_1^{\frac{1}{2}-x} (q_2 q_3)^{-x} (1 + q_1^x - q_2^x - q_3^x) (1 + q_1^y - q_2^y - q_3^y) \delta(q_{23}^{01}) d_{123}, \quad (4.20)$$

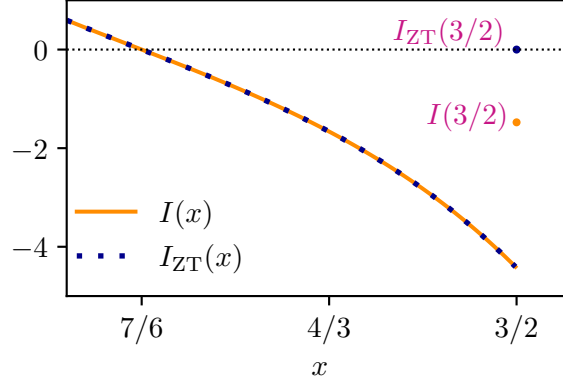
где  $y = 3x - 7/2$ ,  $\square = \{(q_1, q_2, q_3) : 0 < q_1, q_2, q_3 < 1\}$ .

Функция  $I_{ZT}(x)$  имеет два корня: 1)  $x = 3/2$  ( $y = 1$ ) соответствует спектру прямого каскада энергии,  $n_\omega = A_c \omega^{-3/2}$ ; 2)  $x = 7/6$  ( $y = 0$ ) соответствует спектру обратного каскада частиц,  $n_\omega = A_c \omega^{-7/6}$ . Отметим, что преобразование Захарова работает корректно только в случае сходимости интегралов. Физически это означает, что нелинейное взаимодействие происходит преимущественно в волновых квартетах с близкими значениями частот, т. е. выполняется *условие локальности волновых взаимодействий*, что соответствует теории Колмогорова–Обухова. Таким образом, следует проверить найденные кандидаты в стационарные решения, подставив их в исходный интеграл  $I(x)$  и убедившись, что полученный интеграл сходится и равен нулю.

В [182] было показано, что  $I(x)$  сходится при  $1 < x < 3/2$ . На рис. 4.8 приведены графики интегралов  $I(x)$  и  $I_{ZT}(x)$ , найденные численно при  $x \leq 3/2$ . Легко видеть, что два интеграла совпадают на интервале  $1 < x < 3/2$ . Поскольку  $x = 7/6 \in (1, 3/2)$ , то спектр обратного каскада  $n_\omega = A_c \omega^{-7/6}$  удовлетворяет условию локальности волновых взаимодействий и является корректным стационарным решением КУ.

Важно заметить, что при исследовании  $I(x)$  в окрестности  $x = 3/2$  после применения сдвигового свойства  $\delta$ -функции обнаружен нетривиальный эффект: интегралы, взятые отдельно по подобластям 1)  $q_2 > 1, 0 < q_3 < 1$ ; 2)  $0 < q_2 < 1, q_3 > 1$ ; 3)  $q_2, q_3 > 1$ ; 4)  $0 < q_2, q_3 < 1$ , неограниченно растут при стремлении  $x$  к  $3/2$ . Однако предел их суммы  $I(3/2^-)$  при  $x \uparrow 3/2$  существует и приблизительно равен  $-4.42$  (см. предельную точку линии на рис. 4.8). Более того, если искать  $I(x)$  при фиксированном  $x = 3/2$  как предел от суммы интегралов по подобластям 1)  $q_2 > 1, \delta_q < q_3 < 1$ ; 2)  $\delta_q < q_2 < 1, q_3 > 1$ ; 3)  $q_2, q_3 > 1$ ; 4)  $\delta_q < q_2, q_3 < 1$  при  $\delta_q \rightarrow 0$ , получим другое ненулевое число  $I(3/2) = -4\pi + 16 \ln 2$  (оно отмечено светлой точкой на рис. 4.8). Это говорит о том, что значение  $I(3/2)$  определяется неоднозначно и степенной спектр с показателем  $x = 3/2$  не является точным стационарным решением КУ. Однако, как будет показано ниже, введение логарифмической поправки позволяет найти стационарный спектр.

Получим теперь аналитические выражения для спектров прямого и обратного каскада и вычислим универсальные безразмерные постоянные  $C_d$  и  $C_i$ , присутствующие в них.



**Рис. 4.8.** Графики  $I(x)$  и  $I_{ZT}(x)$  в области  $x \in (1, 1.5)$ , где интегралы сходятся

Начнём со спектра обратного каскада. С использованием выражения для плотности числа частиц (0.18) и формулы (4.17) перепишем КУ (0.17) в форме закона сохранения числа частиц:

$$\frac{\partial (2\pi\omega^{1/2}n_\omega)}{\partial t} = -\frac{\partial Q(\omega, t)}{\partial \omega} \equiv 8\pi^4 A_c^3 \omega^{-3x+5/2} I_{ZT}(x), \quad (4.21)$$

где  $Q = Q(\omega, t)$  – поток частиц в спектральном пространстве. В (4.21) сразу использовано равенство  $I(x)$  и  $I_{ZT}(x)$  при  $1 < x < 3/2$ . Из (4.21) получаем

$$Q(\omega, t) = \int_0^\omega \left( -8\pi^4 A_c^3 \omega_0^{-3x+5/2} I_{ZT}(x) \right) d\omega_0 = 8\pi^4 A_c^3 \omega^{-y} \frac{I_{ZT}(x)}{3x - 7/2}. \quad (4.22)$$

В пределе при  $y \rightarrow 0$  ( $x \rightarrow 7/6$ ) волновая система переходит в стационарное состояние с постоянным (независящим от частоты) потоком частиц  $Q_0$ . Используя в (4.22) правило Лопиталья, получаем  $Q_0 = 8\pi^4 A_c^3 I'_{ZT}(7/6)/3 < 0$ , где штрих обозначает производную по  $x$ . Выражая из последнего равенства постоянную  $A_c$  и подставляя это выражение в анзац  $n_\omega = A_c \omega^{-7/6}$ , получаем

$$n_\omega = -3^{1/3} \left( 8\pi^4 I'_{ZT}(7/6) \right)^{-1/3} |Q_0|^{1/3} \omega^{-7/6}, \quad (4.23)$$

$$I'_{ZT}(7/6) = 3 \int_{\square} q_1^{-2/3} (q_2 q_3)^{-7/6} \left( 1 + q_1^{7/6} - q_2^{7/6} - q_3^{7/6} \right) \ln \frac{q_1}{q_2 q_3} \delta(q_{23}^{01}) d_{123}. \quad (4.24)$$

Оказалось, что значение интеграла (4.24) можно найти в аналитическом виде и, следовательно, можно выразить безразмерную постоянную  $C_i$ :

$$C_i := -3^{1/3} (8\pi^4 I'_{ZT}(7/6))^{-1/3} = \frac{1}{2\pi^{3/2}} \Gamma\left(\frac{5}{6}\right)^{1/3} \times$$

$$\times \left[ 3\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \left( 3^{3/2} 2^{2/3} {}_3F_2\left(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{3}; \frac{4}{3}, \frac{4}{3}; 1\right) - 2^{1/3} {}_4F_3\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{3}; 1\right) - \right.$$

$$\left. - 8 {}_3F_2\left(\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}; \frac{4}{3}, \frac{3}{2}; 1\right) + 2^{1/3} {}_3F_2\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{5}{3}; 1\right) \right]^{-1/3} \approx 7.5774045 \times 10^{-2},$$

где  $\Gamma(\cdot)$  – гамма-функция,  ${}_pF_q(a_1, \dots, a_p; b_1, \dots, b_q; z)$  – обобщенная гипергеометрическая функция.

Теперь мы можем записать точное стационарное решение КУ – спектр КЗ, описывающий обратный каскад частиц бозе-газа при формировании конденсата:

$$n_k = C_i |Q_0|^{1/3} k^{-7/3}, \quad C_i \approx 7.5774045 \times 10^{-2}. \quad (4.25)$$

Получим теперь аналитическое выражение для спектра прямого каскада энергии. Используя выражение для плотности энергии (0.19) и формулу (4.17), перепишем КУ (0.17) в форме закона сохранения энергии:

$$\frac{\partial (2\pi\omega^{3/2} n_\omega)}{\partial t} = -\frac{\partial P(\omega, t)}{\partial \omega} \equiv 8\pi^4 A_c^3 \omega^{-3x+7/2} I(x), \quad (4.26)$$

где  $P = P(\omega, t)$  – поток энергии в спектральном пространстве. В последнем выражении мы оставили интеграл столкновений  $I(x)$ , поскольку при  $x = 3/2$  его значение отличается от  $I_{ZT}(x)$ . Из (4.26) имеем

$$P(\omega, t) = \int_0^\omega \left( -8\pi^4 A_c^3 \omega_0^{-3x+7/2} I(x) \right) d\omega_0. \quad (4.27)$$

Как показано выше,  $\lim_{x \rightarrow 3/2} I(x) \neq 0$  (см. также рис. 4.8), поэтому использовать правило Лопиталю по образцу предыдущих выкладок нельзя. Кроме того, при подстановке  $x = 3/2$  в уравнение (4.27) возникает логарифмически расходящийся интеграл. Получить сходящийся интеграл можно, сузив область интегрирования до отрезка  $[\omega_f, \omega]$ , где  $\omega_f$  – частота, на которой происходит накачка энергии. Тогда

$$P = \int_{\omega_f}^\omega \left( -8\pi^4 A_c^3 \omega_0^{-1} I(3/2) \right) d\omega_0 = -8\pi^4 A_c^3 I(3/2) \ln \frac{\omega}{\omega_f}. \quad (4.28)$$

Однако для стационарных решений поток  $P = P_0$  не должен зависеть от  $\omega$ . В выражении (4.28) указанное свойство нарушается. Это еще одно свидетельство того, что  $n_\omega \sim \omega^{-3/2}$  не является искомым стационарным спектром. Для исключения из (4.28) зависимости от  $\omega$  введём логарифмическую поправку и будем искать решение в виде  $n_\omega = B_c \omega^{-x} \ln^z \frac{\omega}{\omega_f}$ . Сужая опять область интегрирования до отрезка  $[\omega_f, \omega]$ , получаем

$$P = -8\pi^4 B_c^3 \int_{\omega_f}^{\omega} \omega_0^{-3x+\frac{7}{2}} d\omega_0 \int_{q_1, q_2, q_3 > \frac{\omega_f}{\omega_0}} \min(1, q_1, q_2, q_3)^{\frac{1}{2}} (q_1 q_2 q_3)^{-x} \delta(q_{23}^{01}) \left( \ln^{-z} \frac{\omega_0}{\omega_f} + q_1^x \ln^{-z} \frac{\omega_1}{\omega_f} - q_2^x \ln^{-z} \frac{\omega_2}{\omega_f} - q_3^x \ln^{-z} \frac{\omega_3}{\omega_f} \right) \left( \ln \frac{\omega_0}{\omega_f} \ln \frac{\omega_1}{\omega_f} \ln \frac{\omega_2}{\omega_f} \ln \frac{\omega_3}{\omega_f} \right)^z d_{123}. \quad (4.29)$$

При  $\omega \gg \omega_f$  основной вклад в выражение  $P$  вносят частотные диапазоны  $\omega_0, \omega_1, \omega_2, \omega_3 \gg \omega_f$ ; поэтому  $\ln \frac{\omega_0}{\omega_f} \approx \ln \frac{\omega_1}{\omega_f} \approx \ln \frac{\omega_2}{\omega_f} \approx \ln \frac{\omega_3}{\omega_f} \approx \ln \frac{\omega}{\omega_f}$ . Таким образом,

$$P = -8\pi^4 B_c^3 I(x) \ln^{3z}(\omega/\omega_f) \int_{\omega_f}^{\omega} \omega_0^{-3x+7/2} d\omega_0. \quad (4.30)$$

Нужно заметить, что при выводе (4.30) мы заменили нижние пределы во втором интеграле в (4.29) на ноль, отталкиваясь от того, что  $\omega_0 \gg \omega_f$  и рассматриваемый интеграл сходится.

Для исключения зависимости от  $\omega$  в выражении (4.30) необходимо задать  $x = 3/2$  и  $z = -1/3$ , что после выражения константы  $B_c$  и подстановки её в формулу  $n_\omega = B_c \omega^{-x} \ln^z \frac{\omega}{\omega_f}$  приводит к решению

$$n_\omega = \left( -8\pi^4 I(3/2) \right)^{-1/3} P_0^{1/3} \omega^{-3/2} \ln^{-1/3}(\omega/\omega_f). \quad (4.31)$$

После замены в последнем выражении переменной  $\omega$  на  $k$  имеем

$$n_k = \left( -16\pi^4 I(3/2) \right)^{-1/3} P_0^{1/3} k^{-3} \ln^{-1/3}(k/k_f), \quad (4.32)$$

где  $k_f = \sqrt{\omega_f}$ . Сопоставляя (4.32) и анзац  $n_k = C_d P_0^{1/3} k^{-3} \ln^{-\frac{1}{3}}(k/k_f)$ , получаем выражение для  $C_d$ :

$$C_d = \left( -16\pi^4 I(3/2) \right)^{-1/3}. \quad (4.33)$$

Вопрос о точном выражении для  $I(3/2)$  оставим открытым. Вместо этого ниже мы сопоставим стационарные численные решения УГП и КУ, полученные при наличии НД энергии, с выражениями (4.25), (4.32). Из такого

сравнения в числе прочего увидим, что значение  $I(3/2) = -4\pi + 16 \ln 2$  обеспечивает неплохое соответствие численных и аналитического решений. Такое значение  $I(3/2)$  даёт:  $C_d \approx 7.58 \times 10^{-2}$ . При этом использование выражения  $I(3/2^-) \approx -4.42$  приводит к ещё более точному соответствию. Константа  $C_d$  в таком случае оценивается величиной  $5.26 \times 10^{-2}$ .

Еще раз подчеркнём, что решение (4.32) имеет место только для  $k \gg k_f$ .

В заключение этого пункта отметим, что численные решения УГП, полученные для режима прямого каскада в работах [291, 292], достаточно хорошо согласуются со степенным законом  $n_k \sim k^{-3}$ . При этом разрешение расчётов в указанных работах было достаточно низким, что не позволило наблюдать логарифмическую поправку вида (4.32). В работе [70] на основе результатов измерений и численного моделирования представлен степенной спектр с показателем, близким к  $-3.5$ . Учитывая, что инерционный диапазон волновых чисел, в котором наблюдался такой спектр, был достаточно узким (менее одной декады), несложно заключить, что увеличение угла наклона спектра связано как раз с логарифмической поправкой, а возникновение у спектра кривизны, индуцированное такой поправкой, в столь узком инерционном диапазоне осталось незамеченным. Отметим, что целенаправленного экспериментального исследования стационарных спектров КЗ в обратном каскаде для физических систем, описываемых УГП, до сих пор не проводилось.

#### 4.2.2. Моделирование обратного и прямого каскадов с помощью разработанного алгоритма

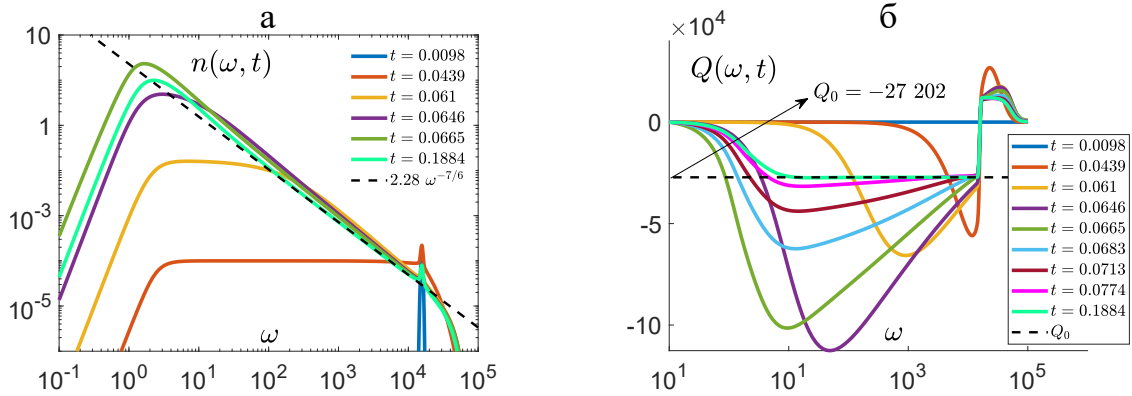
Алгоритм, описанный в § 2.2, реализован в среде MATLAB и использован для решения КУ (2.25) со слагаемыми в правой части, задающими НД энергии, и нулевым значением спектра в начальный момент времени. Численное решение строилось на отрезке  $[\omega_{\min}, \omega_{\max}] = [10^{-1}, 10^5]$  (шесть декад). Параметры НД заданы следующим образом:  $c_f = 50$ ,  $\sigma = 500$ ,  $\omega_f = 125^2$ ,  $\omega_L = 10$ ,  $\omega_R = (1/3) \times 10^4$ ,  $p = 4$ ,  $q = 7$ . Указанные значения подобраны так, чтобы установление спектра происходило в широком частотном диапазоне.

Результаты, приведённые ниже, получены с применением аппроксимации (2.31) со сгущением узлов (2.32) в окрестностях двух точек:  $\delta_1 = \mathcal{L}(0)$ ,  $\varepsilon_1 = 10^{-9.5}$ ,  $\delta_2 = \mathcal{L}(\omega_f)$ ,  $\varepsilon_2 = 10^{-1}$ . Для построения кубатурных формул в обла-

стях  $\Delta_0$ – $\Delta_4$ ,  $\Pi_1$ ,  $\Pi_2$  (см. рис. 0.1, а) использован метод Гаусса G. Параметры численного метода:  $n = 181$ ,  $M = 256$ . В методе установления использовано переключение между схемами (2.33) и (2.34) при  $k_1 = k_2 = 1$ . Для обеспечения сходимости метода с невязкой  $\varepsilon_R = 10^{-6}$  длина отрезка по времени  $T$  и шаг метода установления  $\sigma_s$  менялись в диапазонах  $T \in [10^{-4}, 10^{-2}]$ ,  $\sigma_s \in [10^{-2}, 1]$ .

На рис. 4.9 показаны процесс установления спектра в обратном каскаде и соответствующие значения потока  $Q(\omega, t)$ . Видно, что в инерционном диапазоне  $\omega \in [10, 10^4]$  поток устанавливается к константе  $Q(\omega, t) = Q_0 \approx -27\,202$ .

Из рис. 4.9 видно, что процесс установления носит нетривиальный характер: сначала в области низких частот наблюдается резкий рост спектра, при этом спектр поднимается выше стационарного решения (4.23) (оно изображено пунктиром на рис. 4.9, а). Затем спектр плавно спускается и стабилизируется. Динамика потока частиц в этом эксперименте показана на рис. 4.9, б. Заметим, что при достаточно больших  $t$  ( $t > 0.15$ ) решение устанавливается к спектру (4.23) с высокой точностью (относительная разность решений на предыдущем и следующем шагах по времени меньше 0.1%) и с высокой точностью совпадает со спектром КЗ (максимальное отклонение при  $\omega = 10$  приблизительно равно 0.0668). Здесь и далее под шагами по времени мы понимаем точки  $kT$ ,  $k = 1, 2, \dots$



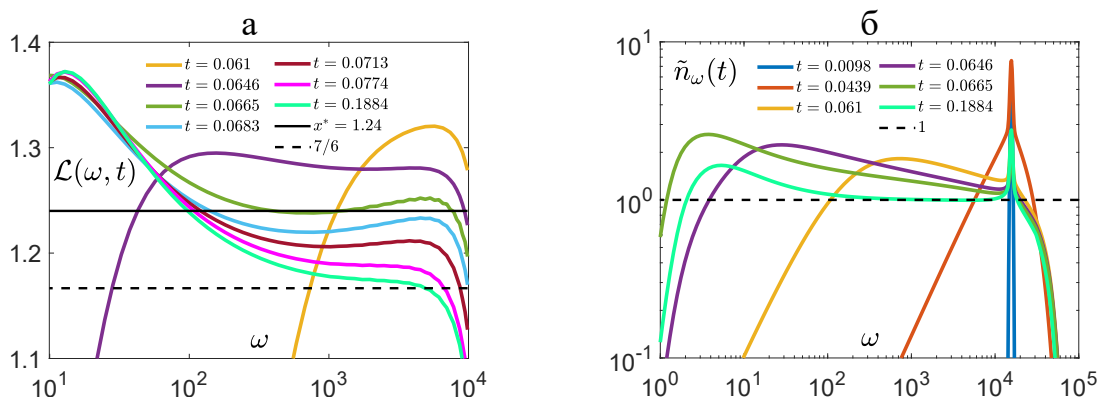
**Рис. 4.9.** Установление решения КУ (2.25) к стационарному спектру КЗ (4.23) (пунктир) в логарифмическом масштабе (а), установление потока частиц в инерционном диапазоне в линейном масштабе (б)

Отметим, что в проведённом эксперименте на ранних этапах эволюции формируется неклассический спектр  $n_\omega \sim \omega^{-x^*}$ ,  $x^* \approx 1.24$  – линия на рис. 4.9, а, соответствующая  $t = 0.0665$ . Угол наклона этой линии больше, чем у спектра



КЗ:  $x^* > 7/6$ . Аналогичные спектры исследованы в § 4.4 (см. также [79–81]) при решении задач Коши для (0.17) без членов, задающих НД. Такая постановка приводит к разрушению решения в конечный момент времени  $t = t^*$ .

Однако в задаче, рассмотренной в этом пункте, после выхода на степенное решение  $n_\omega \sim \omega^{-x^*}$  спектр под действием низкочастотной диссипации плавно изменяет свой наклон и сходится к стационарному спектру КЗ (4.23). Переход между указанными решениями происходит на временном интервале  $t \in [0.065, 0.188]$ , его удобно также наблюдать на графике модуля логарифмической производной  $\mathcal{L}(\omega, t) = \left| \frac{\partial \ln n(\omega, t)}{\partial \omega} \right|$ , рис. 4.10, а.

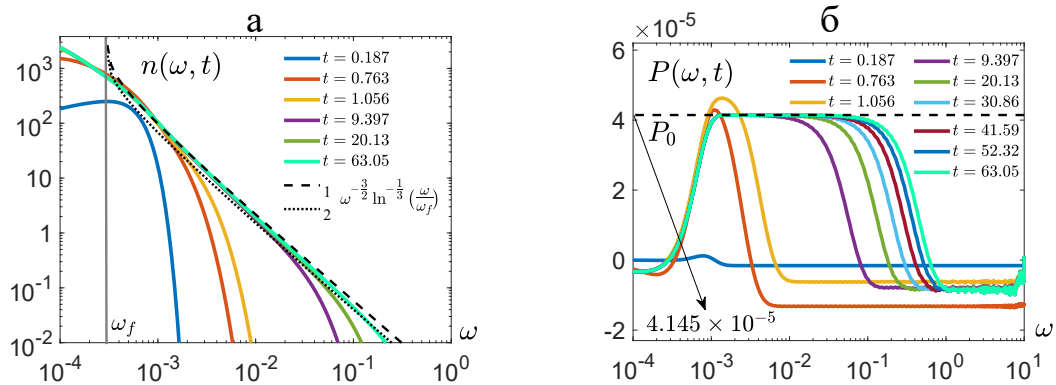


**Рис. 4.10.** Эволюция модуля логарифмической производной решения  $n_\omega(t)$  в инерционном диапазоне: переход от неклассического спектра  $n_\omega \sim \omega^{-x^*}$  к стационарному решению  $n_\omega \sim \omega^{-7/6}$  (а); компенсированные спектры (б)

Существенной сложностью для численного анализа эволюции спектра в обратном каскаде является возникновение крутого фронта у левой границы частотного диапазона. Эта ситуация аналогична эффекту «бутылочного горлышка» (см. комментарии в конце п. 4.1.4). Указанный фронт более отчётливо виден при построении так называемых *компенсированных спектров*, т. е. графиков функции  $\tilde{n}(\omega, t) = n_\omega(\omega, t)/(C_i|Q_0|^{1/3}\omega^{-7/6})$ , которые в инерционном диапазоне сходятся к единице, рис. 4.10, б. За счёт вариации параметров НД этот фронт можно уменьшить, но в любом случае его влияние на процесс вычислений является ощутимым: при формировании фронта длину временного интервала  $T$  в разработанном методе приходилось варьировать и уменьшать в несколько раз. Заметим, однако, что предложенный алгоритм справляется с этой сложной проблемой и позволяет получить стационарные решения с высокой точностью и относительно небольшими затратами памяти

и машинного времени. Приведённые результаты получены на персональной ЭВМ AMD Ryzen 5950X, DDR4 32Gb 3200MHz. Расчёты проводились в системе MATLAB на 16 ядрах с распараллеливанием. Расчёт до установления с относительной разностью решений на предыдущем и следующем шагах по времени порядка  $10^{-4}$  длился примерно сутки. Отметим, что здесь для расчёта интеграла столкновений использован самый простой вариант метода из п. 2.2.1 – квадратуры с узлами Гаусса, G, без адаптации к особенностям. Результаты п. 2.2.1 позволяют утверждать, что при использовании других методов временные показатели, названные выше, могут быть существенно улучшены. Подчеркнём также, что расчёт интеграла столкновений для каждого  $\omega = \omega_m$ ,  $m = \overline{1, M}$ , происходит независимо, поэтому метод допускает эффективное распараллеливание. Распараллеливание на 16 ядер показало практически кратное уменьшение времени вычислений.

Результаты, аналогичные описанным выше, получены и для прямого каскада. На рис. 4.11 показана эволюция решений КУ (2.25) с нулевыми начальными данными при установлении к спектру (4.31). Графики этого спектра построены при использовании значения  $I(3/2) = -4\pi + 16\ln 2$  (пунктирная линия 1) и значения  $I(3/2) = -4.42$  (линия 2, состоящая из точек).



**Рис. 4.11.** Установление решения КУ (2.25) к стационарному спектру КЗ (4.31) в логарифмическом масштабе (показаны значения (4.31), соответствующие двум разным способам вычисления  $C_d$  – пунктир и точки) (а); установление потока энергии в инерционном диапазоне в линейном масштабе (б)

Отметим, что эволюция фронта прямого каскада до установления носит автомодельный характер, а скорость движения фронта со временем существенно замедляется, см. рис. 4.11, а. Более подробно эти аспекты обсуждают-

ся в п. 4.3.2. Заметим, что установление потока энергии к его стационарному состоянию происходит также при замедляющемся движении фронта потока в область высоких частот, см. рис. 4.11, б.

### 4.2.3. Сравнение полученных решений со спектрами уравнения Гросса–Питаевского и их обсуждение

В рамках [89] спектры (4.32), (4.25) и результаты, полученные для КУ (2.25), сопоставлялись со стационарными спектрами, найденными при численном решении УГП. Разработкой и реализацией метода решения УГП, а также проведением расчётов и анализом графиков решений занимались Y. Zhu, G. Krstulovic и С. Назаренко. Вычислительная модель для УГП кратко описана в п. 4.1.2.

Решения УГП (0.9) рассчитаны с разрешениями  $N_p = 512$  и  $N_p = 1024$ . Для моделирования НД энергии к правой части УГП после применения преобразования Фурье добавлялись слагаемые  $F_{\mathbf{k}}(t)$  и  $-D_{\mathbf{k}}\widehat{\psi}_{\mathbf{k}}(t)$  соответственно, где  $F_{\mathbf{k}}(t)$  как функция переменной  $\mathbf{k}$  имеет узкий носитель – сферический слой, включающий сферу  $|\mathbf{k}| = k_f$ ,  $k_f = \sqrt{\omega_f}$ ,  $\omega_f$  – частота накачки. Функция  $F_{\mathbf{k}}(t)$  задаётся случайным процессом Орнштейна–Уленбека:  $dF_{\mathbf{k}}(t) = -\overline{\gamma}_0 \widehat{\psi}_{\mathbf{k}} dt + \overline{f}_0 dW_{\mathbf{k}}$ , где  $W_{\mathbf{k}}$  – Винеровский процесс. Параметры  $\overline{\gamma}_0$  и  $\overline{f}_0$  определяют время корреляции и амплитуду воздействия соответственно. Для моделирования прямого каскада число  $k_f$  задаётся малым, а для обратного – большим. Диссипативная функция имеет вид  $D_{\mathbf{k}} = (k/k_L)^{-\overline{\alpha}} + (k/k_R)^{\overline{\beta}}$  с положительными параметрами  $k_L$ ,  $k_R$ ,  $\overline{\alpha}$ ,  $\overline{\beta}$ . Диссипация действует на малых и крупных масштабах:  $0 \lesssim k_L$ ,  $k_R \lesssim k_{\text{cutoff}} \approx 171$ . Кроме того, для диссипации конденсата (моды  $k = 0$ ) к правой части УГП в спектральном пространстве добавляется ещё слагаемое  $-D_0 \widehat{\psi}_0(t)$  с постоянным  $D_0$ .

Значения параметров НД УГП были подобраны так, чтобы при заданном разрешении наблюдать установление спектра в максимально широком инерционном диапазоне и минимизировать эффект «бутылочного горлышка» при действии диссипации. Кроме того, осуществлялся строгий контроль за выполнением базовой гипотезы ТВТ: условия о достаточно (но не слишком) слабом нелинейном взаимодействии волн (комментарии об этом см. в п. 4.1.6). Значения потоков энергии и частиц,  $P(k)$  и  $Q(k)$ , в волновом про-

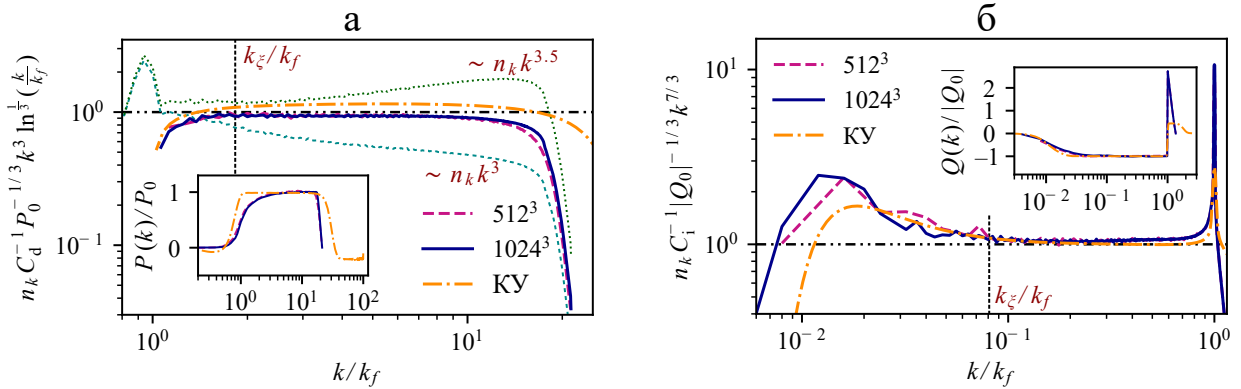
странстве рассчитаны непосредственно с использованием УГП (0.9). Более подробно о последних аспектах см. в приложениях к [89]. О подходах к численному моделированию прямого и обратного каскадов при решении КУ подробно написано в предыдущем пункте. Для сопоставления полученных там результатов со спектрами УГП перейдём от переменной  $\omega$  к  $k$ . Значения параметров, использованные для реализации каскадных режимов в наших расчётах, представлены в табл. 28.

**Таблица 28.** Параметры каскадных режимов УГП и КУ

Эксперимент	Модель	Каскад	$L$	$N_p$	$\overline{f_0^2}$	$\overline{\gamma_0}$
1	УГП	прямой	$2\pi$	512	1.2	20
2			$4\pi$	1024	0.1589	
3		обратный	$2\pi$	512	$10^{-4}$	0
4			$4\pi$	1024	$1.26 \times 10^{-5}$	
	$k_f$	$D_0$	$k_L$	$\overline{\alpha}$	$k_R$	$\overline{\beta}$
1, 2	8	$10^3$	2.5	2	145	4
3, 4	125		1	0.5	130	6
			$\omega_{\min}$	$\omega_{\max}$	$\omega_f$	$c_f$
5	КУ	прямой	$10^{-5}$	10	$10^{-3}$	1
6		обратный	0.1	$10^5$	$125^2$	50
	$\sigma$	$\omega_L$	$p$	$\omega_R$	$q$	$k_f$
5	$3 \times 10^{-4}$	$10^{-4}$	3	2	4	$\sqrt{10^{-3}}$
6	500	10	4	$10^5/4.5$	7	125

На рис. 4.12, а приведены спектры прямого каскада. Конкретно, в логарифмической шкале представлены графики компенсированных спектров волнового действия, полученных при численном решении УГП и КУ, т. е. графики спектров, нормированных на выражение, стоящее в правой части (4.32). При этом мы полагали, что  $C_d = 5.26 \times 10^{-2}$ . Во вставке на рис. 4.12, а приведены графики соответствующих потоков энергии в инерционном диапазоне, нормированных на их стационарные значения  $P_0$  (эти значения для УГП и КУ, конечно, были различными). Значения  $P_0$  также использовались при построении компенсированных спектров для вычисления правой части (4.32), где величина  $k_f$  варьировалась в окрестности точки максимума спектра накачки для обеспечения более точного соответствия графиков. Для сравнения полученных результатов со спектром КЗ без логарифмической поправки и

со спектром, обнаруженным в [70], на рис. 4.12, а построены компенсированные спектры  $\sim n_k k^3$  и  $\sim n_k k^{3.5}$ . Они рассчитаны с использованием численных решений УГП при  $N_p = 1024$ .



**Рис. 4.12.** Спектры волнового воздействия для прямого (а) и обратного (б) каскадов, компенсированные выражениями (4.32) и (4.25) соответственно. Спектры получены 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 в инерционном диапазоне

Рис. 4.12, а демонстрирует высокоточное соответствие аналитического выражения (4.32) и спектров, найденных при решении УГП и КУ численно (графики компенсированных спектров близки к графику единицы). Вертикальным пунктиром обозначено волновое число  $k_\xi$ , в котором значение нелинейного и линейного слагаемых УГП равны. Очевидно, результаты ТВТ можно считать корректными лишь при  $k > k_\xi$ . Кроме того, необходимо напомнить, что решение (4.32) является асимптотическим и верным только при  $k \gg k_f$ . Неожиданным результатом проведённой работы является совпадение спектров даже на масштабах  $k \lesssim k_\xi \sim k_f$  (см. рис. 4.12, а). Следует также обратить внимание, что на этих масштабах наблюдается неплохое соответствие спектров УГП и решений КУ с графиками  $\sim n_k k^{3.5}$ , хотя диапазон волновых чисел  $k$ , в котором это соответствие имеет место, является узким (примерно половина декады). Это полностью согласуется с результатами из [70].

На рис. 4.12, б представлены решения, соответствующие обратному каскаду частиц – спектры волнового действия, полученные при численном решении КУ и УГП, нормированные на аналитическое выражение для спектра из (4.25) с учётом точного значения константы  $C_i$ . На вставке рис. 4.12, б показан график стационарного потока частиц, нормированного на модуль своего

значения в инерционном диапазоне. Из рис. 4.12, б мы видим, что инерционный диапазон, в котором реализуется постоянное значение потока, является достаточно широким и в нём наблюдается высокоточное соответствие решения КУ и (4.25). Отклонение спектра УГП от (4.25) в этом диапазоне составляет порядка 5%.

В заключение параграфа сделаем несколько замечаний. Во-первых, подчеркнём, что рассмотренная физическая система допускает два нетривиальных стационарных режима: первый соответствует прямому каскаду энергии, второй – обратному каскаду частиц. Реализация каждого из указанных режимов, как в численных экспериментах, так и на практике, требует тонкой настройки параметров, основанной на понимании природы исследуемых процессов. Ключевыми являются положение в спектральном пространстве и интенсивность НД энергии, а также обеспечение выполнимости базовых гипотез ТВТ и локальности волновых взаимодействий.

Во-вторых, заметим, что для двух указанных режимов нами были впервые получены стационарные решения типа спектров КЗ в аналитическом виде с точностью до значений безразмерных постоянных и с логарифмической поправкой для спектра прямого каскада. Полученные решения демонстрируют высокоточное согласие с результатами численных экспериментов, которые в этих режимах для КУ удалось провести впервые и благодаря разработанным методам приближения и алгоритмам.

В-третьих, отметим, что решения, найденные для прямого каскада, объясняют отклонения экспериментальных и теоретических результатов. В работе [70] обнаружен степенной спектр с показателем  $-3.5$  – результат, существенно отклоняющийся от значения  $-3$ , которое можно получить на основе соображений размерности. Обосновать спектр  $\sim k^{-3.5}$  можно было бы лишь на основе нового физического явления, возникающего в прямом каскаде, которое до сих пор обнаружено не было. Решение с логарифмической поправкой (4.32) представляет единственное адекватное объяснение увеличения угла наклона спектра в рамках имеющихся знаний. При этом в узком диапазоне волновых чисел в окрестности точки максимума спектра накачки спектр  $k^{-3.5}$  является аппроксимацией (4.32).

В-четвёртых, решения, полученные для обратного каскада, представля-

ют хорошую мотивацию для экспериментальных работ. Действительно, эксперименты по реализации обратного каскада при отсутствии конденсата до сих пор не были проведены. Наши исследования показывают, что именно обратный каскад в полной мере соответствует свойству локальности волновых взаимодействий, т. е. является наиболее физически обоснованным. А значит, есть все основания организовать эксперименты для его обнаружения.

### § 4.3. Автомоделная эволюция спектров

Выше были получены и исследованы универсальные стационарные спектры решения УГП – спектры КЗ. Реализация соответствующих им слаботурбулентных режимов не зависит от способов накачки и диссипации, НД, энергии или других инвариантов в системе, главное, чтобы спектры НД были локализованы и расположены достаточно далеко друг от друга в волновом пространстве. Вместе с тем сама временная эволюция спектров к решениям КЗ, а также динамика спектров в системах без НД во многих случаях тоже являются универсальными и носят автомоделный характер определённого рода. К тому же, такие нестационарные спектры более релевантны, как при реализации лабораторных экспериментов, так и при анализе явлений, протекающих в естественных условиях. Автомоделное поведение спектров УГП является весьма нетривиальным и имеет различные типы, соответствующие асимптотике системы на бесконечном временном промежутке или разрушению решения КУ за конечное время. Более того, одна и та же волновая система может одновременно иметь разные типы автомоделных спектров в разных диапазонах волновых чисел.

В этом параграфе с применением КУ (0.17) дан численный анализ различных типов автомоделных спектров. Конкретно, мы рассматриваем автомоделные режимы, возникающие в прямых и обратных каскадах при наличии либо отсутствии НД инвариантов в системе. В прямом каскаде с НД энергия инжектируется на малых волновых числах и диссипируется на больших, а в обратном каскаде с НД частицы инжектируются на больших волновых числах и диссипируются на малых. В системах без НД наблюдается консервативная эволюция спектров прямого и обратного каскадов одновременно (*такую эволюцию далее будем называть свободной*). При этом сохраняется

плотность энергии (0.12) и частиц (0.11). Заметим также, что в системах без диссипации низких частот решение КУ (0.17) разрушается за конечное время  $t^*$ , что соответствует формированию конденсата Бозе–Эйнштейна в окрестности нулевой моды. Эволюция решения КУ при  $t$ , близких к  $t^*$ , тоже носит автомодельный характер. При этом из-за ускорения нелинейной и замедленной линейной динамики в пределе  $t \rightarrow t^*$  положение ТВТ о слабой нелинейности нарушается, поэтому дальнейшую эволюцию спектра (тоже автомодельную) можно наблюдать лишь при решении УГП. В этом параграфе мы получим новые данные об автомодельной эволюции решений КУ и представим классификацию её типичных сценариев.

#### 4.3.1. Кинетическое описание автомодельных спектров

Следуя классификации Зельдовича–Райзера–Баренблатта [293, ch. XII, § 4], напомним, что существует два рода автомодельных решений. Параметры решений 1-го рода можно найти, пользуясь законом сохранения энергии. Параметры решений 2-го рода не могут быть найдены с помощью закона сохранения какой-либо величины (см. также [90]), поскольку большая часть этой величины остается в области переменных, где решение не является автомодельным. Авторы [294, 295] ввели понятие *автомодельного решения третьего рода*, параметры которого определяются по данным из предыдущего этапа эволюции системы, также являющегося автомодельным. Решения всех трёх перечисленных родов являются характерными для эволюции спектров УГП. Автомодельные решения первого и второго рода возникают в ходе прямого и обратного каскадов соответственно. В обратном каскаде при определённых условиях на начальные данные [114] спектральный фронт достигает нулевой частоты за конечное время  $t^*$ , и автомодельная эволюция второго рода реализуется в малой окрестности  $t^*$ . На больших частотах такой спектр имеет степенной вид с показателем, отличным от решения КЗ, см. [79–81, 182] и § 4.4. При  $t = t^*$  решение КУ перестаёт существовать, однако решение УГП эволюционирует дальше. В [181] показано, что при  $t > t^*$  фронт обратного каскада отражается от левой границы волнового диапазона и уходит в область высоких волновых чисел. При этом если на низких частотах присутствует диссипация, то за фронтом устанавливается решение КЗ. В противном случае со



временем спектр устанавливается к постоянному значению, т. е. реализуется термодинамическое равновесие. В любом случае при  $t > t^*$  распространение фронта описывается автомодельным решением третьего рода.

Для поиска автомодельного решения первого рода, характерного для прямого каскада энергии, преобразуем КУ (0.17), переходя к новой неизвестной функции  $n^{\text{rad}}(k, t)$  по формуле (4.15) и далее к автомодельному анзацу вида

$$n^{\text{rad}}(k, t) = t^{-\kappa} g(\xi) \quad \text{где} \quad \xi = k/t^{\varkappa}, \quad \xi \in [0, \infty), \quad (4.34)$$

где  $\kappa$  и  $\varkappa$  – постоянные параметры. В итоге получаем

$$\begin{aligned} -(\kappa g(\xi) + \varkappa \xi g'(\xi)) t^{2\kappa-1} &= 2\pi \int \frac{\min(\xi, \xi_1, \xi_2, \xi_3)}{\xi \xi_1 \xi_2 \xi_3} \times \\ &\times \delta_{1\xi^2}^{23} g g_1 g_2 g_3 \left( \frac{\xi^2}{g} + \frac{\xi_1^2}{g_1} - \frac{\xi_2^2}{g_2} - \frac{\xi_3^2}{g_3} \right) d_{123}, \end{aligned} \quad (4.35)$$

где  $g_i = g(\xi_i)$ ,  $\xi_i = k_i/t^{\varkappa}$ ,  $i = \overline{1, 3}$ ,  $g = g(\xi)$ ,  $g' = dg/d\xi$ ,  $\delta_{1\xi^2}^{23} = \delta(\xi^2 + \xi_1^2 - \xi_2^2 - \xi_3^2)$  и  $d_{123} = d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3$ . Зависимость от времени в (4.35) должна исчезнуть, из чего следует, что  $\kappa = 1/2$ . Таким образом, уравнение для  $g(\xi)$  принимает вид

$$\frac{\kappa g(\xi) + \varkappa \xi g'(\xi)}{2\pi} = - \int \frac{\min(\xi, \xi_1, \xi_2, \xi_3)}{\xi \xi_1 \xi_2 \xi_3} g g_1 g_2 g_3 \delta_{1\xi^2}^{23} \left( \frac{\xi^2}{g} + \frac{\xi_1^2}{g_1} - \frac{\xi_2^2}{g_2} - \frac{\xi_3^2}{g_3} \right) d_{123}. \quad (4.36)$$

Подставляя автомодельный анзац (4.34) в формулу для энергии (0.19), находим

$$E = H_2 = t^{3\varkappa-\kappa} \int_0^{\infty} \xi^2 g(\xi) d\xi. \quad (4.37)$$

Пусть задан закон эволюции энергии:  $E(t) = C_E t^{\bar{\lambda}}$ , где  $\bar{\lambda} = \text{const} \geq 0$ . В таком случае, используя (4.37), находим значение параметра  $\varkappa = 1/6 + \bar{\lambda}/3$ . Следовательно, автомодельное решение первого рода имеет вид

$$n^{\text{rad}}(k, t) t^{1/2} = g(k/t^{\varkappa}) \quad \text{при} \quad \varkappa = 1/6 + \bar{\lambda}/3. \quad (4.38)$$

Используем (4.38) для определения *положения спектрального фронта* прямого каскада. Пусть  $g_{\text{max}}$  – максимальное значение  $g(\xi)$ ,  $g_{\text{max}} = g(\xi_{\text{max}})$ . Выберем некоторое значение  $g_c$  такое, что  $g_c \ll g_{\text{max}}$ , и найдём такое значение  $\xi_{\text{cg}} = \text{const}$ , что  $g(\xi_{\text{cg}}) = g_c$  и  $\xi_{\text{cg}} > \xi_{\text{max}}$ . Обозначим положение спектрального фронта в момент времени  $t$  символом  $k_{\text{cf}}(t)$ ,  $k_{\text{cf}}(t) = \xi_{\text{cg}} t^{\varkappa}$ .

Подставляя в уравнение (4.36) степенное решение  $g(\xi) \sim \xi^{-y}$  и проводя асимптотический анализ при  $\xi \rightarrow 0$ , видим, что далеко за фронтом при  $\xi \ll \xi_{cg}$  спектр должен удовлетворять уравнению,  $\text{RHS} = 0$ , где  $\text{RHS}$  – правая часть (4.36). Таким образом, показатель спектра,  $y$  должен совпадать с показателем решения КЗ для прямого каскада (в автомодельных переменных имеем  $y = 1$ ), что нельзя сказать про значение постоянного множителя при  $\xi^{-y}$ . Важно также отметить, что наблюдать автомодельную эволюцию решения КУ в прямом каскаде удаётся только при наличии достаточно сильной диссипации на малых частотах. Дело в том, что такая эволюция реализуется на больших временах, а время существования решения КУ при отсутствии указанной диссипации существенно ограничено.

**Для поиска автомодельного решения КУ второго рода** напомним, что оно формируется в малой окрестности момента времени  $t^*$  ( $t^*$  – время разрушения решения). Наличие накачки для запуска этого режима эволюции спектра не является существенным. Отметим, что этот режим уже изучался ранее при анализе решений КУ [79, 80, 296, 297] и УГП [282, 298]. Однако в полученных результатах имеется ряд неточностей, связанных с высокой сложностью достоверного описание эволюции спектра УГП в обратном каскаде. *Математически эта проблема сводится к решению нелинейной спектральной задачи*, численным анализом которой мы займёмся в § 4.4. Здесь же выведем КУ для автомодельного спектра второго рода с постоянными параметрами  $a$  и  $b$ . Положим

$$n^{\text{rad}}(k, t) = f(\eta)\hat{\tau}^{-a}, \quad \text{где } \eta = k/\hat{\tau}^b \text{ и } \hat{\tau} = t^* - t. \quad (4.39)$$

Перепиывая (0.17) для функции  $f(\eta)$  с применением (4.15), (4.39) и требуя, чтобы в полученном равенстве не было зависимости от  $\hat{\tau}$ , находим  $a = 1/2$  и

$$\frac{af(\eta) + b\eta f'(\eta)}{2\pi} = \int \frac{\min(\eta, \eta_1, \eta_2, \eta_3)}{\eta \eta_1 \eta_2 \eta_3} f f_1 f_2 f_3 \delta_{1\eta^2}^{23} \left( \frac{\eta^2}{f} + \frac{\eta_1^2}{f_1} - \frac{\eta_2^2}{f_2} - \frac{\eta_3^2}{f_3} \right) d_{123}, \quad (4.40)$$

где  $f_i = f(\eta_i)$ ,  $\eta_i = k_i/\hat{\tau}^b$ ,  $i = \overline{1, 3}$ ,  $f = f(\eta)$ ,  $\delta_{1\eta^2}^{23} = \delta(\eta^2 + \eta_1^2 - \eta_2^2 - \eta_3^2)$ ,  $f' = df/d\eta$  и  $d_{123} = d\eta_1 d\eta_2 d\eta_3$ . В численных экспериментах из [79, 80] было показано, что при  $\eta \ll 1$  имеет место асимптотика  $f(\eta) \sim \eta^2$ , соответствующая спектру термодинамического равновесия с равномерным распределением энергии. В § 4.4 эта асимптотика получена аналитически.

Автомодельные спектры второго рода имеют вид

$$n^{\text{rad}}(k, t)\hat{\tau}^{1/2} = f(k/\hat{\tau}^b), \text{ где } b = 1/(2\bar{x}^*). \quad (4.41)$$

Заметим, что при любых  $t$ , достаточно близких к  $t^*$ , после соответствующей замены переменной все эти спектры должны совместиться с кривой  $f(\eta)$ . Подставляя асимптотику  $f(\eta) \sim \eta^2$ , имеющую место при  $\eta \ll 1$ , в (4.41), делаем вывод, что при  $t \uparrow t^*$  ( $\hat{\tau} \rightarrow +0$ ) величина

$$G(\hat{\tau}) = \lim_{k \rightarrow 0} n^{\text{rad}}(k, t)\hat{\tau}^{1/2+2b}/k^2 \quad (4.42)$$

должна стремиться к константе. Мы используем этот факт для проверки корректности автомодельных решений, полученных ниже численно.

Заметим, что *blow-up* решения КУ, как и автомодельное решение второго рода, могут не реализоваться в обратном каскаде. Это возможно при отсутствии накачки энергии в системе с ограниченным диапазоном волновых чисел. Для таких систем критерий разрушения решения КУ можно сформулировать, используя аргумент Эйнштейна о формировании конденсата [114]. Суть аргумента в том, что конденсат образуется только в тех системах, где не может реализоваться термодинамическое равновесие, заданное законом Рэлея–Джинса. Этому закону соответствует стационарный спектр

$$n^{\text{rad}}(k) = 4\pi k^2 T / (k^2 + \hat{\mu}), \quad (4.43)$$

где  $T$  и  $\hat{\mu}$  обозначают температуру и химический потенциал волновой системы. Несложно проверить, что такой спектр задаёт точное решение КУ (0.17), а параметры  $T$  и  $\hat{\mu}$  однозначно определяются плотностью энергии  $E = H_2$  и частиц  $N$ . Отметим, что эти величины являются конечными на решении (4.43) тогда и только тогда, когда диапазон волновых чисел ограничен некоторым числом  $k_{\text{max}}$ . При этом если начальные данные содержат такое количество энергии и частиц, что после вычисления по ним значений  $T$  и  $\hat{\mu}$  удаётся удовлетворить уравнению (4.43), то реализуется термодинамическое равновесие. В противном случае реализуется автомодельное решение КУ второго рода с последующим разрушением в конечный момент времени, означающим формирование конденсата. Анализ указанных условий, проведённый в [114], позволяет записать критерий разрушения в виде  $E/N < k_{\text{max}}^2/3$ .

Отметим, что серьёзным аргументом в пользу сходимости решения КУ к спектру (4.43) при нарушении этого критерия является *H-теорема*, которая утверждает, что энтропия  $H = \int \log n_{\mathbf{k}} d\mathbf{k}$  монотонно растёт во времени, см. [59]. Эта теорема имеет место и при наличии  $k_{\max}$ . Более того, при фиксированных  $E$  и  $N$  спектры (4.43) максимизируют энтропию, поэтому естественно предположить, что при условии существования решения (4.43) спектры будут к нему сходиться.

Однако для установления спектра КУ к (4.43) при больших  $t$  помимо обеспечения  $E/N \geq k_{\max}^2/3$  необходимо предотвратить утечку энергии через границу  $\omega_{\max} = k_{\max}^2$ , запретив взаимодействия волн из частотных областей  $\omega < \omega_{\max}$  и  $\omega > \omega_{\max}$ . Эти взаимодействия задаются интегралами по подобластям  $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_4$ , указанным на рис. 0.1, а, поэтому для их запрета, при расчёте интеграла столкновений, необходимо исключить указанные подобласти из области  $\Delta_{\omega}$ . Применение такого приёма обеспечивает консервативность расчётов и позволяет избежать ультрафиолетовой катастрофы.

Более подробный анализ эволюции спектров при наличии и отсутствии указанного запрета дан ниже. В завершение этого пункта сформулируем *три возможных сценария эволюции решения КУ в обратном каскаде при отсутствии НД*. (I) Если для начальных данных выполнено неравенство  $E/N \geq k_{\max}^2/3$ , то решение существует на большом временном интервале и автомодельной эволюции второго рода не наблюдается. (II) Если дополнительно для начальных данных имеют место слабые волновые взаимодействия (начальные данные не являются разрозненными пиками в спектральном пространстве), то при  $t \rightarrow \infty$  решения КУ сходятся к (4.43). (III) Если для начальных данных выполнено неравенство  $E/N < k_{\max}^2/3$ , то реализуется автомодельная эволюция второго рода и решение КУ разрушается. Подчеркнём, что если в системе имеется накачка энергии (но нет диссипации на низких частотах), то автомодельная эволюция решения КУ и его разрушение будут иметь место независимо от вида начальных данных и спектра накачки. В [62] доказано, что в системах с неограниченным волновым диапазоном свободная эволюция решения КУ всегда ведёт к его разрушению.

### 4.3.2. Численный анализ автомодельных спектров

Далее займёмся поиском и анализом численных решений КУ в трёх режимах, где имеет место автомодельная эволюция спектров.

**Режим 1. Свободная эволюция решения КУ при реализации сценария (III) – прямой и обратный каскады.** Используя алгоритм, разработанный в § 2.2 (см. также комментарии из п. 4.1.2), будем решать КУ (0.17) с начальными данными вида (4.14):

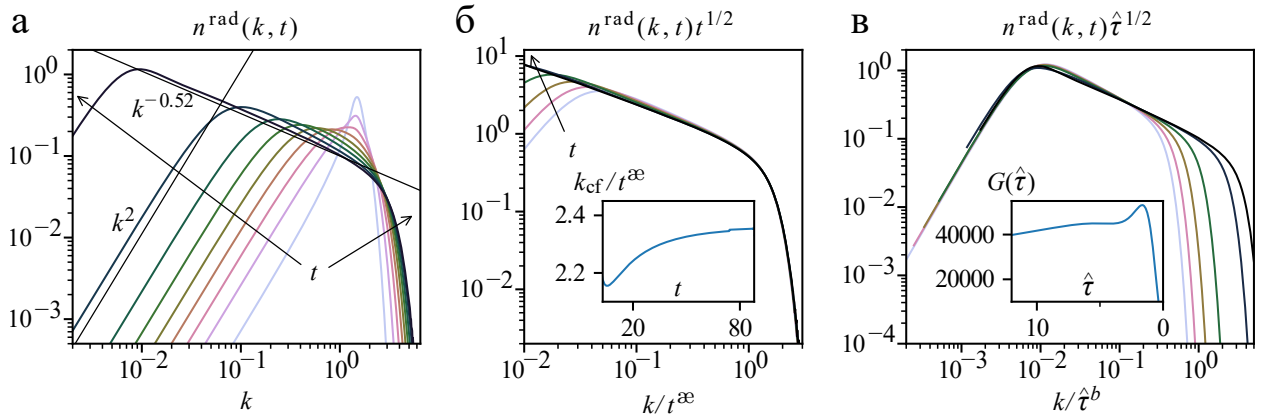
$$n_\omega(0) = \frac{g_0}{4\pi\omega} \exp\left(\frac{-(\sqrt{\omega} - k_s)^2}{\sigma^2}\right). \quad (4.44)$$

Значения параметров, использованные в расчётах:  $\omega_{\min} = 3 \times 10^{-6}$ ,  $\omega_{\max} = 10^2$ ,  $k_s = 1.5$ ,  $g_0 = 1$ ,  $\sigma = 0.2$ . При реализации алгоритма применялось приближение (2.31) на сетке из  $M = 512$  узлов с адаптацией вида (2.32) к особенности решения в точке  $\omega = 0$  и к экспоненциальному пику начальных данных:  $\delta_1 = \mathcal{L}(0)$ ,  $\varepsilon_1 = 10^{-6}$ ,  $\delta_2 = \mathcal{L}(k_s^2)$ ,  $\varepsilon_2 = 10^{-1.5}$ . Для расчёта интеграла столкновений использован алгоритм из п. 2.2.1 с узлами Гаусса и сетками размера  $362 \times 362$  во всех подобластях  $\Delta_\omega$ . После расчёта решения КУ,  $n_\omega(t)$ , будем анализировать поведение функции  $n^{\text{rad}}(k, t)$ , зависящей от волнового числа  $k$ .

Рис. 4.13, а демонстрирует одновременно прямой и обратный каскады во временном интервале  $t \in [10, 88.5]$ . Фронт  $n^{\text{rad}}(k, t)$ , распространяющийся влево, близок к спектру термодинамического равновесия  $\sim k^2$  с равномерным распределением частиц (асимптотический анализ этого степенного спектра проведён в п. 4.4.1). В данном эксперименте  $E/N < k_{\max}^2/3$ , поэтому решение КУ разрушается. Время разрушения:  $t^* \approx 89.5$ . При  $t = 88.5$  в области между пиком начальных данных и фронтом формируется автомодельный спектр со степенным законом  $\sim k^{-0.52}$ . Отметим, что при стремлении  $t \rightarrow t^*$  наклон этой кривой несколько уменьшается.

На рис. 4.13, б построен график зависимости  $n^{\text{rad}}(k, t)t^{1/2}$  от  $k/t^{1/6}$ , соответствующий автомодельному спектру первого рода (4.38) при  $\bar{\lambda} = 0$ ,  $\bar{\alpha} = 1/6$ . Для построения графиков были выбраны несколько моментов времени до разрушения решения КУ из отрезка  $[80, 88.5]$ . На рис. 4.13, в для тех же моментов времени построены зависимости  $n^{\text{rad}}(k, t)\hat{\tau}^{1/2}$  от  $k/\hat{\tau}^{1/1.04}$ , т. е. показано автомодельное решение второго рода (4.41) с параметрами  $\bar{x}^* = 0.52$

и  $t^* = 89.5$ . Мы видим, что после перехода к автомодельным переменным графики решений совмещаются при наложении, это подтверждает существование автомодельных режимов прямого и обратного каскадов.



**Рис. 4.13.** Численные решения задачи Коши (0.17), (4.44) в режиме 1: 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  $k/t^{\text{ae}}$  в прямом каскаде и график движения нормированного волнового фронта  $k_{\text{cf}}/t^{\text{ae}}$  на вставке; в) зависимость  $n^{\text{rad}}(k, t)\hat{t}^{1/2}$  от  $k/\hat{t}^b$  в обратном каскаде и график  $G(\hat{t})$  при малых  $\hat{t}$  на вставке. Графики б) и в) содержат спектры, построенные при  $t = 80, 82, 84, 86, 88, 88.5$

На вставке рис. 4.13, б изображена эволюция компенсированного спектрального фронта,  $k_{\text{cf}}/t^{\text{ae}}$ , в режиме прямого каскада. Видно, что с ростом  $t$  кривая  $k_{\text{cf}}/t^{\text{ae}}$  выходит на плато (стремится к постоянной). Это свидетельствует о том, что параметр автомодельного решения  $\text{ae} = 1/6$  найден верно. На вставке рис. 4.13, в приведён график  $G(\hat{t})$ . Мы видим, что в интервале  $2 < \hat{t} < 7$  функция  $G(\hat{t})$  близка к постоянной, что соответствует (4.42) для малых  $\hat{t}$ . Однако в окрестности  $\hat{t} = 0$  функция  $G(\hat{t})$  имеет скачок, что можно объяснить небольшой погрешностью при расчёте  $t^*$ . В целом, достаточно точное определение  $t^*$  и параметра  $b$  автомодельного решения второго рода представляет сложную вычислительную проблему, см. § 4.4.

Подчеркнём, что разработанный алгоритм решения КУ, основанный на принципе адекватности и учитывающий априорную информацию о гладкости и особенностях спектров, позволил впервые наблюдать автомодельную эволюцию прямого и обратного каскадов в волновых системах, описываемых УГП, одновременно. Хотя реализуемость сразу двух каскадов для аналогичных систем гидродинамического типа была показана уже давно [74]. Численный анализ двух каскадов одновременно становится возможным благодаря

увеличению частотного диапазона, где ищется решение КУ, до семи декад и более, что позволяет справиться с проблемой разномасштабности (по этому поводу см. особенности, описанные в § 0.2).

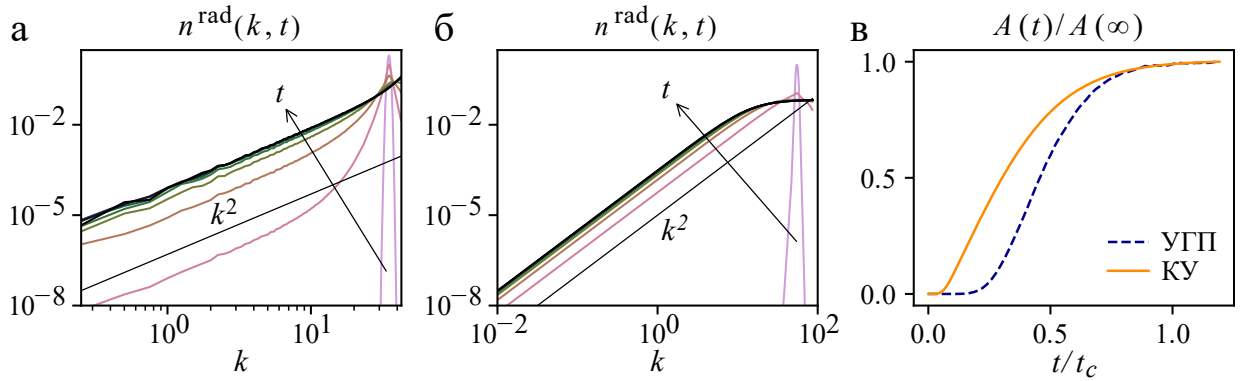
Отметим ещё, что формально автомодельное решение первого рода (4.38) реализуется асимптотически при  $t \rightarrow \infty$ . Свободная эволюция спектрального фронта при этом протекает достаточно медленно  $k_{cf} \sim t^{1/6}$ . Решение КУ в таком случае разрушается раньше, чем автомодельный спектр успевает сформироваться, поэтому на вставке рис. 4.13, б мы можем наблюдать лишь стремление  $k_{cf}/t^{ae}$  к постоянной. Примечательно, что несмотря на это спектры на рис. 4.13, б совмещаются с высокой точностью.

**Режим 2. Свободная эволюция решения КУ при реализации сценария (II)** с запретом волновых взаимодействий на частотах  $\omega < \omega_{\max}$  и  $\omega > \omega_{\max}$ . Проведём теперь численный анализ решений задачи Коши (0.17), (4.44) в случае, когда  $E/N \geq k_{\max}^2/3$ . Приведём также графики спектров решения УГП в этом случае.

При поиске решений (0.17), (4.44) заданы следующие значения параметров:  $\omega_{\min} = 10^{-4}$ ,  $\omega_{\max} = 86^2$ ,  $k_s = 55$ ,  $g_0 = 1$ ,  $\sigma = 2.5$ . Для реализации алгоритма использовалось приближение (2.31) на сетке из  $M = 128$  узлов с адаптацией вида (2.32) к особенностям решения:  $\delta_1 = \mathcal{L}(0)$ ,  $\varepsilon_1 = 10^{-7}$ ,  $\delta_2 = \mathcal{L}(k_s^2)$ ,  $\varepsilon_2 = 10^{-0.5}$ . Для расчёта интеграла столкновений использован алгоритм из п. 2.2.1 с узлами Гаусса и сетками размера  $128 \times 128$ . Для итераций по времени реализован метод Рунге–Кутты второго порядка с шагом 0.2. Решение (0.17), (4.44) найдено при  $t \in [0, 2000]$ . Вычислительная модель для УГП с начальными данными (4.14), созданная G. Krstulovic и Y. Zhu, коротко описана в п. 4.1.2. Параметры модели:  $L = 8\pi$ ,  $N_p = 512$ ,  $k_s = 35$ ,  $g_0 = 2$ ,  $\sigma = 1$ . Решения УГП найдены при  $t \in [0, 320]$ .

Спектры УГП и численные решения КУ показаны на рис. 4.14. Видно, что автомодельная эволюция второго рода в данном случае не реализуется. Вместо этого спектры достаточно быстро сходятся к решению  $n^{\text{rad}}(k, t) = A(t) k^2$  в широком диапазоне волновых чисел. При этом, как показано на рис. 4.14, в,  $A(t) \rightarrow \text{const}$  при  $t \rightarrow \infty$  (величина  $t_c$  определяется как момент времени, при котором  $A(t_c)$  отклоняется от значения  $\lim_{t \rightarrow \infty} A(t)$  на 1%). Мы видим, что решения КУ и спектры УГП сходятся к стационарному состоянию, соответствующему

ющему равномерному распределению частиц, которое описывается законом Рэлея–Джинса (4.43) при  $k \ll \hat{\mu} \sim T$ . Реализация именно такого спектра из всех стационарных решений (4.43) связана с тем, что в нашем эксперименте соотношение  $E/N$  близко к своему максимальному значению  $k_{\max}^2$ .



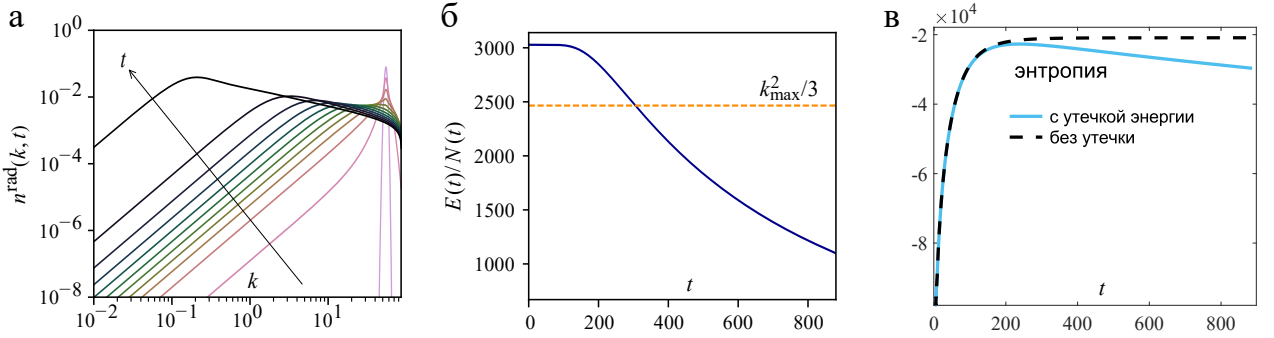
**Рис. 4.14.** Спектры УГП при  $t = 0, 40, 80, 120, \dots, 320$  (а) и решения КУ при  $t = 0, 250, 500, 750, \dots, 2000$  (б) в режиме 2. Значения нормированного коэффициента  $A(t)/\lim_{t \rightarrow \infty} A(t)$  в предельном выражении для спектров УГП и решений КУ (в)

Подчеркнём, что при численном решении КУ в этом эксперименте для предотвращения утечки энергии через границу  $\omega_{\max}$  мы запретили взаимодействия волн с частотами  $\omega < \omega_{\max}$  и  $\omega > \omega_{\max}$ . Для этого пришлось исключить подобласти  $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_4$  из области интегрирования  $\Delta_\omega$  (см. рис. 0.1, а).

Повторим теперь проделанный эксперимент для КУ без запрета волновых взаимодействий (подобласти  $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_4$  остаются в области  $\Delta_\omega$ ). Несмотря на то, что с заданными параметрами для спектра начальных данных (4.44) мы имеем  $E/N \approx 3028 > k_{\max}^2/3 \approx 2465$ , в ходе эволюции формируется автомодельный режим второго рода и решение КУ разрушается за конечное время, см. рис. 4.15, а. Причину этого эффекта можно понять, рассмотрев рис. 4.15, б. После того как правая граница спектрального фронта достигает границы волнового диапазона  $k_{\max}$ , при  $t \sim 150$  отношение  $E/N$  начинает быстро убывать, а при  $t = 300$  мы уже имеем  $E/N < k_{\max}^2/3$ . Пусть  $t_c$  – момент достижения равенства  $E/N = k_{\max}^2/3$ . Из рис. 4.15, а видно, что при  $t < t_c$  эволюция спектра замедляется и начинает формироваться спектр с равномерным распределением частиц, соответствующий (4.43) при больших  $\hat{\mu} \sim T$ . Однако при  $t > t_c$  эволюция ускоряется, и мы выходим на автомодельный режим. Суть происходящего заключается в том, что условие  $E/N < k_{\max}^2/3$  динамически нарушается вследствие утечки энергии. В рас-



чѐтах на сходимость было проверено, что наблюдаемый эффект не связан с погрешностями вычислительной схемы, а обусловлен исключительно природой волновых взаимодействий. На рис. 4.15, в показана эволюция энтропии решения,  $H = \int \log n_{\mathbf{k}} d\mathbf{k}$ . Если волновые взаимодействия на высоких частотах не запрещены, то энтропия достаточно быстро достигает максимума и начинает убывать (сплошная линия), что противоречит  $H$ -теореме. Если же мы запретим волновые взаимодействия, то энтропия продолжает расти, хотя и очень медленно (пунктир).

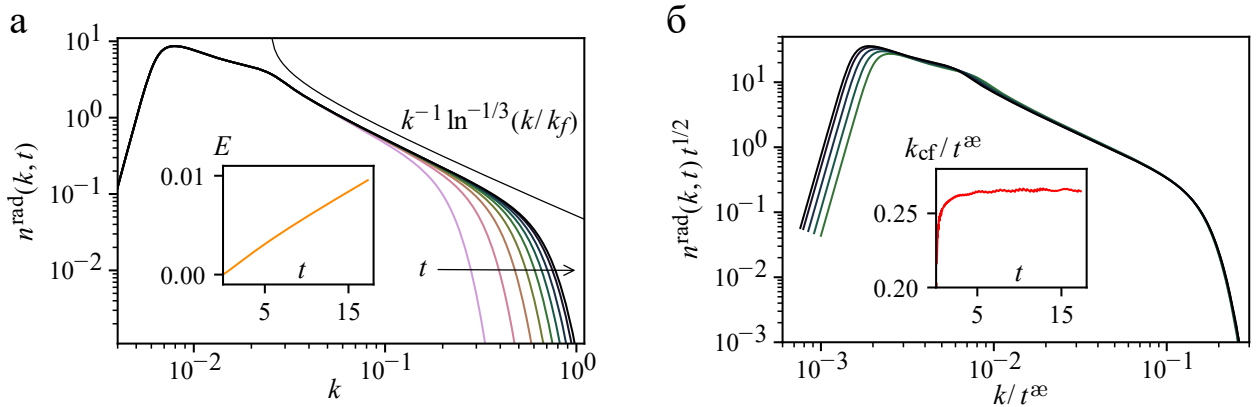


**Рис. 4.15.** Численные решения КУ в режиме 2 без запрета волновых взаимодействий на высоких частотах: а) спектр  $n^{\text{rad}}(k, t)$  при  $t = 0, 80, 160, 240, \dots, 880$ ; б) график зависимости  $E/N$  от времени; в) энтропия

**Режим 3. Прямой каскад с накачкой и диссипацией на малых частотах.** При рассмотрении свободной эволюции спектра в прямом каскаде режима 1 мы установили, что решение КУ разрушается, прежде чем автономный режим успеет развиться в полной мере. Чтобы предотвратить разрушение решения и наблюдать эволюцию в более широком инерционном диапазоне, добавим к правой части КУ члены, задающие НД по образцу (2.25). Причѐм максимум спектра накачки расположим на малой частоте и зададим диссипацию волн с ещѐ меньшими частотами. Высокочастотную диссипацию вводить не будем. Таким образом, решим численно задачу Коши для (2.25) при  $\mathfrak{D} = (\omega/\omega_L)^{-p} n_\omega$  с нулевыми начальными данными:  $n_I(\omega) \equiv 0$ . В качестве параметров зададим:  $\omega_{\min} = 10^{-5}$ ,  $\omega_{\max} = 10$ ,  $\omega_f = 3 \times 10^{-4}$ ,  $\sigma = 3 \times 10^{-4}$ ,  $c_f = 10$ ,  $\omega_L = 10^{-4}$ ,  $p = 4$ . При реализации алгоритма использовалось приближение (2.31) на сетке из  $M = 362$  узла с адаптацией вида (2.32) к особенностям спектра:  $\delta_1 = \mathcal{L}(0)$ ,  $\varepsilon_1 = 10^{-9}$ ,  $\delta_2 = \mathcal{L}(\omega_f)$ ,  $\varepsilon_2 = 10^{-1.5}$ ,  $\delta_3 = \mathcal{L}(\omega_{\max}/10)$ ,  $\varepsilon_3 = 10^{-1.5}$ . Для расчѐта интеграла столкновений использован алгоритм из

п. 2.2.1 с узлами Гаусса и сетками размера  $256 \times 256$ .

На рис. 4.16 показана эволюция решения КУ в логарифмическом масштабе: виден фронт прямого каскада, движущийся вправо, за которым формируется стационарный спектр КЗ вида (4.32) с логарифмической поправкой. На вставке рис. 4.16, а показан график изменения плотности энергии в системе со временем, которое обусловлено наличием накачки. Этот график при  $t > 5$  с высокой точностью является линейным:  $E(t) \sim t$ , т.е. в автомодельном решении первого рода (4.38) имеем  $\bar{\lambda} = 1$ . В силу (4.37) отсюда следует, что  $\alpha = 1/2$ . С использованием этого значения и (4.38) мы выразили автомодельную функцию  $g$  в различные моменты времени из отрезка  $t \in [2, 17.3]$ . На рис. 4.16, б видно, что графики функции  $g(k/t^{1/2})$  с высокой точностью совпадают при наложении, что подтверждает корректность проведённых рассуждений. Отрезок времени, в котором наблюдается автомодельная эволюция, согласуется с временным диапазоном, где компенсированный волновой фронт  $k_{cf}$  постоянен (см. вставку на рис. 4.16, б).



**Рис. 4.16.** Численные решения задачи Коши для (2.25) в режиме 3: а) значения спектра  $n^{\text{rad}}(k, t)$  при  $t = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 17.3$  и эволюция плотности энергии  $E(t)$  на вставке; б) графики зависимости  $n^{\text{rad}}(k, t)t^{1/2}$  от нормированного волнового числа  $k/t^\alpha$  при  $t = 10, 12, 14, 16, 17.3$  и эволюция нормированного волнового фронта  $k_{cf}/t^\alpha$  на вставке

Важным обстоятельством является то, что параметры автомодельных режимов, вычисленные в диссертации, с высокой точностью совпадают со значениями, полученными экспериментально. Так, в экспериментах [188] при свободной эволюции спектра (поток энергии и частиц были близки к постоянным) наблюдались прямой и обратный каскады одновременно. Причём в прямом каскаде авторы [188] обнаружили автомодельную эволюцию спектра

с параметром (в обозначениях, введённых в (4.34))  $\alpha = 0.14$ . В наших расчётах, проведённых в режиме 1, получено  $\alpha = 1/6 \approx 1.167$ . Режим 3 эволюции спектра УГП соответствует условиям эксперимента из работы [71]. В их эксперименте накачка энергии происходила с постоянной скоростью, поток частиц при этом тоже был близок к постоянному. В указанной работе также наблюдался автомоделный характер движения спектрального фронта. Авторы [71] определили, что  $\alpha \approx 0.54$  с погрешностью не более 6% (в статье [71] использованы другие обозначения). Этот результат с высокой точностью соответствует величине  $\alpha = 1/2$ , полученной в диссертации.

Отметим также работы, в которых экспериментально исследован обратный каскад частиц бозе-газа [72, 299]. Их авторы сосредоточились на поиске автомоделной эволюции спектров первого рода, что, как показано в диссертации, для обратного каскада не является корректным. В связи с этим соответствующие эксперименты должны быть пересмотрены и уточнены.

Итак, нами исследован полный спектр универсальных режимов эволюции решений КУ, описывающего слабые волновые взаимодействия в бозе-газе при отсутствии конденсата. Конкретно, с помощью автомоделных решений первого и второго рода описана свободная эволюция спектров прямого и обратного каскадов, а также смоделирована эволюция спектра при наличии НД на низких частотах, приводящая к прямому каскаду. Наличие дополнительной диссипации на высоких частотах в последнем случае приводит к формированию стационарного решения КЗ (4.31), которое подробно обсуждалось в § 4.2. Там же рассмотрен режим обратного каскада при наличии НД, приводящий к стационарному решению (4.23). При наличии в обратном каскаде только накачки и при отсутствии диссипации наблюдается картина, аналогичная режиму 1, рассмотренному в этом пункте. Отметим, что соавторами соискателя по работам [89, 181] проведён численный анализ УГП во всех перечисленных режимах, и полученные спектры сопоставлены с решениями КУ. Единственный оставшийся вопрос, который требует внимания, – решение нелинейной спектральной задачи, описывающей автомоделный режим эволюции решения КУ в обратном каскаде – рассмотрен в последнем параграфе этой главы.

## § 4.4. Неклассический степенной спектр и конденсация Бозе–Эйнштейна

При анализе режима 1 свободной эволюции решения КУ в п. 4.3.2 мы видели автомоделный спектр, фронт которого, движущийся в сторону малых частот, близок к спектру термодинамического равновесия  $n^{\text{rad}}(k, t) \sim k^2$  ( $n_\omega \sim \text{const}$ ), а в волновом диапазоне между фронтом и пиком начальных данных формируется неклассическое степенное решение  $n^{\text{rad}}(k, t) \sim k^{-\bar{x}^*}$  ( $n_\omega \sim \omega^{-x^*}$ ,  $x^* = 1 + \bar{x}^*/2$ ). Такое решение существует на ограниченном временном промежутке до некоторого момента времени  $t^*$ . При этом угол наклона спектра в логарифмической шкале постепенно уменьшается и стабилизируется при  $t \rightarrow t^*$ , а его значения в окрестности  $\omega = 0$  неограниченно растут (имеет место взрывной рост решения, или blow-up). Похожую форму решения можно наблюдать и при установлении спектра к решению КЗ в волновых системах с НД, см. п. 4.2.2 и комментарии к рис. 4.9, 4.10, только при этом из-за наличия низкочастотной диссипации взрывного роста решения не наблюдается.

Сложность прямого численного моделирования свободной эволюции решения КУ при  $t \rightarrow t^*$  обусловлена взрывным ростом решения в точке  $\omega = 0$ . Такой рост связан с возникновением особой точки у аналитического продолжения решения, которая при  $t = t^*$  выходит в область задачи (см. первую особенность из § 0.2). Тем не менее в предыдущих исследованиях [79–81, 296] были предприняты попытки численно решить задачу Коши для КУ (0.17) и определить показатель  $x^*$ : в [79] получено значение  $x^* = 1.24$ , а в [80, 81] –  $x^* = 1.2345$ . В этих работах был впервые обнаружен и описан автомоделный характер эволюции спектра. Однако никакой информации о погрешности найденных автомоделных решений и значений  $x^*$  не приведено. Аппроксимация графиков спектров из [79, 296], полученных в разные моменты времени в окрестности  $t = t^*$  с последующим переходом к автомоделной форме решения  $f(\eta)$  по образцу (4.39), см. также рис. 4.13, в, приводит к примерно 100-процентным относительным отклонениям значений спектров. Анализ графиков логарифмических производных спектров из [79, 296] позволяет определить значения  $x^*$  с точностью порядка 10%. В [80, 81] отсутствует какая-либо информация, позволяющая оценить точность представленных спектров и значений  $x^*$ . В связи с этим необходимо верифицировать получен-

ные результаты с аккуратной организацией вычислительных экспериментов, позволяющей контролировать погрешность.

Как показано выше, динамика спектров обратного каскада имеет все признаки автомодельной эволюции второго рода по классификации Зельдовича–Райзера–Баренблатта (автомодельные параметры не удаётся определить, используя законы сохранения, решение разрушается в конечный момент времени, см. [293]). Во избежании blow-up решения при анализе такой эволюции вместо прямого численного моделирования следует перейти к автомодельным переменным и исследовать нелинейную спектральную задачу в этих переменных. Аналогичная проблема возникает и в моделях ТВТ, основанных на локальных дифференциальных аппроксимациях [300–304]. Её решение в рамках таких моделей требует нахождения глобальной гетероклинической бифуркации соответствующей динамической системы [302, 303]. Строгих результатов о решении нелинейной спектральной задачи для исходных кинетических уравнений в рамках ТВТ до сих пор получить не удалось (в частности, не известно, существуют ли такие решения и сколько их может быть). Некоторые попытки численного анализа таких решений в приложении к исследованию *альфвеновской турбулентности* предприняты в [305], где при разработке итерационных методов авторы столкнулись с существенными сложностями, связанными с учётом особенностей решения и интеграла столкновений.

Целью этого параграфа является численное решение нелинейной спектральной задачи с контролем погрешности для КУ, полученного после перехода к автомодельному анзацу вида (4.39). Важную роль при этом играет корректная постановка граничных условий. На основе результатов п. 4.3.2 (см. режим 1) можно постулировать, что автомодельное решение должно иметь (i) степенную асимптотику при больших  $\omega$  с неизвестным показателем  $x^*$  и (ii) постоянное значение, «плато», при малых  $\omega$ , т. е. значения спектра при  $\omega = 0$  ограничены, и все его производные по  $\omega$  равны нулю. Ниже приведено обоснование того, что условия (i) и (ii) действительно реализуются. Исходя из (i) и (ii) для КУ будет сформулирована краевая задача с неизвестным параметром  $x^*$ . Далее с применением аппроксимаций из § 1.1, метода коллокаций и итерационного метода установления будет получена серия задач линейной алгебры, соответствующих рассмотренной дифференциальной

постановке. Спектры матриц в этих задачах будут насчитываться в итерациях. Предельные значения компонент собственных векторов определяют автомодельную форму спектра, а значения собственных чисел – величину  $x^*$ . Метод расчёта интеграла столкновений из п. 2.2.1 будет доработан для учёта неограниченной области интегрирования (см. серую область на рис. 0.1, а). Подчеркнём, что методы аппроксимации спектров и интегралов, предложенные в диссертации, позволяют учесть множество особенностей, возникающих в этой постановке, и провести расчёты с контролем погрешности.

#### 4.4.1. Постановка нелинейной спектральной задачи для кинетического уравнения

По образцу (4.39) введём в (0.17) автомодельную замену переменной:

$$n_\omega = f(\eta)\hat{\tau}^{-a}, \quad \text{где } \eta = \omega\hat{\tau}^{-b}, \quad \hat{\tau} = t^* - t. \quad (4.45)$$

Обозначая  $x = a/b$ , при условии  $b = a - 1/2 > 0$  (фронт решения движется в сторону малых  $\omega$ ), уравнение (0.17) можно переписать только с одной (автомодельной) переменной:

$$xf + \eta(df/d\eta) = (A(f, \eta) + fB(f, \eta))/b, \quad (4.46)$$

где

$$A(f, \eta) = \frac{1}{\sqrt{\eta}} \int_{\Delta_\eta} S \cdot (f_2 f_3 f_c) d\eta_2 d\eta_3, \quad B(f, \eta) = \frac{1}{\sqrt{\eta}} \int_{\Delta_\eta} S \cdot (f_2 f_3 - f_3 f_c - f_2 f_c) d\eta_2 d\eta_3,$$

$$S = S(\eta, \eta_2, \eta_3) = 4\pi^3 \min\{\sqrt{\eta}, \sqrt{\eta_2}, \sqrt{\eta_2 + \eta_3 - \eta}, \sqrt{\eta_3}\}, \quad (4.47)$$

$f_2 = f(\eta_2)$ ,  $f_3 = f(\eta_3)$ ,  $f_c = f(\eta_c)$ ,  $\Delta_\eta = \{(\eta_2, \eta_3) : \eta_2 > 0, \eta_3 > 0, \eta_c > 0\}$  – область интегрирования (она совпадает с областью, отмеченной серым цветом на рис. 0.1, а),  $\eta_c = \eta_2 + \eta_3 - \eta$ .

Сходимость интеграла столкновений в правой части (0.17) на спектрах  $n_\omega \sim \omega^{-x}$  исследована в приложении 1 статьи [182]. Показано, что интеграл сходится при  $x \in (1, 3/2)$ , причём при  $x \geq 3/2$  интеграл расходится на малых частотах  $\omega_1 \ll \omega_2, \omega_3 \sim \omega$ , где  $\omega_1 = \omega_2 + \omega_3 - \omega$ ; при  $x \leq 1$  имеет место расходимость интеграла на больших частотах  $\omega_1, \omega_2, \omega_3 \gg \omega$ . Анализ сходимости позволяет установить корректные граничные условия для КУ (0.17) при малых  $\omega$  (соответственно для (4.46) при малых  $\eta$ ).

На основе результатов п. 4.3.2, полученных в режиме 1, предположим, что в окрестности  $t = t^*$  и  $\omega = 0$  имеет место степенная асимптотика  $n_\omega \sim \omega^{-x_s}$ , где  $0 \leq x_s \leq 1$ , которая при увеличении  $\omega$  меняется на  $n_\omega \sim \omega^{-x^*}$  вблизи некоторой переходной частоты  $\omega_{tr}(t)$ . Несложно показать, что *решение уравнения (4.46) инвариантно относительно преобразования подобия*:

$$\eta \rightarrow \tilde{\eta} = C_{inv}\eta, \quad f \rightarrow \tilde{f} = f/C_{inv}. \quad (4.48)$$

В связи с этим можно выбрать такую величину постоянной  $C_{inv}$ , что переходное значение автомодельной переменной  $\eta_{tr} \sim 1$ . Тогда, согласно нашему предположению,  $f(\eta) \sim \eta^{-x_s}$  при  $\eta \ll 1$ , и в силу расходимости интеграла столкновений при  $x_s \leq 1$  основной вклад в правую часть (4.46) вносит интеграл по подобласти  $\eta_2, \eta_3 \sim 1 \sim \eta_{tr} \gg \eta$ . На основании этого при  $\eta \ll 1$  уравнение (4.46) можно переписать следующим образом:

$$xf + \eta(df/d\eta) = (\tilde{A} + \tilde{B}f)/b, \quad (4.49)$$

где

$$\tilde{A} = \int_{Q1} (f_2 f_3 f_c) d\eta_2 d\eta_3, \quad \tilde{B} = \int_{Q1} (f_2 f_3 - f_3 f_c - f_2 f_c) d\eta_2 d\eta_3.$$

Интегралы  $\tilde{A}, \tilde{B}$  не зависят от  $\eta$  и значений  $f(\eta)$  при  $\eta \ll 1$ , а в качестве области интегрирования (в силу  $\eta \ll 1$ ) в них можно задать первый квадрант  $Q1$  на плоскости  $(\eta_2, \eta_3)$ .

Уравнение (4.49) можно легко проинтегрировать, его общее решение:

$$f(\eta) = \tilde{A}/(bx - \tilde{B}) + C_f \eta^{(\tilde{B}/b)-x}, \quad (4.50)$$

где  $C_f$  – произвольная постоянная. Учитывая, что  $f(\eta) \geq 0$ , получаем  $\tilde{A} > 0$ . Проводя рассуждения от противного и используя условия  $f(\eta) \geq 0, f(\eta) \neq \infty$ , легко показать, что  $x > \tilde{B}/b$  и  $C_f = 0$ . Тогда при  $\eta \ll 1$  мы имеем единственное постоянное решение:

$$f(\eta) = \tilde{A}/(bx - \tilde{B}). \quad (4.51)$$

Другими словами, при малых  $\eta$  у спектра действительно формируется плато. Заметим ещё, что полученное значение  $x_s = 0$  является апостериорным подтверждением нашего предположения о том, что  $x_s \leq 1$ .

Покажем теперь, что асимптотика решения (4.49) при больших значениях  $\eta$  ( $\eta \gg \eta_{tr} \sim 1$ ) также является степенной. Предполагая априори, что правая часть (4.49) стремится к нулю при  $\eta \rightarrow \infty$  быстрее, чем каждое из слагаемых в левой части, т. е. быстрее, чем  $f(\eta)$  и  $df/d\eta$ , получаем  $xf + \eta(df/d\eta) \approx 0$  при  $\eta \gg 1$ . Решая последнее приближённое ОДУ, получаем  $f(\eta) \sim \eta^{-x}$  при  $\eta \rightarrow \infty$ . Подставляя это решение в правую часть (4.49) и учитывая, что интеграл столкновений сходится при  $1 < x < 3/2$ , видим, что правая часть убывает со скоростью  $\sim \eta^{-3x+2}$ . Таким образом, обосновано априорное предположение о том, что правая часть (4.49) есть  $o$ -малое от значения решения  $f(\eta) \sim \eta^{-x}$  при  $\eta \rightarrow \infty$ . Степенная асимптотика спектра  $f(\eta)$  при больших  $\eta$  обоснована.

Зная асимптотики автомодельного решения при малых и при больших  $\eta$ , мы можем сформулировать краевую задачу для уравнения (4.46) и соответствующую спектральную задачу для определения параметра  $x^*$ . Для уравнения (4.46) мы задаём краевые условия:

$$\frac{df}{d\eta} = 0 \text{ при } \eta = 0 \quad \text{и} \quad xf + \eta \frac{df}{d\eta} \rightarrow 0 \text{ при } \eta \rightarrow \infty. \quad (4.52)$$

Далее мы будем предполагать, что в интервале  $(1, 3/2)$  существует значение показателя  $x = x^*$ , для которого краевая задача (4.46), (4.52) разрешима и, кроме того, это значение и соответствующее решение единственны с точностью до преобразования подобия (4.48).

Для построения вычислительной модели поставим для (4.46) краевую задачу на отрезке  $[\eta_{\min}, \eta_{\max}] \subset (0, \infty)$ . Положим  $f(\eta) = C_0$  при  $\eta < \eta_{\min}$  и  $f(\eta) = C_\infty \eta^{-x}$  при  $\eta > \eta_{\max}$ , где  $\eta_{\min} \ll \eta_{\max}$ . Здесь  $C_0, C_\infty$  – положительные постоянные. Далее будем ассоциировать отрезок  $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$  с переходной областью и поставим на его границах следующие условия для функции  $f(\eta)$ :

$$\left. \frac{df}{d\eta} \right|_{\eta=\eta_{\min}} = 0, \quad \left. xf + \eta \frac{df}{d\eta} \right|_{\eta=\eta_{\max}} = 0. \quad (4.53)$$

Поскольку решение (4.46) инвариантно относительно преобразования (4.48), для реализации условия единственности следует зафиксировать одну из границ в (4.53). Мы будем фиксировать правую границу  $\eta_{\max} \in [10, 100]$  и искать левую границу  $\eta_{\min} \in (0, \eta_{\max}/10]$ , такую что для спектральной задачи



(4.46), (4.53) на отрезке  $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$  удаётся вычислить приближённое решение. В таком случае решение исходной задачи (4.46), (4.52) можно получить, используя операцию продолжения:

$$f(\eta) = f(\eta_{\min}) \text{ при } 0 \leq \eta \leq \eta_{\min}, \quad f(\eta) = C_{\infty} \eta^{-x} \text{ при } \eta_{\max} \leq \eta < \infty, \quad (4.54)$$

где выражение для постоянной  $C_{\infty}$  можно найти из условия непрерывности спектра в точке  $\eta_{\max}$ :

$$C_{\infty} = f(\eta_{\max}) \eta_{\max}^x \text{ или } C_{\infty} = \frac{-A(f, \eta_{\max}) \eta_{\max}^x}{B(f, \eta_{\max})}. \quad (4.55)$$

Здесь также использованы второе граничное условие (4.53) и уравнение (4.46). Продолжение (4.54) необходимо для расчёта функций  $A(f, \eta)$ ,  $B(f, \eta)$  в (4.46).

Ниже решение краевой задачи (4.46), (4.53) вычисляется в итерациях метода установления. Решение, найденное на текущей итерации, используется для расчёта значения  $C_{\infty}$  по одной из формул (4.55). Это значение передаётся на следующую итерацию для продолжения решения, расчёта следующего приближения функций  $A(f, \eta)$ ,  $B(f, \eta)$  и поиска решения краевой задачи.

#### 4.4.2. Некоторые замечания о расчёте интеграла столкновений

Для расчёта правой части (4.46) метод, описанный в п. 2.2.1, следует дополнить с учётом того, что область  $\Delta_{\eta}$  является неограниченной. Необходимость поиска интеграла по такой области обусловлена тем, что в соответствии с (4.54) решение  $f(\eta)$  является ненулевым при сколь угодно больших  $\eta$  (для сравнения напомним, что ранее мы полагали:  $n_{\omega}(t) \equiv 0$  при  $\omega > \omega_{\max}$ ). Как и в п. 2.2.1, будем использовать декомпозицию  $\Delta_{\eta}$  на подобласти, в каждой из которых подынтегральная функция имеет высокий порядок гладкости (аналогичная декомпозиция приведена на рис. 0.1, а). Заметим, что условия стыковки (4.54) в точках  $\eta_{\min}$ ,  $\eta_{\max}$  в сочетании с (4.53) дают:  $f(\eta) \in C^1(\mathbb{R}^+)$ . Однако производные  $f(\eta)$  второго и более высоких порядков в этих точках могут быть разрывными. Ядро интегралов, как и ранее, имеет изломы на прямых  $\eta_2 = \eta$ ,  $\eta_3 = \eta$  плоскости  $(\eta_2, \eta_3)$ . В связи с этим для обеспечения экспоненциальной сходимости методов интегрирования необходимо разделить область  $\Delta_{\eta}$  на прямоугольные, треугольные и трапециевидные ограниченные и неограниченные подобласти, границы которых лежат на линиях:

$\eta_2 = \eta, \eta_3 = \eta$ , вдоль которых терпят разрыв производные  $S(\eta_2, \eta_3)$ ;

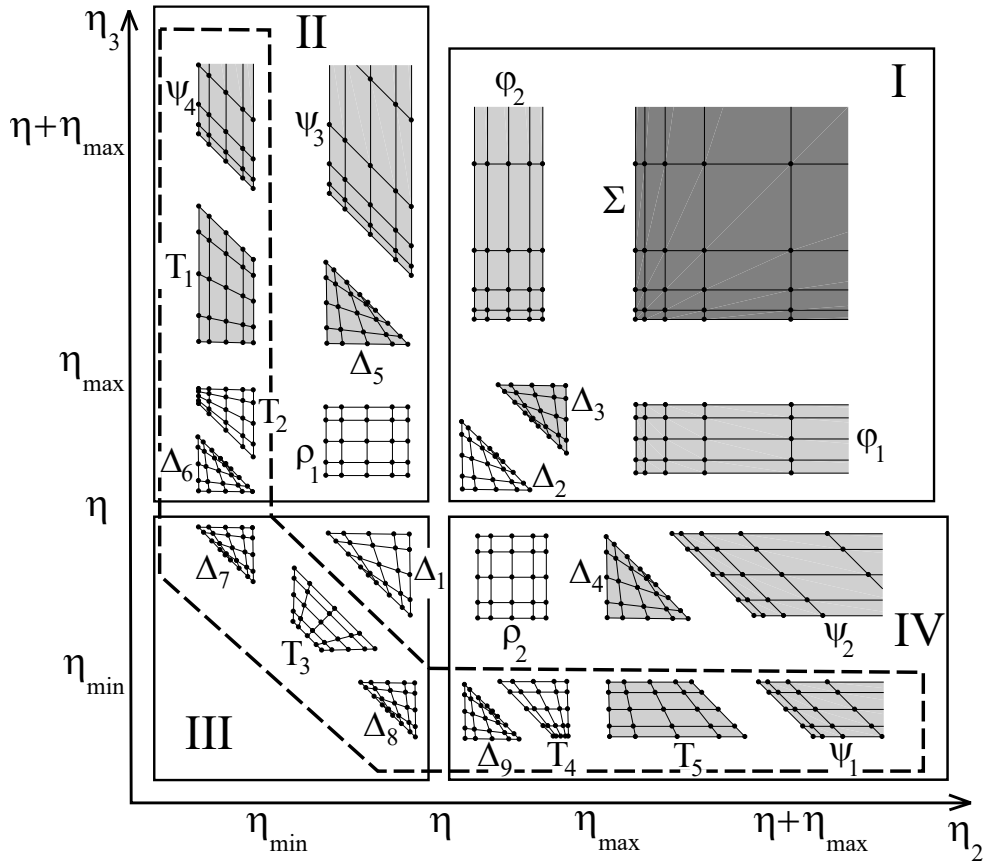
$\eta_2 = \eta_{\min}, \eta_3 = \eta_{\min}, \eta_2 + \eta_3 = \eta_{\min}$ , где выполняется стыковка значений функций  $f_2(\eta), f_3(\eta), f_c(\eta)$ , соответствующая точке  $\eta = \eta_{\min}$ ;

$\eta_2 = \eta_{\max}, \eta_3 = \eta_{\max}, \eta_2 + \eta_3 = \eta_{\max}$ , где выполняется стыковка значений функций  $f_2(\eta), f_3(\eta), f_c(\eta)$ , соответствующая точке  $\eta = \eta_{\max}$ .

Декомпозиция области  $\Delta_\eta$  представлена на рис. 4.17. Для поиска интегралов по ограниченным подобластям  $\rho_1, \rho_2, \Delta_1\text{--}\Delta_9, T_1\text{--}T_5$  сначала осуществляется их отображение на стандартный квадрат  $R_{sq} = \{(x_1, x_2) : -1 \leq x_1, x_2 \leq 1\}$ . При этом для отображения  $\Delta_1\text{--}\Delta_9$  применяются формулы (1.24), (1.25), см. рис. 1.2, а также [204]; для отображения  $T_1\text{--}T_5$  тоже получены необходимые формулы (описание всех замен переменных и их якобианов приведено в [182]). Подчеркнём, что переход к новым переменным определяется функциями из класса  $C^\infty$ . Для поиска интегралов по  $R_{sq}$  можно задействовать любой из методов п. 2.2.1. В частности, на рис. 4.17 в каждой подобласти построены сетки размера  $5 \times 5$ , полученные при использовании формул СС и узлов Чебышёва, см. замечание 2.3.

Для вычисления интегралов по неограниченным подобластям  $\psi_1, \psi_2, \varphi_1$  и  $\psi_3, \psi_4, \varphi_2$  сначала осуществляется их отображение на полосы  $\tilde{R}_{st} = \{(\tilde{y}, \tilde{z}) : \tilde{y} \in [0, \infty), \tilde{z} \in [-1, 1]\}$  и  $\hat{R}_{st} = \{(\hat{y}, \hat{z}) : \hat{y} \in [-1, 1], \hat{z} \in [0, \infty)\}$  соответственно (формулы этих отображений и их якобианов даны в [182]). Для расчёта интегралов по  $\tilde{R}_{st}$  и  $\hat{R}_{st}$  используются тензорные произведения формул Такахаши–Мори (квадратуры для расчёта интегралов на полупрямой, см. (I.14) и теорему I.21) и формул, разработанных в п. 2.2.1 для расчёта интегралов на отрезке. Для вычисления интеграла по подобласти  $\Sigma$  сначала выполняется её отображение на первый квадрант, а затем применяются тензорные произведения формул Такахаши–Мори.

**Замечание 4.1.** В рамках сделанной постановки искомое решение ограничено в точке  $\eta = 0$ . Однако в исходных переменных  $\omega, t$ , в окрестности  $t = t^*$  у аналитического продолжения спектра возникает особая точка, которая, попадая при  $t = t^*$  в  $\omega = 0$ , обеспечивает взрывной рост решения. Последствия этого эффекта наблюдаются и при поиске автомодельного спектра: промежуточные значения решения в итерациях метода установления имеют сильные осцилляции и пики у левой границы области решения, которые можно также



**Рис. 4.17.** Декомпозиция области  $\Delta_\eta$  на треугольные ( $\Delta_k$ ), трапециевидные ( $T_k$ ), прямоугольные ( $\rho_k$ ) и неограниченные ( $\psi_k, \varphi_k, \Sigma$ ) подобласти. Показаны сетки размера  $5 \times 5$ , построенные при использовании узлов Чебышёва. В множествах подобластей, обозначенных номерами «I–IV», значение ядра  $S$  определяется соответственно первым–четвёртым аргументом функции “min” в (4.47). Белым (i); светло-серым (ii) и темно-серым (iii) отмечены подобласти, в которых подынтегральная функция определяется только значениями  $f(\eta)$  при  $\eta < \eta_{\max}$  (i); частично использует асимптотику  $f(\eta) \sim \eta^{-x}$  при  $\eta \geq \eta_{\max}$  и частично значения  $f(\eta)$  при  $\eta < \eta_{\max}$  (ii); определяется только асимптотикой  $f(\eta)$  при  $\eta \geq \eta_{\max}$  (iii). Интегралы по подобластям внутри пунктирного контура используют продолжение  $f(\eta)$  постоянным значением  $f(\eta_{\min})$  из отрезка  $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$  в  $[0, \eta_{\min}]$

ассоциировать с градиентами функции (4.50) при  $C_f \neq 0$ . После отображения подобластей  $\psi_2, \psi_3, \rho_1, \rho_2, \Delta_1, \Delta_4, \Delta_5$ , расположенных на рис. 4.17 вдоль пунктирной линии, на  $R_{sq}, \tilde{R}_{st}$  и  $\widehat{R}_{st}$ , эти особенности приводят к проблемам интегрирования вида (1.57) (при  $h(x) = ((1 + \epsilon) - x)^\alpha$ , где  $\alpha$  – априори неизвестное действительное число,  $0 < \epsilon \ll 1$ ). Высокую эффективность при расчётах полученных интегралов в экспериментах продемонстрировали формулы, описанные в пунктах 2–5 § 1.4.

Суммируя написанное выше, подчеркнём, что для поиска интеграла по  $\Delta_\eta$  помимо реализации методов из п. 2.2.1 сделано следующее: 1) построены  $C^\infty$ -отображения нерегулярных и неограниченных подобластей  $\Delta_\eta$  на стандартный квадрат  $R_{sq}$  и на полосы  $\tilde{R}_{st}$  и  $\widehat{R}_{st}$ ; 2) реализованы методы интегрирования по неограниченным подобластям; 3) реализованы методы, учитывающие положения особенностей, лежащих в малой окрестности области интегрирования за её пределами. Дополнительную информацию см. в [182].

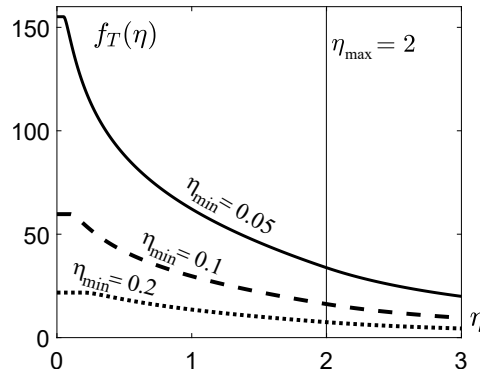
Для демонстрации высокой точности и скорости расчётов по разработанным формулам проведём два эксперимента. В первом зададим тестовую функцию  $f_T(\eta)$  (рис. 4.18), зависящую от трёх параметров:  $\eta_{\min}$ ,  $\eta_{\max}$ ,  $x$ :

$$f_T(\eta) = \begin{cases} C_0, & 0 \leq \eta < \eta_{\min}, \\ -(a\eta^2 + b\eta + 1)\eta^{-x}, & \eta_{\min} \leq \eta \leq \eta_{\max}, \\ C_\infty\eta^{-x}, & \eta > \eta_{\max}, \end{cases} \quad (4.56)$$

где

$$a = x[(2-x)\eta_{\min}^2 - 2(1-x)\eta_{\max}\eta_{\min}]^{-1}, \quad b = -2a\eta_{\max}, \quad C_0 = -(a\eta_{\min}^2 + b\eta_{\min} + 1)\eta_{\min}^{-x}, \\ C_\infty = -(a\eta_{\max}^2 + b\eta_{\max} + 1).$$

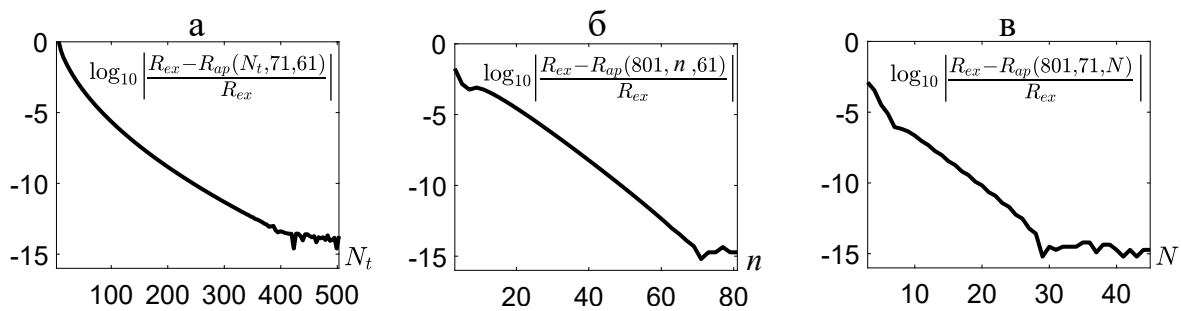
Функция  $f_T(\eta)$  имитирует свойства решений задачи (4.46), (4.53). В частности, при малых  $\eta$  функция  $f_T(\eta)$  имеет плато, при больших  $\eta$  – степенную асимптотику, а при  $\eta_{\min} \rightarrow 0$  значения  $f(\eta_{\min})$  растут пропорционально  $\eta_{\min}^{-x}$ , что существенно усложняет расчёт интеграла для случая  $\eta_{\min} \ll \eta_{\max}$ .



**Рис. 4.18.** Графики функции  $f_T(\eta)$  при  $x = 1.3$ ,  $\eta_{\max} = 2$  и различных значениях  $\eta_{\min}$ :  $\eta_{\min} = 0.05$  (сплошная линия),  $\eta_{\min} = 0.1$  (пунктир),  $\eta_{\min} = 0.2$  (точки)

Зафиксируем  $\eta = 1.01$ ,  $\eta_{\min} = 0.1$ ,  $\eta_{\max} = 2$ ,  $x = 1.23$  и введём обозначение точного значения правой части (4.46) при  $f = f_T$ :  $R_{ex} = A(f_T, \eta) + f_T B(f_T, \eta)$ .

Аппроксимируем  $f_T(\eta)$  на отрезке  $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$  интерполяционным полиномом (1.1) с  $N$  узлами Чебышёва. Для значений правой части (4.46), полученных в расчётах, используем обозначение  $R_{ap}(N_t, n, N)$ , где  $N_t$  – количество узлов квадратуры Такахаши–Мори (I.14),  $n$  – количество узлов квадратурных формул, использованных для расчёта интеграла в каждой подобласти (см. п. 2.2.1). На рис. 4.19 представлены зависимости логарифмов относительных погрешностей расчёта правой части (4.46) от  $N_t$ ,  $n$  и  $N$ . В этих расчётах мы задали  $R_{ex} = R_{ap}(801, 81, 71)$ .



**Рис. 4.19.** Зависимости логарифмов относительных погрешностей расчёта правой части (4.46) от  $N_t$  (а),  $n$  (б),  $N$  (в)

На рис. 4.19, б, в отчётливо проявляется экспоненциальный характер сходимости. Однако скорость сходимости, представленная на рис. 4.19, а, ниже экспоненциальной, что вызвано наличием множителя  $1/\log(4\theta N_t)$  в оценке (I.15). Тем не менее число операций разработанного метода линейно зависит от  $N_t$ , поэтому, задавая, например,  $N_t > 200$ , мы получаем результат быстро и с высокой точностью.

В рамках второго эксперимента дадим сравнение результатов работы созданного алгоритма (СА) и функций пакета Wolfram Mathematica (WM). С этой целью мы вычисляем значения функции  $R_{ex}$  с помощью СА и WM, задавая разные значения параметров  $\eta_{\min}$ ,  $\eta$ ,  $x$  при  $\eta_{\max} = 2$ . В табл. 29 представлено сравнение полученных результатов и временных затрат,  $T_{СА}$  и  $T_{WM}$ . Решения, найденные с применением СА, были сопоставлены с решениями, полученными при двукратном увеличении значений  $N_t$ ,  $M$  и  $N$ . Их относительные отклонения были всегда меньше, чем  $2.27 \times 10^{-11}$ .

На основе данных из табл. 29 можно сделать следующие заключения: 1) результаты, полученные с применением СА и WM, достаточно близки (это

подтверждает, что СА работает корректно); 2) СА во всех рассмотренных случаях позволяет получить более точные результаты, чем WM; 3) время работы WM существенно превышает СА даже в простейшем случае, при больших  $\eta_{\min}$ ; 4) при уменьшении  $\eta_{\min}$  точность расчётов WM несколько снижается, однако даже для значений  $\eta_{\min} = 0.01$  она остается достаточно высокой.

**Таблица 29.** Результаты расчётов правой части (4.46) с применением созданного алгоритма (СА) и пакета Wolfram Mathematica (WM)

$\eta_{\min}$	$x$	$\eta$	Результат СА	Результат WM	$ CA-WM /CA$	$T_{CA}$ (с)	$T_{WM}$ (с)
0.5	1.5	0.501	39.9957739778432	39.9957739480505	$1.45 \times 10^{-10}$	0.36	37.2
0.5	1.23	0.7	187.95695591569	187.956955768542	$7.83 \times 10^{-10}$	0.42	40.9
0.5	1.23	1.49	41.2463746906135	41.2463747732553	$2 \times 10^{-9}$	0.42	43.9
0.1	1.5	0.8	4842.07813448566	4842.07816293161	$5.87 \times 10^{-9}$	0.62	43.3
0.1	1.23	1.01	46536.0787163029	46536.0787198942	$7.71 \times 10^{-11}$	0.52	45.2
0.1	1.03	2	3473744.4765	3473276.9800	$1.35 \times 10^{-4}$	0.067	48.3
0.01	1.16	1.501	94784029.8204267	94783980.7188906	$5.18 \times 10^{-7}$	0.22	46.8
0.01	1.35	0.99	12874999.2377083	12874982.1165897	$1.33 \times 10^{-6}$	0.46	46.6
0.01	1.5	1.99	-2427937.8611	-2428064.0375	$5.2 \times 10^{-5}$	0.49	45.6

#### 4.4.3. Алгоритм решения нелинейной спектральной задачи и контроль погрешности

Прежде всего сведём (4.46), (4.53) к краевой задаче для уравнения второго порядка. Для этого продифференцируем (4.46) по  $\eta$ :

$$\eta \frac{d^2 f}{d\eta^2} + (1+x) \frac{df}{d\eta} = \frac{1}{b} \left( \frac{dA(f, \eta)}{d\eta} + f \frac{dB(f, \eta)}{d\eta} + \frac{df}{d\eta} B(f, \eta) \right). \quad (4.57)$$

Отметим, что добавление к правой части (4.46) произвольной постоянной  $C_a$  с последующим дифференцированием тоже приводит к уравнению (4.57). Конечно, нам нужно найти такое решение задачи (4.57), (4.53), которое соответствует значению  $C_a = 0$ . С этой целью зададим в (4.53)  $\eta_{\max} \in [10, 100]$  и с помощью метода деления отрезка пополам будем искать  $\eta_{\min} \in (0, \eta_{\max}/10]$ , удовлетворяющее следующему нелинейному соотношению:

$$xf(\eta_{\min}) = [A(f, \eta_{\min}, x) + f(\eta_{\min})B(f, \eta_{\min}, x)]/b. \quad (4.58)$$

В таком случае с учётом первого равенства из (4.53) получаем, что  $C_a = 0$ .

Теперь введем оператор  $\Lambda[f]$  и перепишем (4.57) в виде

$$\Lambda[f]f := \eta \frac{d^2 f}{d\eta^2} + \left(1 + x - \frac{B(f, \eta)}{b}\right) \frac{df}{d\eta} - \frac{1}{b} \frac{dB(f, \eta)}{d\eta} f = \frac{1}{b} \frac{dA(f, \eta)}{d\eta}. \quad (4.59)$$

Далее мы найдём приближённое решение спектральной задачи – число  $x$  и функцию  $f(\eta)$ , используя линеаризацию уравнения (4.59) на основе метода установления и интерполяцию (1.3), (1.8) при  $\widehat{\alpha} = x$ ,  $\widehat{\beta} = \eta_{\max}$ ,  $\widehat{\gamma} = 0$ ,  $\widehat{\theta} = 1$ . Именно такие значения параметров (1.8) соответствуют смешанным граничным условиям (4.53). Таким образом, получим итерационный метод, на каждом шаге которого будем искать приближение  $x^*$  с помощью решения задачи линейной алгебры на собственные значения. Будем запускать итерации с различных начальных данных и останавливать их при достижении необходимого значения невязки (см. ниже). Полученные таким образом приближения собственного значения  $x^*$  и собственной функции  $f(\eta)$  нелинейной спектральной задачи будем уточнять с помощью метода установления.

Итак, введём для уравнения (4.59) по образцу п. 2.1.1 фиктивную временную переменную  $t$ , положим  $f = f(t, \eta)$  и используем две регуляризации – простую:  $\mathfrak{R}_t = \partial/\partial t$  и нетривиальную:  $\mathfrak{R}_t = (k_1 - k_2 \Lambda[f])(\partial/\partial t)$ , в которой  $k_1, k_2 > 0$ . Введём равномерную сетку по переменной  $t$  с шагом  $\tau$  и узлами  $t_k = \tau k$ . Обозначим  $f^{[k]} = f^{[k]}(\eta) = f(t_k, \eta)$  и  $A'_\eta = dA(f^{[k]}, \eta)/d\eta$ . После регуляризации уравнения (4.59):

$$\mathfrak{R}_t f = \Lambda[f]f - A'_\eta(f, \eta)/b \quad (4.60)$$

приблизим производную  $(\partial f/\partial t)(t_k, \eta)$  разностным отношением  $(f^{[k+1]} - f^{[k]})/\tau$ . В итоге, следуя идеям п. 2.1.1, для простой регуляризации получим

$$(1 - \tau \Lambda[f^{[k]}])f^{[k+1]} = f^{[k]} - \tau A'_\eta(f^{[k]}, \eta)/b. \quad (4.61)$$

Для нетривиальной регуляризации имеем

$$(k_1 - (k_2 + \tau) \Lambda[f^{[k]}])f^{[k+1]} = (k_1 - k_2 \Lambda[f^{[k]}])f^{[k]} - \tau A'_\eta(f^{[k]}, \eta)/b. \quad (4.62)$$

Напомним, что суть метода установления состоит в том, чтобы используя схему (4.61) или (4.62), переходить от  $k$ -й итерации к  $(k + 1)$ -й до тех пор,

пока не реализуется условие  $\|\mathfrak{R}_t f^{[k+1]}\| \leq \varepsilon_S$ , где  $\varepsilon_S > 0$  – малое число. В таком случае будем говорить, что приближённое решение спектральной задачи,  $f^{[k+1]}$ , найдено с невязкой  $\varepsilon_S$ .

Для приближения решений (4.61), (4.62) при всех  $k = 0, 1, 2, \dots$  применим интерполяцию (1.3), (1.8), которая в совокупности с методом коллокаций приводит к матричным аппроксимациям операторов дифференцирования (см. п. 1.3.1 и (1.47)):

$$\mathbf{F}_\eta \approx D^{(1)}\mathbf{F}, \quad \mathbf{F}_{\eta\eta} \approx D^{(2)}\mathbf{F}. \quad (4.63)$$

Здесь  $\mathbf{F}$ ,  $\mathbf{F}_\eta$ ,  $\mathbf{F}_{\eta\eta}$  – векторы значений решения  $f(\eta)$  и его производных в узлах  $\mathbf{e} = \{e_0, \dots, e_{N+1}\}$ , являющихся образами узлов  $\{-1, x_1^{\text{ch}}, \dots, x_N^{\text{ch}}, 1\}$  интерполяционного полинома (1.3), (1.8) под действием линейного отображения  $\mathcal{L}(x)$  отрезка  $[-1, 1]$  на отрезок  $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$ . При этом  $e_0 = \eta_{\min}$ ,  $e_{N+1} = \eta_{\max}$ ,  $e_j = \mathcal{L}(x_j^{\text{ch}})$ ,  $j = \overline{1, N}$ . Формулы для элементов  $(N+2) \times (N+2)$ -матриц  $D^{(1)}$  и  $D^{(2)}$  приведены в приложении III (см. пункт 3<sub>r</sub> при  $x_j = x_j^{\text{ch}}$  и  $\kappa_{+1} = x/\eta_{\max}$ ,  $\kappa_{-1} = 0$ ). Анализ спектральных свойств схожих матричных аппроксимаций дан в п. 1.3.2, см. рис. 1.9, 1.10.

Пусть далее  $\mathbf{F}^{[k+1]}$  – вектор значений  $\mathbf{F}$ , полученных на  $(k+1)$ -й итерации при расчётах по схемам (4.61), (4.62). Тогда для простой регуляризации с применением (4.63) можем записать:

$$(E - \tau \tilde{\Lambda}_k) \mathbf{F}^{[k+1]} = \mathbf{F}^{[k]} - \tau \text{diag}(A'_\eta(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e}))/b^{[k]}, \quad (4.64)$$

где  $\tilde{\Lambda}_k$  – матричная аппроксимация оператора  $\Lambda[f^{[k]}]$ :

$$\tilde{\Lambda}_k = \text{diag}(\mathbf{e})D^{(2)} + \text{diag}\left(1 + x^{[k+1]} - \frac{1}{b^{[k]}}B(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})\right)D^{(1)} - \frac{1}{b^{[k]}}\text{diag}(B'_\eta(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})).$$

Здесь  $B(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})$  – вектор значений  $B(f^{[k]}, \eta)$  в узлах  $\mathbf{e}$ ,  $\text{diag}(\mathbf{e})$  – диагональная матрица с числами  $\mathbf{e}$  на диагонали,  $E$  – единичная матрица. Векторы  $A'_\eta(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})$  и  $B'_\eta(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})$  содержат производные функций  $A(f, \eta)$  и  $B(f, \eta)$  в узлах  $e_j$ ,  $x^{[k]}$  –  $k$ -е приближение  $x^*$ ,  $b^{[k]} = 1/[2(x^{[k]} - 1)]$ .

Для нетривиальной регуляризации (4.62) выводим:

$$[k_1 E - (k_2 + \tau)\tilde{\Lambda}_k] \mathbf{F}^{[k+1]} = k_1 \mathbf{F}^{[k]} - k_2 \tilde{\Lambda}_k \mathbf{F}^{[k]} - \tau \text{diag}(A'_\eta(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e}))/b^{[k]}. \quad (4.65)$$



Основываясь на (4.64), (4.65), сформулируем следующую задачу на собственное значение: найти набор векторов  $\mathbf{F}^{[k+1]}$  и чисел  $\lambda^{[k+1]}$ , удовлетворяющих уравнению

$$(\mathfrak{M}^{[k]} - \lambda^{[k+1]}E)\mathbf{F}^{[k+1]} = 0. \quad (4.66)$$

Приближение значения  $x^*$  определяется по формуле

$$x^{[k+1]} = -\lambda^{[k+1]} - 1. \quad (4.67)$$

Для простой регуляризации из (4.64) получаем

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}^{[k]} = & \left( \text{diag} \left( 1 - \frac{B(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})}{b^{[k]}(1+x^{[k]})} \right) D^{(1)} - \frac{1}{\tau} E \right)^{-1} \times \\ & \times \left\{ \text{diag}(\mathbf{e}) D^{(2)} - \text{diag} \left( \frac{1}{b^{[k]}} \left[ B'_\eta(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e}) + \frac{A'_\eta(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})}{\mathbf{F}^{[k]}} \right] - \frac{1+x^{[k]}}{\tau} \right) \right\}, \end{aligned}$$

где  $\frac{A'_\eta(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})}{\mathbf{F}^{[k]}}$  обозначает покомпонентное деление вектора  $A'_\eta(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})$  на вектор  $\mathbf{F}^{[k]}$ . Для нетривиальной регуляризации в соответствии с (4.65) имеем:

$$\mathfrak{M}^{[k]} = \left( \text{diag} \left( 1 - \frac{B(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})}{b^{[k]}(1+x^{[k]})} \right) D^{(1)} + \frac{k_1}{\tau} E - \frac{k_2}{\tau} D^{(2)} \right)^{-1} \mathfrak{B}^{[k]},$$

где матрица  $\mathfrak{B}^{[k]}$  определяется по формуле:

$$\mathfrak{B}^{[k]} = \text{diag} \left( \mathbf{e} + (1+x^{[k]}) \frac{k_2}{\tau} \right) D^{(2)} - \text{diag} \left( \frac{(1+x^{[k]})k_1}{\tau} + \frac{1}{b^{[k]}} \left[ B'_\eta(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e}) + \frac{A'_\eta(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})}{\mathbf{F}^{[k]}} \right] \right).$$

Таким образом, используя собственное значение  $x^{[k]}$  и собственный вектор  $\mathbf{F}^{[k]}$ , найденные на предыдущей итерации, для вычисления элементов матрицы  $\mathfrak{M}^{[k]}$ , на текущей  $(k+1)$ -й итерации мы приходим к задаче на собственные числа (4.66), решая которую определяем величины  $x^{[k+1]}$  и  $\mathbf{F}^{[k+1]}$ , удовлетворяющие следующим критериям:

1. Собственное значение  $x^{[k+1]}$ , полученное по формуле (4.67), является действительным числом и  $x^{[k+1]} \in (1, 1.5)$ .
2. Все компоненты  $\mathbf{F}^{[k+1]}$  положительны и невелики.
3. Значения  $\frac{\max |\mathbf{F}^{[k+1]} - \mathbf{F}^{[k]}|}{\tau \max |\mathbf{F}^{[k]}|}$  и  $|x^{[k+1]} - x^{[k]}|$  достаточно малы.

Из множества всех решений задачи (4.66), удовлетворяющих перечисленным критериям, мы выбираем решение с минимальным значением относительной невязки (4.68). Далее используем это решение (вектор  $\mathbf{F}^{[k+1]}$  и число  $x^{[k+1]}$ ) для расчёта матрицы  $\mathfrak{M}^{[k+1]}$  и, таким образом, продолжаем итерации. Итерационный процесс останавливается, когда максимальное значение относительной невязки  $\|\mathbf{R}_r(\eta)\|$  становится достаточно малым. Отметим, что на каждой итерации значение  $\eta_{\min}$  корректируется в соответствии с (4.58). Диапазоны значений  $\eta_{\min}$ ,  $\eta_{\max}$  и других параметров, использованные в расчётах, приведены в табл. 30. Относительная невязка и ее дискретный аналог выглядят следующим образом:

$$R_r(\eta) = \begin{cases} R_r^0, & 0 \leq \eta < \eta_{\min}, \\ R_r^c, & \eta_{\min} \leq \eta \leq \eta_{\max}, \\ R_r^\infty, & \eta > \eta_{\max}. \end{cases} \quad \mathbf{R}_r = \begin{cases} \mathbf{R}_r^0, & 0 \leq \eta < \eta_{\min}, \\ \mathbf{R}_r^c, & \eta_{\min} \leq \eta \leq \eta_{\max}, \\ \mathbf{R}_r^\infty, & \eta > \eta_{\max}, \end{cases} \quad (4.68)$$

где

$$R_r^0(\eta) = R_r^0(x, C_0, \eta) = \frac{|xbC_0 - (A(C_0, \eta) + C_0B(C_0, \eta))|}{\max\{xbC_0, |A(C_0, \eta)|, |C_0B(C_0, \eta)|\}}, \quad C_0 = f(\eta_{\min}),$$

$$R_r^c(\eta) = R_r^c(x, f, \eta) = \frac{\left|xf + \eta \frac{df}{d\eta} - \frac{1}{b} \left(A(f, \eta) + fB(f, \eta)\right)\right|}{\max\left\{|xf(\eta)|, \left|\eta \frac{df}{d\eta}\right|, \left|\frac{A(f, \eta)}{b}\right|, \left|f \frac{B(f, \eta)}{b}\right|\right\}},$$

$$R_r^\infty(\eta) = R_r^\infty(x, C_\infty, \eta) = \frac{|A(C_\infty \eta^{-x}, \eta) + C_\infty \eta^{-x} B(C_\infty \eta^{-x}, \eta)|}{\max\left\{\frac{xbC_\infty}{\eta^x}, \left|A\left(\frac{C_\infty}{\eta^x}, \eta\right)\right|, \left|\frac{C_\infty}{\eta^x} B\left(\frac{C_\infty}{\eta^x}, \eta\right)\right|\right\}}.$$

Вектор  $\mathbf{R}_r^c = R_r^c(x^{[k]}, \mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})$  содержит значения  $R_r(\eta)$ , полученные на  $k$ -й итерации в узлах  $\mathbf{e}$ :

$$\mathbf{R}_r^c = \frac{\left|x^{[k]} \mathbf{F}^{[k]} + \text{diag}(\mathbf{e}) D^{(1)} \mathbf{F}^{[k]} - \frac{1}{b} \left(A(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e}) + \mathbf{F}^{[k]} \cdot B(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})\right)\right|}{\max_c \left\{|x^{[k]} \mathbf{F}^{[k]}|, \left|\text{diag}(\mathbf{e}) D^{(1)} \mathbf{F}^{[k]}\right|, \left|\frac{A(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})}{b}\right|, \left|\mathbf{F}^{[k]} \cdot \frac{B(\mathbf{F}^{[k]}, \mathbf{e})}{b}\right|\right\}}.$$

Здесь символ « $\cdot$ » обозначает покомпонентное произведение. Деление также является покомпонентной операцией,  $\max_c$  обозначает покомпонентный максимум,  $|\mathbf{v}|$  – вектор, состоящий из абсолютных значений компонент  $\mathbf{v}$ . Мы также вычислили значения функции невязки вне отрезка  $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$ :

$$\mathbf{R}_r^0 = \mathbf{R}_r^c(x^{[k]}, C_0^{[k]}, \zeta) = \frac{|x^{[k]}bC_0^{[k]} - (A(C_0^{[k]}, \zeta) + C_0^{[k]}B(C_0^{[k]}, \zeta))|}{\max_c \{x^{[k]}bC_0^{[k]}, |A(C_0^{[k]}, \zeta)|, |C_0^{[k]}B(C_0^{[k]}, \zeta)|\}},$$

$$\mathbf{R}_r^\infty = \mathbf{R}_r^\infty(x^{[k]}, C_\infty^{[k]}, \xi) = \frac{|(A(\vartheta^{[k]}, \xi) + \vartheta^{[k]} \cdot B(\vartheta^{[k]}, \xi))|}{\max_c \{b\vartheta^{[k]}, |A(\vartheta^{[k]}, \xi)|, |\vartheta^{[k]} \cdot B(\vartheta^{[k]}, \xi)|\}}.$$

Здесь  $C_0^{[k]}$  – значение  $f^{[k]}(\eta_{\min})$ , вычисленное на  $k$ -й итерации,  $C_\infty^{[k]}$  получено из (4.55),  $\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_K)$ ,  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_M)$ ,  $\vartheta^{[k]} = (\vartheta_1^{[k]}, \dots, \vartheta_M^{[k]})$  – векторы, компоненты  $\zeta$ ,  $\xi$  лежат вне отрезка  $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$ :

$$\zeta_k = \frac{k-1}{K}\eta_{\min}, \quad \xi_m = \eta_{\max} + \frac{4m}{M}\eta_{\max}, \quad \vartheta_m^{[k]} = C_\infty^{[k]}\xi_m^{-x^{[k]}}, \quad k = \overline{1, K}, \quad m = \overline{1, M}.$$

Выражения  $A(C_0^{[k]}, \zeta)$ ,  $B(C_0^{[k]}, \zeta)$ ,  $A(\vartheta^{[k]}, \xi)$ ,  $B(\vartheta^{[k]}, \xi)$  рассчитывались как разность соответствующих интегралов по областям, представляющим первый квадрант  $Q1$  и треугольник с вершинами  $\{(0, 0), (\tilde{\eta}, 0), (0, \tilde{\eta})\}$  на плоскости  $(\eta_2, \eta_3)$ , где  $\tilde{\eta}$  – соответствующая компонента вектора  $\zeta$  или  $\xi$ . Интеграл по  $Q1$  вычисляется с использованием тензорного произведения формул Такахаши–Мори (I.14) (аналогичный метод использован для расчёта интеграла по области  $\Sigma$  на рис. 4.17). Для расчёта интеграла по треугольнику использованы отображение вида (2.26) и квадратурные формулы из п. 2.2.1 с узлами Чебышёва. Значения  $f_c(\eta) = f(\eta_2 + \eta_3 - \eta)$  в этом треугольнике заданы равными нулю. Такой метод вычисления интегралов не учитывает гладкость решения, поэтому он работает существенно медленнее и менее точно, чем алгоритмы, предложенные выше. Однако этот метод используется для вычисления невязок в небольшом количестве точек (обычно мы полагали  $K = M = 5$ ), что не снижает скорость работы всего алгоритма.

В описанном итерационном процессе в качестве начального приближения использована функция

**Таблица 30.** Значения параметров, используемые в вычислениях

Параметр	Описание	Диапазон значений
$\eta_{\min}$	Левая граница области задачи	1 – 10
$\eta_{\max}$	Правая граница области задачи	10 – 100
$N$	Число узлов интерполяции	41 – 81
$\tau$	Шаг сетки по времени	0.005 – 1
$x_I$	Начальное значение параметра $x$	1.1 – 1.5
$k_1, k_2$	Параметры нетривиальной регуляризации	1 – 100
$C_0$	Значение функции (4.69) при $\eta = \eta_{\min}$	0.001 – 10
$N_{\min}, N_{\max}$	Число непрерывных производных начальных данных в точках $\eta_{\min}, \eta_{\max}$	1–5

$$f_0(\eta) = \begin{cases} C_0, & 0 \leq \eta < \eta_{\min}, \\ p_I(\eta), & \eta_{\min} \leq \eta \leq \eta_{\max}, \\ \eta^{-x_I}, & \eta > \eta_{\max}. \end{cases} \quad (4.69)$$

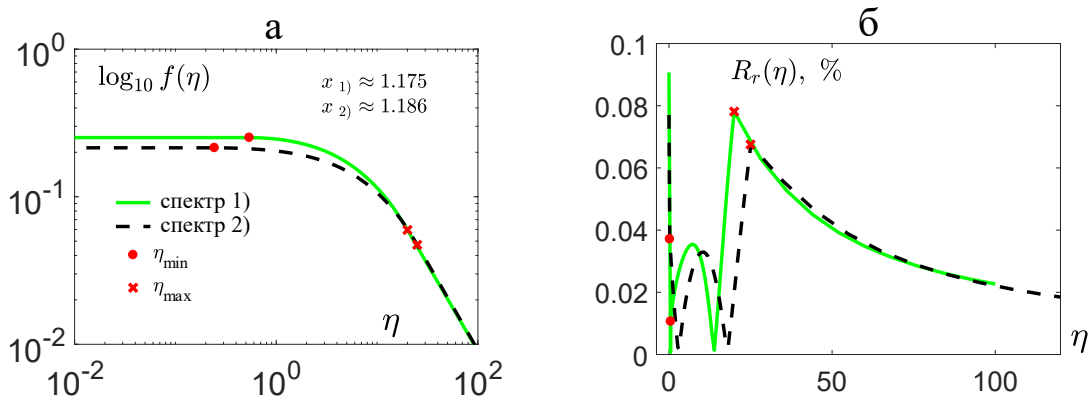
Здесь  $p_I(\eta)$  – многочлен, удовлетворяющий условиям: а)  $p_I(\eta_{\min}) = C_0$ , где  $C_0$  – положительная постоянная; б) производные  $p_I^{(k)}$  в точке  $\eta_{\min}$  равны нулю при  $k = \overline{1, N_{\min}}$ ; в)  $p_I(\eta_{\max}) = \eta_{\max}^{-x_I}$ ; г) производные  $p_I^{(k)}$  в точке  $\eta_{\max}$  равны  $-x_I(-x_I-1)\dots(-x_I-k+1)\eta_{\max}^{-x_I-k}$ ,  $k = \overline{1, N_{\max}}$ . Многочлен степени  $N_{\min} + N_{\max} + 1$ , удовлетворяющий условиям а)–г), существует и является единственным, его легко рассчитать. С учётом свойств  $p_I$  можно заключить, что  $f_0(\eta)$  является  $N_{\min}$  и  $N_{\max}$  раз непрерывно дифференцируемой функцией в точках  $\eta_{\min}$  и  $\eta_{\max}$  соответственно. Значения параметров  $C_0, x_I, \eta_{\min}, \eta_{\max}, N_{\min}, N_{\max}$ , использованные в расчётах, указаны в табл. 30.

Решая задачу на собственные числа (4.66) с разными значениями  $C_0, x_I, \eta_{\min}, \eta_{\max}, N_{\min}, N_{\max}$ , мы находили такие  $f^{[k]}(\eta)$  и  $x^{[k]}$ , которые в итерациях по  $k$  обеспечивают минимальные значения невязки (4.68). Для уточнения полученных решений применялся метод установления, в котором в качестве начальных данных использовались эти решения, а итерации сводились к обращению матриц правых частей уравнений (4.64), (4.65). Задача (4.66) при этом не решалась. Значения  $\eta_{\min}, \eta_{\max}$  фиксировались, а величина  $x^{[k]}$  на каждой итерации пересчитывалась с использованием (4.58), т. е., исходя из

требования, что  $C_a = 0$ . Подчеркнём, что в силу свойств операторов  $D^{(1)}$ ,  $D^{(2)}$  приближения спектра, рассчитываемые в ходе описанного процесса, автоматически удовлетворяли граничным условиям (4.53).

#### 4.4.4. Поиск неклассических спектров и обсуждение результатов

Итак, решение задачи (4.59), (4.53) найдено в два этапа: первый заключается в итерационном решении спектральной задачи (4.66) с начальными данными (4.69). Диапазоны значений использованных параметров указаны в табл. 30. На этом этапе были найдены семь численных решений, удовлетворяющих критериям 1–3, см. с. 297, и дающих значения относительной невязки (4.68) менее 12%. Параметры этих решений представлены в табл. 31, где выделено три группы спектров: первая содержит спектры с  $x < 1.2$ , вторая – спектры с  $1.2 \leq x \leq 1.23$  и третья – спектры с  $x > 1.23$ . Графики спектров из первой группы приведены на рис. 4.20, а; соответствующие графики относительных невязок,  $R_r(\eta)$ , показаны на рис. 4.20, б. Спектры и невязки второй и третьей групп качественно схожи с графиками на рис. 4.20. Функция невязки, как правило, достигает своего максимального значения в окрестности  $\eta = 0$ , где у неё наблюдаются большие градиенты.



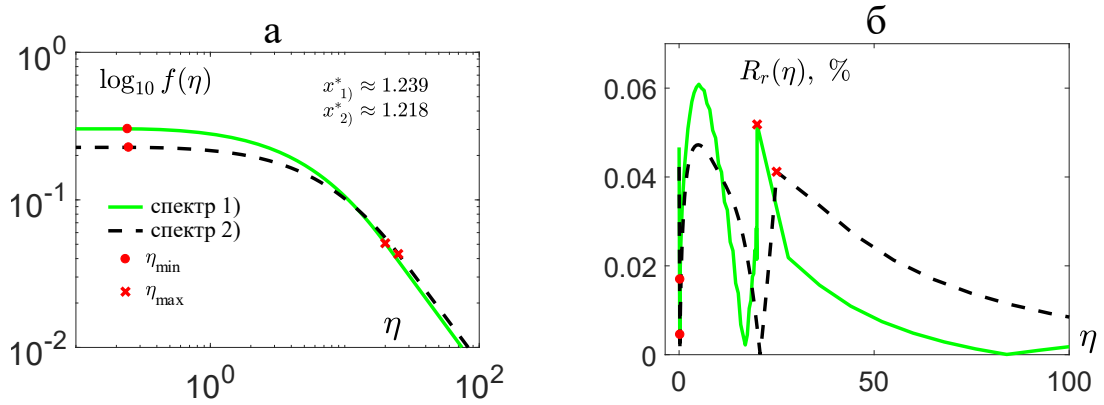
**Рис. 4.20.** Графики спектров, имеющих  $x < 1.2$ , в логарифмическом масштабе (а); графики относительных невязок (б)

На втором этапе при решении уравнений (4.64), (4.65) в итерациях некоторые из спектров, найденных на первом этапе, удалось уточнить. Наименьшие значения невязки были достигнуты при использовании в качестве начальных данных спектров 1) и 2) из первой группы. Уточнённые спектры

**Таблица 31.** Спектры, полученные на первом этапе, и их параметры

Параметр	Значение параметра						
	группа 1		группа 2			группа 3	
	1)	2)	3)	4)	5)	6)	7)
$\eta_{\min}$	0.5404	0.2438	0.225	0.745	0.2211	0.8277	0.524
$\eta_{\max}$	20	25	23	20	20	25	22
$x$	1.175	1.186	1.213	1.227	1.215	1.252	1.295
$\ R_r\ $	9.07%	7.7%	8.21%	8.97%	11.58%	11.45%	9.65%

вместе с их относительными невязками показаны на рис. 4.21. Наилучший результат получен при уточнении спектра 2), при этом  $\|R_r(\eta)\| \approx 4.69\%$ . Уточнение спектра 1) даёт  $\|R_r(\eta)\| \approx 6.11\%$ .



**Рис. 4.21.** Уточненные спектры 1) и 2) (а) и графики относительных невязок уточненных спектров (б)

Подчеркнём, что значения функции невязки не определяют погрешность найденного приближённого решения спектральной задачи. Невязка характеризует лишь разность значений левой и правой частей уравнения (4.57) на продолженном решении  $f(\eta)$  (см. (4.54)) при  $\eta \in [0, \infty)$ . Однако, учитывая, что максимальные значения невязок двух решений на рис. 4.21 близки, мы полагаем, что их погрешности характеризуются разностью значений показателя  $x^*$  в этих решениях, т. е. составляют порядка 2%.

Напомним, что найденные неклассические спектры реализуются в обратном каскаде частиц бозе-газа и ассоциируются с началом процесса конденсации. При этом наблюдается ускорение нелинейных процессов взаимодействия

волн, что приводит к нарушению базовой гипотезы ТВТ о слабом нелинейном взаимодействии. Сначала её нарушение происходит на малых частотах  $\omega < \omega_{cr}$ , при этом пороговое значение  $\omega_{cr}$  можно оценить. Действительно, ТВТ применима, если  $T_N \gg T_L$ , где  $T_N$  и  $T_L$  – характерные временные масштабы нелинейных и линейных взаимодействий;  $T_N \sim n_\omega(t)/\dot{n}_\omega(t)$ , где  $\dot{n}_\omega(t)$  – производная от спектра по времени,  $T_L = 2\pi/\omega$ . Используя автомодельный анзац (4.45) и асимптотику  $f_\eta(\eta) \rightarrow 0$  при  $\eta \rightarrow 0$ , для малых  $\eta$  имеем:

$$T_N \sim \frac{n_\omega}{\dot{n}_\omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0} = \frac{\hat{\tau}^{-a} f(\eta)}{a\hat{\tau}^{-a-1} f(\eta) + f'(\eta)\eta} \Big|_{\eta \rightarrow 0} = \frac{\hat{\tau}}{a}.$$

Условие  $T_N \gg T_L$  приводит к неравенству:  $\omega \gg \omega_{cr} := 2\pi a/(t^* - t)$ , с постоянной  $a = x^*/[2(x^* - 1)]$ , задающему масштаб частот, в котором найденное автомодельное решение второго рода корректно описывает динамику бозе-газа. Для наиболее точного решения имеем  $a \approx 2.77$ . Значение  $a$  определяет также скорость роста спектра  $n_\omega(t)$  в окрестности  $t = t^*$ ,  $\omega = 0$ :  $n_0(t) = f(0)/(t^* - t)^a$ . Это служит апостериорным подтверждением тезиса, данного в начале параграфа и в замечании 4.1: в окрестности  $t^*$  решение имеет точку ветвления логарифмического типа, которая при  $t = t^*$  выходит в область задачи.

Полученные результаты не содержат доказательств существования автомодельного спектра второго рода. Однако они представляют важный шаг в сторону строгого обоснования спектров, обнаруженных ранее при анализе эволюции решения КУ со временем (в работе [79] получено  $x^* = 1.24$ , в [80, 81] найдено  $x^* = 1.2345$ ). Как отмечено выше, автомодельные преобразования решений, полученных в указанных работах, приводят к большим (порядка 100%) погрешностям, детали реализации и тестирования численных методов в них отсутствуют. Наконец, нужно заметить, что масштабы частот начальных данных и частот, в которых реализуются искомые решения, существенно отличаются. Всё это говорит о необходимости численного анализа именно автомодельной постановки. Как мы видим, этот анализ требует весьма нетривиальных алгоритмических решений и в целом является сложным. Нужно признать, что в силу этих сложностей гарантировать величину второго знака после точки в полученных показателях неклассических спектров так и не удаётся. Принципиальным является то, что, контролируя невязку решения, нам удалось подтвердить автомодельный характер эволюции.

**Основные результаты главы 4** состоят в следующем.

1. Разработаны новые методы моделирования однородного изотропного взаимодействия волн в физических системах, описываемых НУШ. С применением методов проведён анализ задач Коши и нелинейных спектральных задач для четырёхволнового КУ.
2. Проведена верификация теории волновой турбулентности, ТВТ: показано, что ТВТ даёт высокоточное описание волновой кинетики на временных интервалах порядка удвоенного характерного времени <sup>1</sup> эволюции волнового спектра и отражает качественное поведение спектра исходного НУШ вплоть до разрушения (blow-up) решения КУ.
3. Найдены точные стационарные решения КУ, представляющие спектры Колмогорова–Захарова с логарифмической поправкой для прямого каскада, объясняющие экспериментальные данные из [70].
4. Исследованы автомодельные режимы эволюции решений КУ (автомодельные спектры): получены и проверены в расчётах формулы для скорости движения спектральных фронтов, с контролем погрешности решена задача об автомодельной эволюции решения КУ второго рода.

---

<sup>1</sup>Под характерным понимается время, по прошествии которого значения спектра в какой-либо области частотного диапазона изменяются в два раза.



## Заключение

Настоящее диссертационное исследование на соискание степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» представляет собой завершённый научный труд, гармонично сочетающий разработку новых моделей, методов и программ для решения двух прикладных задач из области гидродинамики: 1) моделирование течений полимерной жидкости в современных технологиях экструзии, печати и напыления и 2) описание слаботурбулентных процессов в нелинейных физических системах.

В этой работе соискатель исходил из принципа адекватности, сформулированного его учителем А.М. Блохиным: «Математическая модель должна строиться с учётом наиболее важных свойств и особенностей исследуемого процесса. Эти же свойства и особенности должны быть учтены при разработке вычислительной модели на этапе дискретизации дифференциальной задачи». В ходе применения принципа адекватности при решении двух указанных задач мы видим, что математический аппарат, необходимый для достоверного и высокоточного описания важных эффектов из двух разных областей гидродинамики, должен основываться на одних и тех же идеях: учёте свойств гладкости (регулярности) искомых решений, анализе эволюции особых точек их аналитических продолжений в комплексной плоскости и выявлении параметров и условий, определяющих устойчивость решений на исходном нелинейном уровне. Подчеркнём, что при этом необходим комплексный взгляд на проблему разработки моделей, методов и программ. Действительно, для создания эффективного численного метода и программы необходима информация о свойствах исследуемого процесса и описывающих его уравнений, а для понимания свойств нелинейных процессов и разработки их моделей нужен грамотно организованный численный эксперимент.

Отметим, что в диссертации сделан новый важный шаг на пути к адекватному численному моделированию сложных нелинейных процессов и систем: развиты алгоритмы на основе дробно-рациональных приближений, работающие в том числе в областях с достаточно сложной геометрией и позволяющие существенно уменьшить объём используемой памяти и число операций

за счёт учёта информации о свойствах гладкости и особенностях искомых функций и благодаря авторским схемам формирования и решения задач линейной алгебры, соответствующих исходным дифференциальным моделям. Соискатель верит в то, что созданные алгоритмы позволят значительно продвинуться в решении многих нелинейных проблем, лежащих за рамками диссертационного исследования.

В завершение определим перспективы дальнейших разработок по тематике диссертации. С точки зрения теории и практики применения разработанных ДРБИ важными задачами являются: поиск конформных отображений, позволяющих наиболее эффективно адаптировать аппроксимацию к особенности приближаемых функций; адаптация не только узлов, но и весов барицентрических интерполяций; более глубокий анализ связей между ДРБИ и наилучшими полиномиальными приближениями, отмеченных в предположении 1.1. Успешное применение НМБН связано с совершенствованием параллельных вариантов метода; с новыми подходами к ускорению итерационных процессов; с разработкой новых методов для отслеживания эволюции особых точек искомых решений при изменении времени или параметров задачи; а также с реализацией в рамках НМБН схемы переменных направлений для адаптации алгоритма к градиентам решений, расположенным на линиях (гиперповерхностях) сложных структур, лежащих внутри области задачи, см. § 2.8.

Разработанная обобщённая мезоскопическая модель может быть применена к расчёту более сложных нестационарных течений полимерной жидкости при наличии импульсных механических и температурных воздействий с возможностью оптимизации параметров реологии жидкости и технологических процессов для получения изделий с заданными характеристиками. Отметим, что предложенный в диссертации сценарий разрушения (потери устойчивости) ламинарных течений полимерной жидкости основан на анализе эволюции особых точек решений нелинейных уравнений. Актуальными являются дальнейшие верификация и валидация сценария с учётом существующих теоретических и экспериментальных данных о ламинарно-турбулентных переходах в вязкоупругих жидкостях. Прежде всего это касается рассмотрения дву- и трёхмерных постановок и задания адекватных граничных условий. По

поводу последнего заметим, что в диссертации использован достаточно простой вид условий на границе – условия прилипания. Однако известно, что в течениях некоторых расплавов полимеров, а также при анализе задачи о границе раздела двух несмешивающихся жидкостей и задачи о динамическом краевом угле, условия прилипания не являются корректными [306–308].

Созданный метод решения нелинейных кинетических уравнений может быть эффективно использован во множестве приложений, среди них моделирование взаимодействий волн на поверхности глубокой воды, гравитационных волн в ранней Вселенной, электромагнитных волн в оптоволоконных системах, волновой кинетики в сверхтекучих жидкостях и др. В этих приложениях также актуальны проблемы верификации ТВТ и поиска стационарных и автомодельных спектров. Особое внимание при этом следует уделить устойчивости найденных спектров, которую также можно верифицировать в расчётах. Наконец, высокие аппроксимационные качества предложенных методов позволяют рассчитывать на их успешное применение для моделирования *неоднородных анизотропных волновых взаимодействий*, описываемых кинетическими уравнениями с многомерными интегралами столкновений.

# Литература

- [1] БЛОХИН А. М., АЛАЕВ Р. Д. Интегралы энергии и их приложения к исследованию устойчивости разностных схем. Новосибирск, 1993. 211 с.
- [2] ЛАДЫЖЕНСКАЯ О. А., УРАЛЬЦЕВА Н. Н. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1973. 576 с.
- [3] ПОРТНЯГИН Д. В. Шаудеровские оценки и полная регулярность решений эллиптической системы // Мат. заметки. 2009. Т. 85, №1. С. 89–97.
- [4] ПЕТРОВСКИЙ И. Г. Избранные труды. Дифференциальные уравнения. Теория вероятностей. М.: Наука, 1987. 424 с.
- [5] БАБЕНКО К. И. О явлении насыщения в численном анализе // Докл. АН СССР. 1978. Т. 241, №3. С. 505–508.
- [6] БАБЕНКО К. И. Основы численного анализа. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986. 744 с.
- [7] АЛГАЗИН С. Д. Численные алгоритмы без насыщения в классических задачах математической физики. М.: Изд-во «АИСнТ», 2016. 390 с.
- [8] БАРИН В. П., ПЕТРОВ А. Г. Гидродинамическая модель слуховой улитки человека // Журн. выч. мат. и мат. физ. 2009. Т. 49, № 9. С. 1708–1723.
- [9] БАБЕНКО К. И., ПЕТРОВИЧ В. Ю. Доказательные вычисления в задаче о существовании решения уравнения удвоения // Докл. АН СССР. 1984. Т. 277, № 2. С. 265–269.
- [10] БАБЕНКО К. И., СТЕБУНОВ В. А. О спектральной задаче Орра-Зоммерфельда // Препринт № 93, Ин-т прикл. матем., 1975.
- [11] ЛОКУЦИЕВСКИЙ О. В., ГАВРИКОВ М. Б. Начала численного анализа. М.: Изд-во «Янус», 1995. 571 с.
- [12] БЕЛЫХ В. Н. Алгоритмы без насыщения в осесимметричных краевых задачах // Докл. АН СССР. 1987. Т. 295, №5. С. 146–150.
- [13] ПЕТРОВ А. Г., САНДУЛЯНУ Ш. В. Моделирование электрохимической обработки методом граничных элементов без насыщения // Журн. выч. мат. и мат. физ. 2016. Т. 56, №10. С. 1810–1820.
- [14] БЕЛЫХ В. Н. Особенности реализации ненасыщаемого численного метода для внешней осесимметричной задачи Неймана // Сиб. мат. журн. 2013. Т. 54, №6. С. 1237–1249.

- [15] ИВАНОВ В. Я. Аналитическая техника при решении задач электронной оптики // Научное приборостроение. 2014. Т. 24, № 1. С. 96–103.
- [16] АЛГАЗИН С. Д. О локализации собственных значений замкнутых линейных операторов // Сиб. мат. журн. 1983. Т. 24, № 2. С. 3–8.
- [17] БАРИН В.П. Аппроксимация дифференциальных операторов с учетом граничных условий // Журн. выч. мат. и мат. физ. 2023. Т. 63, № 8. С. 1251–1271.
- [18] TREFETHEN L. N. Approximation theory and approximation practice. Philadelphia: SIAM, 2013. 371 p.
- [19] SCHNEIDER C., WERNER W. Some new aspects of rational interpolation // Math. Comp. 1986. Vol. 47. P. 285–299.
- [20] BALTENSBERGER R., BERRUT J.-P., NOËL B. Exponential convergence of a linear rational interpolant between transformed Chebyshev points // Math. Comp. 1999. Vol. 68. P. 1109–1120.
- [21] NOURDINE A., FLANDIN L., ALBÉROLA N. ET AL. Extrusion of a nano-ordered active layer for organic photovoltaic cells // Sustainable Energy & Fuels. 2017. Vol. 1. Is. 9. P. 2016–2027.
- [22] ORRILL M., LEBLANC S. Printed thermoelectric materials and devices: Fabrication techniques, advantages and challenges // J. Appl. Polym. Sci. 2017. Vol. 134. Art. #44256.
- [23] SALEEM K., LORENZELLI L., RAVINDER S. D. Technologies for printing sensors and electronics over large flexible substrates: A Review // IEEE Sensors J. 2015. Vol. 15. No. 6. P. 3164–3185.
- [24] CHOI Ji-H., WANG H., OH S. J. ET AL. Exploiting the colloidal nanocrystal library to construct electronic devices // Science. 2016. Vol. 352. Is. 6282. P. 205–208.
- [25] ТУЕВ В.И., МАЛЮТИН Н.Д., ЛОЩИЛОВ А.Г. и др. Исследование возможностей применения аддитивной принтерной технологии формирования пленок органических и неорганических материалов электроники // Докл. ТУСУРа. 2015, № 4(38). С. 52–63.
- [26] MCKINLEY G. H., PAKDEL P., OZTEKIN A. Rheological and geometric scaling of purely elastic flow instabilities // J. Non-Newtonian Fluid Mech. 1996. Vol. 67. P. 19–47.
- [27] GARG P., CHAUDHARY I., KHALID M., SHANKAR V., SUBRAMANIAN G. Viscoelastic pipe flow is linearly unstable // Phys. Rev. Lett. 2018. Vol. 121. Art. #024502.
- [28] SCHMID J. P. Nonmodal stability theory // Annu. Rev. Fluid Mech. 2007. Vol. 39. P.129–162.

- [29] JOVANOVIĆ M. R., KUMAR S. Transient growth without inertia // *Phys. of Fluids*. 2010. Vol. 22. Art. #023101.
- [30] MEULENBROEK B., STORM C., BERTOLA V., WAGNER CH., BONN D., VAN SAARLOOS W. Intrinsic route to melt fracture in polymer extrusion: a weakly nonlinear subcritical instability of viscoelastic Poiseuille flow // *Phys. Rev. Lett.* 2003. Vol. 90. No. 2. Art. #024502.
- [31] DATTA S.S., ARDEKANI A.M., ARRATIA P.E. ET AL. Perspectives on viscoelastic flow instabilities and elastic turbulence // *Phys. Rev. Fluids*. 2022. Vol. 7. Art. #080701.
- [32] СНАБРА R. P., RICHARDSON J. F. *Non-Newtonian flow and applied rheology*. 2nd ed. Oxford: Butterworth–Heinemann, 2008. 536 p.
- [33] БОРЗЕНКО Е. И., ШРАГЕР Г. Р. Течения неньютоновской жидкости со свободной поверхностью. Томск: Изд-во Томск. гос. ун-та, 2022. 208 с.
- [34] РЫЛЬЦЕВА К.Е., ШРАГЕР Г.Р. Численное моделирование неизотермического течения степенной жидкости в канале со скачком сечения // *Выч. технологии*. 2019. Т. 24, № 5. С. 75–89.
- [35] РОКРОВСКИЙ V. N. *The Mesoscopic Theory of Polymer Dynamics*. 2nd ed. Berlin: Springer, 2010. 256 p.
- [36] АЛТУХОВ Ю. А., ГУСЕВ А. С., ПЫШНОГРАЙ Г. В., КОШЕЛЕВ К. Б. Введение в мезоскопическую теорию текучести полимерных систем. Барнаул: Изд-во АлтГПА, 2012. 121 с.
- [37] ROUSE P. E. A Theory of the Linear Viscoelastic Properties of Dilute Solutions of Coiling Polymers // *J. Chem. Phys.* 1953. Vol. 21. No. 7. P. 1272–1280.
- [38] ZIMM B. H. Dynamics of polymer molecules in dilute solution: viscoelasticity, flow birefringence and dielectric loss // *J. Chem. Phys.* 1956. Vol. 24. No.2. P. 269–278.
- [39] DE GENNES P. G. *Scaling Concepts in Polymer Physics*. Ithaca: Cornell Univ. Press, 1986. 324 p.
- [40] DOI M., EDWARDS S. F. *The Theory of Polymer Dynamics*. Oxford: Oxford Univ. Press, 1986.
- [41] BIRD R. B., CURTISS C. F., ARMSTRONG R. C., HASSAGER O. *Dynamics of polymeric liquids*. New York: Wiley, 1987. Vol. 2: Kinetic theory, 2nd ed.
- [42] GIESEKUS H. A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation dependent tensorial mobility // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 1982. Vol. 11. Is. 1-2. P. 69–109.

- [43] VOLKOV V. S., VINOGRADOV G. V. Molecular theories of nonlinear viscoelasticity of polymers // *Rheol. Acta*. 1984. Vol. 23. No. 3. P. 231–237.
- [44] VINOGRADOV G. V., ПОКРОВСКИЙ В. Н., ЯНОВСКИЙ Ю. Г. Theory of viscoelastic behaviour of concentrated polymer solutions and melts in one-molecular approximation and its experimental verification // *Rheol. Acta*. 1972. Vol. 7. P. 258–274.
- [45] ПЫШНОГРАЙ Г. В., ПОКРОВСКИЙ В. Н., ЯНОВСКИЙ Ю. Г., КАРНЕТ Ю. Н., ОБРАЗЦОВ И. Ф. Определяющее уравнение нелинейных вязкоупругих (полимерных) сред в нулевом приближении по параметрам молекулярной теории и следствия для сдвига и растяжения // *Докл. АН СССР*. 1994. Т. 339, № 5. С. 612–615.
- [46] ПОКРОВСКИЙ В. Н., АЛТУКНОВ Ю. А., ПЫШНОГРАЙ Г. В. The mesoscopic approach to the dynamics of polymer melts: consequences for the constitutive equation. // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 1998. Vol. 76. P. 153–181.
- [47] ГОЛОВИЧЕВА И. Э., ЗИНОВИЧ С. А., ПЫШНОГРАЙ Г. В. Влияние молекулярной массы на сдвиговую и продольную вязкость линейных полимеров // *ПМТФ*. 2000. Т. 41, № 2. С. 154–160.
- [48] KUZNETSOVA J. L., SKULSKIY O. I. Verification of mesoscopic models of viscoelastic fluids with a non-monotonic flow curve // *Korea–Australia Rheol. J.* 2016. Vol. 28. P. 33–40.
- [49] КУЗНЕЦОВ А. Е. Влияние реологических характеристик полимерного расплава на структуру вихревого течения в сходящемся канале с прямоугольным сечением: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Барнаул, 2018.
- [50] ЛААС А. А., МАКАРОВА М. А., МАЛЫГИНА А. С., РУДАКОВ Г. О., ПЫШНОГРАЙ Г. В. Уточнение реологической модели для описания линейной и нелинейной вязкоупругости полимерных систем // *Выч. мех. сплошных сред*. 2021. Т. 14, № 1. С. 12–29.
- [51] ЛААС А. А., РУДАКОВ Г. О., ПЫШНОГРАЙ Г. В., КОШЕЛЕВ К. Б. Структурно-феноменологическая реологическая модель для инженерных расчетов течений полимерных сред // *Известия АлтГУ. Математика и механика*. 2022. № 4 (126). С. 115–122.
- [52] SHIBATA Y. On the R-boundness for the two phase problem with phase transitions: compressible–incompressible model problem // *Funk. Ekvacioj*. 2016. Vol. 59. P. 243–287.
- [53] БАТАЖИН А. Б., ЛЮБИМОВ Г. А., РЕГИРЕР С. А. Магнитогидродинамические течения в каналах. М.: Наука, 1970. 672 с.
- [54] RICHARDSON L. F. *Weather Prediction by Numerical Processes*. 2nd ed. Boston: Cambridge Univ. Press, 2007. 236 p.

- [55] KOLMOGOROV A. N. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers // Dokl. Akad. Nauk. SSSR. 1941. Vol. 30. No. 9. P. 301–304.
- [56] ОБУКНОВ А. М. On the distribution of energy in the spectrum of turbulent flow // Bull. Acad. Sci. USSR, Geog. Geophys. 1941. Vol. 5. No. 4. P. 453–466.
- [57] МОНИН А.С., ЯГЛОМ А.М. Статистическая гидромеханика. Изд. второе, переработанное и расширенное. Т.2. СПб: Гидрометеоздат, 1996.
- [58] БАЕВ М.К., ЧЕРНЫХ Г.Г. Численная модель турбулентного течения за нагретой решеткой в аэродинамической трубе // Мат. моделирование. 2011. Т. 23, № 10. С. 44–64.
- [59] ZAKHAROV V.E., L'VOV V.S., FALKOVICH G. Kolmogorov Spectra of Turbulence I: Wave Turbulence. Germany: Springer, 1992. 262 p.
- [60] NAZARENKO S.V. Wave Turbulence. Heidelberg, Germany: Springer, 2012. 279 p.
- [61] ZAKHAROV V. E., MUSER S. L., RUBENCHIK A. M. Hamiltonian approach to the description of non-linear plasma phenomena // Physics Reports. 1985. Vol. 129. No. 5. P. 285–366.
- [62] ESCOBEDO M., VELAZQUEZ J.J.L. On the theory of Weak Turbulence for the Nonlinear Schrödinger Equation // Memoirs of the American Mathematical Society. 2015. Vol. 238. Art. #1124.
- [63] ВАСКЕВИЧ В. Л., ЩЕРБАКОВ А. И. Сходимость последовательных приближений в задаче Коши для интегродифференциального уравнения с квадратичной нелинейностью // Мат. труды. 2018. Т. 21, № 2. С. 136–149.
- [64] PITAEVSKII L.P., STRINGARI S. Bose–Einstein Condensation and Superfluidity. Oxford Univ. Press, 2016. 554 p.
- [65] MALONEY J. V., NEWELL A. C. Nonlinear Optics. 1st ed. Boca Raton: CRC Press, 2019. 448 p.
- [66] ZUREK W. H. Cosmological experiments in superfluid helium? // Nature. 1985. Vol. 317. P. 505–508.
- [67] SPIEGEL A. Fluid dynamical form of the linear and nonlinear Schrödinger equations // Physica D: Nonlinear Phenomena. 1980. Vol. 1. Is. 2. P. 236–240.
- [68] ANDERSON M. H., ENSHER J. R., MATTHEWS M. R., WIEMAN C. E., CORNELL E. A. Observation of Bose–Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor // Science. 1995. Vol. 269. No. 5221. P. 198–201.



- [69] POLKOVNIKOV A., SENGUPTA K., SILVA A., VENGALATTORE M. Colloquium: Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems // *Rev. of Modern Phys.* 2011. Vol. 83. P. 863–883.
- [70] NAVON 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.
- [71] NAVON N., EIGEN CH., ZHANG J. ET AL. Synthetic dissipation and cascade fluxes in a turbulent quantum gas // *Science*. 2019. Vol. 366. Is. 6463. P. 382–385.
- [72] GARCIA-OROZCO A. D., MADEIRA L., MORENO-ARMIJOS M.A. ET AL. Universal dynamics of a turbulent superfluid Bose gas // *Phys. Rev. A*. 2022. Vol. 106. Art. #023314.
- [73] DYACHENKO S., NEWELL A.C., PUSHKAREV A., ZAKHAROV V.E. Optical turbulence: weak turbulence, condensates and collapsing filaments in the nonlinear Schrödinger equation // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1992. Vol. 57. No. 1-2. P. 96–160.
- [74] FJØRTOFT R. On the changes in the spectral distribution of kinetic energy for twodimensional, nondivergent flow // *Tellus*. 1953. Vol. 5. No. 3. P. 225–230.
- [75] CHOI Y., L'VOV Y.V., NAZARENKO S.V. Probability densities and preservation of randomness in wave turbulence // *Phys. Lett. A*. 2004. Vol. 332. No. 3. P. 230–238.
- [76] CHOI Y., L'VOV Y.V., NAZARENKO S.V., POKORNI B. Anomalous probability of large amplitudes in wave turbulence // *Phys. Lett. A*. 2005. Vol. 339. No. 3. P. 361–369.
- [77] CHOI Y., L'VOV Y.V., NAZARENKO S.V. Joint statistics of amplitudes and phases in wave turbulence // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2005. Vol. 201. No. 1. P. 121–149.
- [78] WICK G.C. The evaluation of the collision matrix // *Phys. Rev.* 1950. Vol. 80. No. 2. P. 268–272.
- [79] SEMIKOZ D. V., TKACHEV I. I. Kinetics of Bose condensation // *Phys. Rev. Lett.* 1995. Vol. 74. No. 16. P. 3093–3097.
- [80] LACAZE R., LALLEMAND P., POMEAU Y., RICA S. Dynamical formation of a Bose–Einstein condensate // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2001. Vol. 152. P. 779–786.
- [81] CONNAUGHTON C., POMEAU Y. Kinetic theory and Bose–Einstein condensation // *Comptes Rendus Physique*. 2004. Vol. 5. Is. 1. P. 91–106.
- [82] POLNIKOV V.G., FARINA L. On the problem of optimal approximation of the four-wave kinetic integral // *Nonlinear Processes in Geophysics*. 2002. Vol. 9. P. 497–512.
- [83] JANSSEN P. A.E.M. Nonlinear Four-Wave Interactions and Freak Waves // *J. of Phys. Oceanography*. 2003. Vol. 33. Is. 4. P. 863–884.

- [84] PROMENT D., ONORATO M., ASINARI P., NAZARENKO S.V. Warm cascade states in a forced-dissipated Boltzmann gas of hard spheres // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2012. Vol. 241. No. 5. P. 600–615.
- [85] 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.
- [86] LANFORD O.E. Time evolution of large classical systems. Chapter in book // *Dynamical Systems. Theory and Applications. Lecture Notes in Physics* / Ed. by J. Moser. Berlin; Heidelberg: Springer, 1975. Vol. 38.
- [87] LANFORD O.E. The hard sphere gas in the Boltzmann-Grad limit // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1981. Vol. 106. Is.1–2, P. 70–76.
- [88] DENG Y., HANI Z. Full derivation of the wave kinetic equation // *Inventiones mathematicae*. 2023. Vol. 233. P. 543–724.
- [89] 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.
- [90] БРУШЛИНСКИЙ К.В., КАЖДАН Я.М. Об автомодельных решениях некоторых задач газовой динамики // *Успехи мат. наук*. 1963. Т. 18, вып. 2. С. 3–23.
- [91] Proc. of International Conference «Painlevé equations and related topics». Euler International Mathematical Institute. St. Petersburg. 2011. June 17–23.
- [92] FORNBERG B., WEIDEMAN J.A.C. A numerical methodology for the Painlevé equations // *J. of Comp. Phys.* 2011. Vol. 230. P. 5957–5973.
- [93] BENDER C.M., ORSZAG S.A. *Advanced mathematical methods for scientists and engineers*. N.-Y.: McGraw-Hill, 1978. 594 p.
- [94] SULEM C., SULEM P-L., FRISH H. Tracing complex singularities with spectral methods // *J. of Comp. Phys.* 1983. Vol. 50. P. 138–161.
- [95] PAULS W., MATSUMOTO T., FRISCH U., BEC J. Nature of complex singularities for the 2D Euler equation // *Physica D*. 2006. Vol. 219. P. 40–59.
- [96] KUZNETSOV E.A., SPECTOR M.D., ZAKHAROV V.E. Formation of singularities on the free surface of an ideal fluid // *Phys. Rev. E*. 1994. Vol. 49. No. 2. P. 1283–1290.
- [97] LUSHNIKOV P.M., DYACHENKO S.A., SILANTYEV D.A. New conformal mapping for adaptive resolving of the complex singularities of Stokes wave // *Proc. Math. Phys. Eng. Sci.* 2017. Vol. 473. No. 2202. Art. #20170198.

- [98] LUSHNIKOV P.M. SILANTYEV D.A., SIEGEL M. Collapse Versus Blow-Up and Global Existence in the Generalized Constantin–Lax–Majda Equation // *J. of Nonlinear Sci.* 2021. Vol. 31. No. 82. DOI: 10.1007/s00332-021-09737-x
- [99] БАРИН В.П. Интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений на римановых поверхностях с неограниченной точностью // *Журн. выч. мат. и мат. физ.* 2019. Т. 59, № 7. С. 1158–1173.
- [100] CAFLISCH R.E., GARGANO F., SAMMARTINO M., SCIACCA V. Complex singularities and PDEs // *Riv. Math. Univ. Parma.* 2015. Vol. 6. No. 1. P. 69–133.
- [101] WEIDEMANN J.A.C. Dynamics of Complex Singularities of Nonlinear PDEs // *Recent Advances in Industrial and Applied Mathematics* / Eds. T.Ch. Rebollo, R. Donat, I. Higuera. Springer Series. Valencia, 2019. Vol. 1. P. 227–247.
- [102] ZHURAVLEVA E.N. Some exact solutions that describe an ideal fluid flow with a free boundary // *Phys. of Fluids.* 2023. Vol. 35. Art. #017104.
- [103] KARABUT E.A., ZHURAVLEVA E.N., ZUBAREV N.M. Application of transport equations for constructing exact solutions for the problem of motion of a fluid with a free boundary // *J. Fluid Mech.* 2020. Vol. 890. Art. #A13.
- [104] DYACHENKO A.I., DYACHENKO S.A., LUSHNIKOV P.M., ZAKHAROV V.E. Dynamics of poles in 2D hydrodynamics with free surface: new constants of motion // *J. Fluid Mech.* 2019. Vol. 874. P. 891–925.
- [105] DYACHENKO A.I., DYACHENKO S.A., LUSHNIKOV P.M., ZAKHAROV V.E. Short branch cut approximation in two-dimensional hydrodynamics with free surface // *Proc. R. Soc. A.* Vol. 476. Art. #20200811.
- [106] KEUNINGS R. On the high Weissenberg number problem // *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.* 1986. Vol. 20. P. 209–226.
- [107] HULSEN M. A., FATTAL R., KUPFERMAN R. Flow of viscoelastic fluids past a cylinder at high Weissenberg number: stabilized simulations using matrix logarithms // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 2005. Vol. 127. P. 27–39
- [108] SHNAPP R., STEINBERG S. Non-modal elastic instability and elastic waves in weakly perturbed channel flow // *Phys. Rev. Fluids.* 2022. Vol. 7. Art. #063901.
- [109] БУЛАТОВ М.В., ЧИСТЯКОВ В.Ф. О некоторых результатах исследования вырожденных систем интегро-дифференциальных уравнений в школе Ю.Е. Бояринцева // *Изв. Иркутск. гос. ун-та. Серия: Математика.* 2017. Т. 20. С. 17–31.
- [110] БУЛАТОВ М.В. О регуляризации вырожденных интегродифференциальных уравнений // *Журн. выч. мат. и мат. физ.* 2002. Т. 42, № 11. С. 1666–1672.

- [111] ЧИСТЯКОВ В.Ф. О свойствах колец интегро-дифференциальных операторов и соответствующих им уравнений // *Мат. заметки*. 2022. Т. 112, № 2. С 291–297.
- [112] БУДАК Б.М., САМАРСКИЙ А.А., ТИХОНОВ А.Н. Сборник задач по математической физике. 4-е изд., испр. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004, 688 с.
- [113] SEMISALOV B.V., BELYAEV V.A., BRYNDIN L.S., GORYNIN A. G., БЛОКНИН А. М., GOLUSHKO S.K., ШНАРЕЕВ V. P. Verified simulation of the stationary polymer fluid flows in the channel with elliptical cross-section // *Appl. Math. and Comp.* 2022. Vol. 430. Art. #127294. P. 1–25.
- [114] 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.
- [115] БАБЕНКО К.И. Несколько замечаний о дискретизации эллиптических задач // *Докл. АН СССР*, 1975. Т. 221, № 1. С. 11–14.
- [116] БЕЛЫХ В. Н. Об абсолютной  $\varepsilon$ -энтропии одного компакта бесконечно дифференцируемых периодических функций // *Сиб. мат. журн.* 2011. Т. 53, № 3. С. 381–393.
- [117] БЕЛЫХ В. Н. Об абсолютной  $\varepsilon$ -энтропии одного компакта бесконечно дифференцируемых непериодических функций // *Сиб. мат. журн.* 2018. Т. 59, № 6. С. 947–959.
- [118] PONTRJAGIN L., SCHNIRELMANN L. Sur Une Propriete Metrique de la Dimension // *Annals of Math.* 1932. Vol. 33. No. 1. P. 156–162.
- [119] КОЛМОГОРОВ А. Н. Асимптотические характеристики некоторых вполне ограниченных метрических пространств // *Докл. АН СССР*. 1956. Т. 108, № 3. С. 585–589.
- [120] БАБЕНКО К.И. Об энтропии одного класса аналитических функций // *Научные доклады высшей школы*. 1958, № 2 С. 9–16.
- [121] RUMP S.M. Verification methods: rigorous results using floating-point arithmetic // *Acta Numerica*. 2010. Vol. 19. P. 287–449.
- [122] JACKSON D. On Approximation by Trigonometric Sums and Polynomials // *Trans. Amer. Math. Soc.* 1912. Vol. 13. P. 491–515.
- [123] ДЗЯДЫК В. К. Введение в теорию равномерного приближения функций полиномами. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1977. 512 с.
- [124] FABER G. Über polynomische entwickelungen // *Mathematische Annalen*. Berlin; Heidelberg: Springer, 1903. Bd. 57. S. 389–408.
- [125] БЕРНШТЕЙН С. Н. О наилучшем приближении непрерывных функций посредством многочленов данной степени // *Сообщ. Харьк. Мат. об-ва (2)*. 1912, № 13. С. 49–144.

- [126] BOYD J. Chebyshev and Fourier Spectral Methods. 2nd. ed. Univ. of Michigan, 2000. 594 p.
- [127] ДЗЯДЫК В. К. О конструктивной характеристике функций, удовлетворяющих условию  $\text{Lip } \alpha$  ( $0 < \alpha < 1$ ) на конечном отрезке вещественной оси // Изв. АН СССР. Серия математическая. 1956. Т. 20, вып. 2. С. 623–642.
- [128] TEE T.-W., TREFETHEN 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.
- [129] HIGHAM N. J. The numerical stability of barycentric Lagrange interpolation // IMA J. of Num. Anal. 2004. Vol. 24. Is. 4, P. 547–556.
- [130] JAFARI-VARZANEH H. A., HOSSEINI S. M. A new map for the Chebyshev pseudospectral solution of differential equations with large gradients // Numerical Algorithms. 2015. Vol. 69. P. 95–108.
- [131] ГОНЧАР А.А. О сходимости обобщенных аппроксимаций Паде мероморфных функций // Мат. сборник. 1975. Т. 98(140), № 4(12). С. 564–577.
- [132] ГОНЧАР А.А., РАХМАНОВ Е.А. Равновесная мера и распределение нулей экстремальных многочленов // Мат. сборник. 1984. Т. 125(167), № 1(9). С. 117–127.
- [133] NUTTALL J., SINGH S.R. Orthogonal polynomials and Padé approximants associated with a system of arcs // J. of Approx. Theory. Vol. 21. Is. 1. 1977. P. 1–42.
- [134] СТАНЛ Н.Р. Poles and zeros of best rational approximants of  $|x|$  // Constr. Approx. 1994. Vol. 10. P. 469–522.
- [135] СТАНЛ Н.Р. Best uniform rational approximation of  $x^\alpha$  on  $[0, 1]$  // Acta Math. 2003. Vol. 190. P. 241–306.
- [136] СУЕТИН С.П. О сходимости рациональных аппроксимаций полиномиальных разложений в областях мероморфности заданной функции // Мат. сборник. 1978. Т. 105(147), № 3. С. 367–381.
- [137] РАХМАНОВ Е.А., СУЕТИН С.П. Аппроксимации Чебышёва–Паде для многозначных функций // Тр. ММО. 2022. Т. 83, № 2. С. 101–126.
- [138] АПТЕКАРЕВ А.И. Точные константы рациональных аппроксимаций аналитических функций // Мат. сборник. 2002. Т. 193, № 1. С. 3–72.
- [139] АПТЕКАРЕВ А.И., КОЙЭЛААРС А.Э. Аппроксимации Эрмита–Паде и ансамбли совместно ортогональных многочленов // Успехи мат. наук. 2011. Т. 66, вып. 6(402). С. 123–190.

- [140] TREFETHEN L.N., NAKATSUKASA Y., WEIDEMANN J.A.C. Exponential node clustering at singularities for rational approximation, quadrature, and PDEs // *Numerische Mathematik*. 2021. Vol. 147. P. 227–254.
- [141] FILIP S.-I., NAKATSUKASA YU., TREFETHEN L.N., BECKERMANN B. Rational minimax approximation via adaptive barycentric representations // *SIAM J. of Sci. Comp.* 2018. Vol. 40. No. 4. P. A2427–A2455.
- [142] АПТЕКАРЕВ А.И., БУСЛАЕВ В.И., МАТИНЕС-ФИНКЕЛЬШТЕЙН А., СУЕТИН С.П. Аппроксимации Паде, непрерывные дроби и ортогональные многочлены // *Успехи мат. наук*. 2011, Т. 66, вып. 6(402). С. 37–122
- [143] ИДИМЕШЕВ С. В. Дробно-рациональная аппроксимация в начально-краевых задачах с фронтами // *Выч. технологии*. 2020. Т. 25, № 2. С. 63–79.
- [144] NAKATSUKASA Y., SETE O., TREFETHEN L.N. The AAA algorithm for rational approximation // *SIAM J. on Sci. Comp.* 2018. Vol. 40. No. 3. P. A1494–A1522.
- [145] КАЗАНДЖАН Э. П. Об одном численном методе конформного отображения односвязных областей. М., 1975. Препринт ИПМ АН СССР, №82.
- [146] DRISCOLL T. A., TREFETHEN L. N. Schwarz–Christoffel Mapping. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge Univ. Press, 2002. Vol. 8. 132 p.
- [147] TREFETHEN L.N. Numerical conformal mapping with rational functions // *Computational Methods and Function Theory*. 2020. Vol. 20. P. 369–387.
- [148] COTTRELL J. A., HUGHES TH. J. R., BAZILEVS YU. Isogeometric Analysis: Toward Integration of CAD and FEA. Singapore: John Wiley & Sons, 2009. 360 p.
- [149] АЛГАЗИН С.Д. Численное исследование уравнений Навье–Стокса // *ПМТФ*. 2007. Т. 48, № 5. С. 43–52.
- [150] GOTTLIEB D., HUSSAINI M. Y., ORSZAG S. A. Introduction: theory and applications of spectral methods, in R. G. Voigt, D. Gottlieb and M. Y. Hussaini, *Spectral Methods for Partial Differential Equations*. Philadelphia: SIAM, 1984.
- [151] GENTLEMAN W. M. Implementing Clenshaw–Curtis quadrature, II: Computing the cosine transformation // *Comm. ACM*. 1972. Vol. 15. P. 343–346.
- [152] MORI M. An IMT-type double exponential formula for numerical integration // *Publ. RIMS. Kyoto Univ.*, 1978. Vol. 14. P. 713–729.

- [153] АЛГАЗИН С. Д., БАБЕНКО К. И. Об одном численном алгоритме решения задачи на собственные значения для линейных дифференциальных операторов // Докл. АН СССР. 1979. Т. 244, № 5. С. 1049–1053.
- [154] SHEN J., TANG T., WANG L-L. Spectral Methods. Algorithms, Analysis and Applications. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. 469 p.
- [155] SLEPTSOV A. G. Grid-projection solution of an elliptic problem for an irregular grid // Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. 1993. Vol. 8. No. 6. P. 519–543.
- [156] СЛЕПЦОВ А. Г., ШОКИН Ю. И. Адаптивный проекционно-сеточный метод для эллиптических задач // Журн. выч. мат. и мат. физ. 1997. Т. 37, № 5. С. 572–586.
- [157] ИСАЕВ В. И., ШАПЕЕВ В. П. Варианты метода коллокаций и наименьших квадратов повышенной точности для численного решения уравнений Навье–Стокса // Журн. выч. мат. и мат. физ. 2010. Т. 50, №10. С. 1758–1770.
- [158] ШАПЕЕВ В. П., БРЫНДИН Л. С., БЕЛЯЕВ В. А. Решение эллиптических уравнений в полигональных областях методом коллокаций и наименьших квадратов // Вестн. ЮУрГУ. Сер. Мат. моделирование и программирование. 2019. Т. 12, № 3. С. 140–152.
- [159] ВОСНЕВ Р. В., GUNZBURGER M. D. Least-Squares Finite Element Methods. New York: Springer-Verlag. Ser. Applied Mathematical Sciences, 2009. 660 p.
- [160] ALI BEIK F. P., MOVAHED F. S., AHMADI-ASL S. On the Krylov subspace methods based on tensor format for positive definite Sylvester tensor equations // Numer. Linear Algebra Appl. 2016. Vol. 23. P. 444–466.
- [161] CHEN ZH., LU L. A gradient based iterative solutions for Sylvester tensor equations // Mathematical Problems in Engineering. 2013. Vol. 2013. Art. #819479.
- [162] СЕМИСАЛОВ Б.В. Математическое моделирование в задачах переноса заряда в полупроводниковых кремниевых устройствах: специальность 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / Семисалов Борис Владимирович; Омский гос. университет им. Ф.М. Достоевского. Омск, 2011. 184 с.
- [163] БЛОХИН А. М., СЕМИСАЛОВ Б. В., ИБРАГИМОВА А. С. Численный анализ задач переноса заряда в полупроводниковых устройствах. Saarbrücken, Germany: Palmarium Acad. Publ., 2012.
- [164] БЛОХИН А. М., СЕМИСАЛОВ Б.В. Конструирование одного класса вычислительных схем в задаче о баллистическом диоде // Мат. моделирование. 2010. Т. 22, № 7. С. 3–21.

- [165] БЛОХИН А. М., ИБРАГИМОВА А. С., СЕМИСАЛОВ Б. В. Конструирование вычислительных алгоритмов для задачи о баллистическом диоде // Журн. выч. мат. и мат. физ. 2010. Т. 50, № 1. С. 188–208.
- [166] БЛОХИН А. М., ИБРАГИМОВА А. С., СЕМИСАЛОВ Б. В. Конструирование вычислительного алгоритма для системы моментных уравнений, описывающих перенос заряда в полупроводниках // Мат. моделирование. 2009. Т. 21, № 4. С. 15–34.
- [167] 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.
- [168] СЕМИСАЛОВ Б.В. Применение дробно-рациональных интерполяций для решения краевых задач с особенностями // Вестн. ЮУрГУ ММП. 2022. Т. 15, № 4. С. 5–19.
- [169] СЕМИСАЛОВ Б. В. Об одном подходе к численному решению задач Дирихле произвольной размерности // Сиб. журн. выч. мат. 2022. Т. 25, № 1. С. 77–95.
- [170] СЕМИСАЛОВ Б. В. Разработка и анализ быстрого псевдоспектрального метода решения нелинейных задач Дирихле // Вестн. ЮУрГУ ММП. 2018. Т. 11, № 2. С. 123–138.
- [171] СЕМИСАЛОВ Б. В. Быстрый нелокальный алгоритм решения краевых задач Неймана–Дирихле с контролем погрешности // Выч. методы и программирование. 2016. Т. 17, № 4. С. 500–522.
- [172] 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.
- [173] СЕМИСАЛОВ Б.В. О точных решениях пуазейлевского типа для течений вязкоупругой полимерной жидкости в цилиндрическом канале // ПМТФ. 2023. Т. 64, № 4. С. 139–151.
- [174] 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.
- [175] БЛОХИН А.М., СЕМИСАЛОВ Б.В. Нахождение стационарных течений пуазейлевского типа для несжимаемой полимерной жидкости методом установления // Журн. выч. мат. и мат. физ. 2022. Т. 62, № 2. С. 305–319.
- [176] 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.



- [177] 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.
- [178] 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.
- [179] 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.
- [180] 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.
- [181] 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.
- [182] SEMISALOV B.V., GREBENEV V.N., MEDVEDEV S.B., NAZARENKO S.V. Numerical analysis of a self-similar turbulent flow in Bose–Einstein condensates // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2021. Vol. 102. Art. #105903.
- [183] 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.
- [184] 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.
- [185] 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.
- [186] KHALID 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. Art. #134502.

- [187] 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.
- [188] GLIDDEN J.A.P., EIGEN CH., DOGRA L. H., HILKER T.A., SMITH R.P., HADZIBABIC Z. Bidirectional dynamic scaling in an isolated Bose gas far from equilibrium // *Nature Physics*. 2021. Vol. 17. No. 4. P. 457–461.
- [189] ТИХОМИРОВ В. М. Поперечники множеств в функциональных пространствах и теория наилучших приближений // *Успехи мат. наук.* 1960. Т. 15, вып. 3(93). С. 81–120.
- [190] ГАВРИКОВ М. Б. Методы без насыщения в вычислительной математике // *Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша.* 2019, № 07. 40 с.
- [191] DZJADYK V. K., IVANOV V. V. On asymptotics and estimates for the uniform norms of the Lagrange interpolation polynomials corresponding to the Chebyshev nodal points // *Analysis Mathematica*. 1983. Vol. 9. P. 85–97.
- [192] SALZER H. E Lagrangian interpolation at the Chebyshev points  $x_{n,\nu} = \cos(\nu\pi/n)$ ,  $\nu = O(1)n$ ; some unnoted advantages // *Comput. J.* 1972. Vol. 15. P. 156–159.
- [193] TREFETHEN L. N *Spectral methods in MATLAB*. Philadelphia: SIAM, 2000, 165 p.
- [194] FUNARO D., HEINRICHS W. Some results about the pseudospectral approximation of one-dimensional fourth-order problems // *Numer. Math.* 1990. Vol. 58. P. 399–418.
- [195] HUANG W., SLOAN D. M. The pseudospectral method for third-order differential equations // *SIAM J. Numer. Anal.* 1992. Vol. 29. No. 6. P. 1626–1647.
- [196] HUANG W., SLOAN D. M. The pseudospectral method for solving differential eigenvalue problems // *J. Comp. Phys.* 1994. Vol. 111. No. 2. P. 399–409.
- [197] ГОЛУШКО С. К., СЕМИСАЛОВ Б. В. Численное моделирование деформирования анизотридных конструкций с применением высокоточных схем без насыщения // *Мат. моделирование и численные методы.* 2015, № 6. 23–45.
- [198] GOLUSHKO S. K., SEMISALOV B. V. Calculation and design of lattice cylindrical shells manufactured of unidirectional CFRPs // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2017. Vol 894. Art. #012022. P. 1–8. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/894/1/012022>
- [199] EHLICH H., ZELLER K. Auswertung der Normen von Interpolationsoperatoren // *Math. Annalen.* 1966. Bd. 164. S. 105–112.
- [200] GÜNTTNER R. Evaluation of Lebesgue constants // *SIAM J. Numer. Anal.* 1980. Vol. 17. No. 4. P. 512–520.
- [201] IBRAHIMOGLU B. A. Lebesgue functions and Lebesgue constants in polynomial interpolation // *J. of Inequalities and Applications.* 2016. Vol. 93. P. 1–15.

- [202] NAKAMURA S. Numerical Analysis and Graphic Visualization With Matlab. New Jersey: Prentice Hall PTR. Upper Saddle River, 1996. 447 p.
- [203] DAVIS P.J., RABINOWITZ P. Methods of Numerical Integration. 2nd ed. California: Acad. Press, INC, 1984. 626 p.
- [204] HOSSAIN M.A., ISLAM M.S. Generalized composite numerical integration rule over a polygon using gaussian quadrature // Dhaka. Univ. J. Sci. 2014. Vol. 62. No.1. P. 25–29.
- [205] СЕДОВ Л. И. Механика сплошной среды. М.: Наука, 1970. Т. 1. 492 с.
- [206] АМЕНЗАДЕ Ю. А. Теория упругости: Учеб. для университетов. 3-е изд., доп. М.: «Высш. шк.», 1976. 272 с.
- [207] VON RIESZ M. Über einen Sat'z des Herrn Serge Bernstein // Acta. Math. 1916. Bd. 40. S. 43–47.
- [208] TAYLOR W.J. Method of Lagrangian curvilinear interpolation // J. Res. Nat. Bur. Stand. 1945. Vol. 35. P. 151–155.
- [209] DUPUY M. Le calcul numérique des fonctions par l'interpolation barycentrique // Compt. Rend. Acad. Sci. 1948. Vol. 226. P. 158–159.
- [210] СЕМИСАЛОВ Б.В., КУЗЬМИН Г. А. К вопросу о приближении гладких функций с погранслойными составляющими // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2021. Т. 27, № 4. С. 111–124.
- [211] BERRUT J.-P., ELEFANTE G. A periodic map for linear barycentric rational trigonometric interpolation // Appl. Math. and Comp. 2020. Vol. 371. Art. #24924.
- [212] BERRUT J.-P., ELEFANTE G. A linear barycentric rational interpolant on starlike domains // Electronic Transactions on Numerical Analysis. 2022. Vol. 55. P. 726–743.
- [213] RUMP S.M. INTLAB - INTerval LABoratory // Developments in Reliable Computing / Ed. by T. Csendes. Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 1999. P. 77–104.
- [214] БИБЕРДОРФ Э.А., БЛИНОВА М.А., ПОПОВА Н.И. Модификации метода дихотомии матричного спектра и их применение к задачам устойчивости // Сиб. журн. выч. мат. 2022. Т. 21, № 2. С. 139–154.
- [215] СУЕТИН П.К. Классические ортогональные многочлены. 3-е изд., перераб. и доп. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 480 с.
- [216] SZEGÖ G. Orthogonal polynomials. New York: Amer. Math. Soc., 1959. 432 p.
- [217] IRI M., MORIGUTI S., TAKASAWA Y. On a certain quadrature formula // RIMS. Kogyuroku Kyoto Univ., 1970. Vol. 91. P. 82–118 (in Jap.).

- [218] ТРЕНОГИН В.А. Функциональный анализ. М.: Наука, 1980. 496 с.
- [219] БЕЛОВ А.А., КАЛИТКИН Н.Н. Эволюционная факторизация и сверхбыстрый счёт на установление // Мат. моделирование. 2014. Т. 26, № 9. С. 47–64.
- [220] КОНОВАЛОВ А. Н. Введение в вычислительные методы линейной алгебры. Новосибирск: Наука. Сиб. изд. фирма, 1993. 154 с.
- [221] ПЕТРОВ И. Б., ЛОБАНОВ А. И. Введение в вычислительную математику. М.: Национальный Открытый Университет «ИНТУИТ», 2016.
- [222] БЕЙКЕР ДЖ., ГРЕЙВС-МОРРИС П. Аппроксимации Паде. М.: Мир, 1986. 502 с.
- [223] BRYNDIN L.S., SEMISALOV B.V., BELIAEV V.A., SHAPEEV V.P. Numerical analysis of the blow-up of one-dimensional polymer fluid flow with a front // Comp. Math and Math. Phys. 2024. Vol. 64. No. 1. P. 151–165.
- [224] ZAKHAROV V.E. Statistical theory of gravity and capillary waves on the surface of a finite-depth fluid // European Journal of Mechanics - B/Fluids. 1999. Vol. 18. No. 3. P. 327–344.
- [225] CHURKIN D.V., KOLOKOLOV I.V., PODIVILOV E.V., VATNIK I.D., NIKULIN M.A., VERGELES S.S., TEREKHOV I.S., LEBEDEV V.V., FALKOVICH G., BABIN S.A., TURITSYN S.K. Wave kinetics of random fibre lasers // Nat. Commun. 2015. Vol. 6. Art. #6214.
- [226] ZAKHAROV V.E., FILONENKO N. The energy spectrum for stochastic oscillation of a fluid's surface // Dokl. Akad. Nauk. 1966. Vol. 170. P. 1292–1295.
- [227] BERRUT J.-P., MITTELMANN H.D. Adaptive point shifts in rational approximation with optimized denominator // J. Comp. Appl. Math. 2004. Vol. 164–165. P. 81–92.
- [228] ШАРЫЙ С. П. Интервальные методы доказательных вычислений. Решение систем линейных уравнений. Материалы XIV Всерос. конф. молодых учёных по мат. моделированию и информационным технологиям, 15–17 октября 2013 г. Томск. <http://www.nsc.ru/interval/shary/Slides/Shary-YM2013.pdf>
- [229] ГОДУНОВ С.К. Решение систем линейных уравнений. Новосибирск: Наука, 1980. 177 с.
- [230] БИБЕРДОРФ Э. А., ПОПОВА Н. И. Гарантированная точность современных алгоритмов линейной алгебры. Новосибирск: ИСО РАН, 2006. 319 с.
- [231] ДЕММЕЛЬ ДЖ. Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения: Пер. с англ. М.: Мир, 2001. 430 с.

- [232] БЕЛЯЕВ В.А., БРЫНДИН Л.С., ГОЛУШКО С.К., СЕМИСАЛОВ Б.В., ШАПЕЕВ В.П. Н-, P- и HP-варианты метода коллокации и наименьших квадратов для решения краевых задач для бигармонического уравнения в нерегулярных областях и их приложения // Журн. выч. мат. и мат. физ. 2022. Т. 62, № 4. С. 531–552.
- [233] ANDERS L., KENT-ANDRE M., GARTH W. Automated solution of differential equations by the finite element method: The FEniCS book. Berlin; Heidelberg: Springer Science & Business Media, 2012. 731 p.
- [234] COIRIER W.C., POWELL K.G. An accuracy assessment of Cartesian-mesh approaches for the Euler equations // J. of Comp. Phys. 1995. Vol. 117. No. 1. P. 121–131.
- [235] BELYAEV V.A., SHAPEEV V.P. Versions of the collocation and least squares method for solving biharmonic equations in non-canonical domains // AIP Conf. Proc. 2017. Vol. 1893. No. 1. Art. #030102.
- [236] ZIENKIEWICZ O.C., TAYLOR R.L., ZHU J.Z. The finite element method: its basis and fundamentals. Amsterdam; Boston: Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. 733 p.
- [237] GEUZAINЕ CH., REMACLE J-F. Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities // Int. J. for Numerical Methods in Engineering. 2009. Vol. 79. No. 11. P. 1309–1331.
- [238] Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2020663386 от 27 октября 2020 г. Программа решения краевых задач для дифференциальных уравнений с частными производными в нерегулярных областях hp-вариантом метода коллокации и наименьших квадратов. Беляев В.А., Брындин Л.С., Шапеев В.П.
- [239] VOROZHTSOV E.V., SHAPEEV V. P. On the efficiency of combining different methods for acceleration of iterations at the solution of PDEs by the method of collocations and least residuals // Appl. Math. and Comput. 2019. Vol. 363. Art. #124644.
- [240] 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 // Выч. технологии. 2007. Т. 12, № 3. С. 53–70.
- [241] ГОЛУШКО С. К., ИДИМЕШЕВ С. В., ШАПЕЕВ В. П. Метод коллокаций и наименьших невязок в приложении к задачам механики изотропных пластин // Выч. технологии. 2013. Т. 18, № 6. С. 31–43.
- [242] BOOCH G., МАКСИМЧУК R.A., ENGEL M.W., YOUNG B.J., CONALLEN J., HOUSTON K.A. Object-Oriented Analysis and Design with Applications. 3rd ed. Boston: Addison-Wesley, 2007. 691 p.

- [243] ГАММА Э., ХЕЛМ Р., ДЖОНСОН Р., ВЛИССИДЕС ДЖ. Приёмы объектно-ориентированного проектирования: паттерны проектирования. СПб.: Питер, 2003. 368 с.
- [244] EGGE S. Distributed Fast Fourier Transform for Heterogeneous GPU: Bachelorarbeit. Stuttgart: University of Stuttgart, 2021. 109 p. <https://elib.uni-stuttgart.de/bitstream/11682/11935/1/DistributedFFT-1.pdf>
- [245] FRIGO M., JOHNSON S.G. The design and implementation of FFTW3 // Proc. of the IEEE. 2005. Vol. 93. No. 2. P. 216–231.
- [246] КАЛИТКИН Н.Н. Численные методы. 2-е изд. СПб.: БХВ-Петербург, 2011. 592 с.
- [247] ЛОЙЦЯНСКИЙ Л. Г. Механика жидкости и газа. М.; Л.: Гостехиздат, 1950. 678 с.
- [248] PAI SHIN-I Introduction to the Theory of Compressible Flow. Literary Licensing, LLC. 2013. 400 p.
- [249] БЛОХИН А. М., РУДОМЕТОВА А. С. Стационарные решения уравнений, описывающих неизотермическую электроконвекцию слабопроводящей несжимаемой полимерной жидкости // Сиб. журн. индустр. мат. 2015. Т. 18, № 1. С. 3–13.
- [250] АХИЕЗЕР А. И., АХИЕЗЕР И. А. Электромагнетизм и электромагнитные волны. М.: Высш. шк., 1985, 504 с.
- [251] НОРДЛИНГ К., ОСТЕРМАН Д. Справочник по физике для учёного и инженера. СПб.: БХВ-Петербург, 2011. 522 с.
- [252] OLDROYD J.G. On the formulation of rheological equations of state // Proc. of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. 1950. Vol. 200. No. 1063. P. 523–541.
- [253] HRON J., MILOŠ V., PRŮŠA V., SOUŠEK O., TŮMA K. On thermodynamics of incompressible viscoelastic rate type fluids with temperature dependent material coefficients // Int. J. of Non-Linear Mech. 2017. Vol. 95. P. 193–208.
- [254] MALEK J., RAJAGOPAL K.R., TŮMA K. On a variant of the Maxwell and Oldroyd-B models within the context of a thermodynamic basis // Int. J. of Non-Linear Mech. 2015. Vol. 76. P. 42–47.
- [255] PESHKOV I., PAVELKA M., ROMENSKI E., GRMELA M. Continuum mechanics and thermodynamics in the Hamilton and the Godunov-type formulations // Contin. Mech. Thermodyn. 2018. Vol. 30. No. 6. P. 1343–1378.
- [256] SEMENKO R.E. Stabilization of the flat Poiseuille-type flow for viscoelastic polymeric liquid // Phys. of Fluids. 2023. Vol. 35. No. 3. Art. #033112.

- [257] SCHMIDT 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.
- [258] HERTEL D., VALETTE R., MÜNSTEDT H. Three-dimensional entrance flow of a low-density polyethylene (LDPE) and a linear low-density polyethylene (LLDPE) into a slit die // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 2008. Vol. 153. P. 82–94.
- [259] КАЛАШНИКОВ С. Г. Электричество. М.: Наука, 1964, 624 с.
- [260] КУБО Р. Термодинамика. М.: Изд-во «Мир», 1970. 304 с.
- [261] LEE H.-H., CHOU K.-S., HUANG K.-C. Inkjet printing of nanosized silver colloids // *Nanotechnology*. 2005. Vol. 16. P. 2436–2441.
- [262] БЛОКХИН А.М., СЕМИСАЛОВ В.В. Numerical simulation of a stabilizing Poiseuille-type polymer fluid flow in the channel with elliptical cross-section // *J. of Phys.: Conf. Ser.* 2021. Vol. 2099. Art. #012014. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/2099/1/012014/pdf>
- [263] ГОЛОВИЧЕВА И.Е., ЗИНОВИЧ С. А., ПЫШНОГРАЙ Г.В. Effect of the molecular mass on the shear and longitudinal viscosity of linear polymers // *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* 2000. Vol. 41. No. 2. P. 347–352.
- [264] AVILA K., MOXEY D., DE LOZAR A., AVILA M., BARKLEY D., HOF B. The Onset of Turbulence in Pipe Flow // *Science*. 2011. Vol. 333. P. 192–196.
- [265] CHOUERI G.H, LOPEZ J.M., VARSHNEY A., SANKAR S., HOF B. Experimental observation of the origin and structure of elasto-inertial turbulence // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 2021. Vol. 118. No. 45 Art. #e2102350118.
- [266] БЛОКХИН А. М., КРУГЛОВА Е.А., СЕМИСАЛОВ В. В. Modelling of polymeric fluid flow taking into account the electromagnetic impacts and the heat dissipation // *WSEAS TRANSACTIONS on SYSTEMS and CONTROL*. 2019. Vol. 14. Art. #21. P. 169–182. <http://www.wseas.org/multimedia/journals/control/2019/a425103-855.pdf>
- [267] ГОРНОВ А. Ю. Вычислительные технологии решения задач оптимального управления. Новосибирск: Наука, 2009. 279 с.
- [268] ТАНАКА М., YOKOYAMA N. Numerical verification of the random-phase-and-amplitude formalism of weak turbulence // *Phys. Rev. E*. 2013. Vol. 87. No. 6. Art. #062922.
- [269] CHOI Y., JO S., KWON Y.-S., NAZARENKO S.V. Nonstationary distributions of wave intensities in wave turbulence // *J. of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2017. Vol. 50. No. 35. Art. #355502.

- [270] ZAKHAROV V.E., KOROTKEVICH A.O., PUSHKAREV A., RESIO D. Coexistence of weak and strong wave turbulence in a swell propagation // *Phys. Rev. Lett.* 2007. Vol. 99. No. 16. Art. #164501.
- [271] KOROTKEVICH A.O., PUSHKAREV A., RESIO D., ZAKHAROV V.E. Numerical verification of the weak turbulent model for swell evolution // *Europ. J. of Mech.-B/Fluids.* 2008. Vol. 27. No. 4. P. 361–387.
- [272] KOROTKEVICH A.O., PROKOFIEV A.O., ZAKHAROV V.E. On the dissipation rate of ocean waves due to white capping // *JETP LETTERS.* 2019. Vol. 109. No. 5. P. 309–315.
- [273] L'VOV YU.V., NAZARENKO S.V. Noisy spectra, long correlations, and intermittency in wave turbulence // *Phys. Rev. E.* 2004. Vol. 69. No. 6. Art. #066608.
- [274] KRSTULOVIC G. A theoretical description of vortex dynamics in superfluids. Kelvin waves, reconnections and particle-vortex interaction. Habilitation à diriger des recherches. Université Côte d'Azur, 2020. <https://gkrstulovic.gitlab.io/thesisms/hdr-krstulovic/>
- [275] COX S.M., MATTHEWS P.C. Exponential time differencing for stiff systems // *J. of Comp. Phys.* 2002. Vol. 176. No. 2. P. 430–455.
- [276] CONNAUGHTON C., NAZARENKO S.V., PUSHKAREV A.N. Discreteness and quairesonances in weak turbulence of capillary waves // *Phys. Rev. E.* 2001. Vol. 63. No. 4. Art. #046306.
- [277] ZAKHAROV V.E., KOROTKEVICH A.O., PUSHKAREV A.N., DYACHENKO A.I. Mesoscopic wave turbulence // *JETP LETTERS.* 2005. Vol. 82. No. 8. P. 544–548.
- [278] L'VOV YU.V., NAZARENKO S.V., POKORNI B. Discreteness and its effect on water-wave turbulence // *Physica D: Nonlinear Phenomena.* 2006. Vol. 218. No. 1. P. 24–35.
- [279] DYACHENKO A.I., KOROTKEVICH A.O., ZAKHAROV V.E. Decay of the monochromatic capillary wave // *JETP LETTERS.* 2003. Vol. 77. No. 9. P. 477–481.
- [280] ANNENKOV S.YU., SHRIRA V.I. Role of non-resonant interactions in the evolution of nonlinear random water wave fields // *J. of Fluid Mech.* 2006. Vol. 561. P. 181–207.
- [281] L'VOV YU.V., NAZARENKO S.V. Discrete and mesoscopic regimes of finite-size wave turbulence // *Phys.Rev. E.* 2005. Vol. 82. No. 5. Art. #056322.
- [282] SHUKLA V., NAZARENKO S.V. Non-equilibrium Bose–Einstein condensation // *Phys. Rev. A.* 2022. Vol. 105. No. 3. Art. #033305.
- [283] FALKOVICH G. Bottleneck phenomenon in developed turbulence // *Physics of Fluids.* 1994. Vol. 6. No. 4. P. 1411–1414.



- [284] BORUE V., ORSZAG S.A. Self-similar decay of three-dimensional homogeneous turbulence with hyperviscosity // *Phys. Rev. E*. 1995. Vol. 51. No. 2. Art. #R856(R).
- [285] CICHOWLAS C., BONATTI P., DEBBASCH F., BRACHET M. Effective dissipation and turbulence in spectrally truncated Euler flows // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 95. No. 26. Art. #264502.
- [286] KRSTULOVIC G., BRACHET M. Dispersive bottleneck delaying thermalization of turbulent Bose–Einstein condensates // *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 106. No. 11. Art. #115303.
- [287] GALTIER S., NAZARENKO S.V. Turbulence of weak gravitational waves in the early universe // *Phys. Rev. Lett.* 2017. Vol. 119. No. 22. Art. #221101.
- [288] L'VOV YU.V., NAZARENKO S.V. Weak turbulence of Kelvin waves in superfluid He // *Low Temperature Physics*. 2010. Vol. 36. No. 8. P. 785–791.
- [289] CAILLOL P., ZEITLIN V. Kinetic equations and stationary energy spectra of weakly nonlinear internal gravity waves // *Dynamics of Atmospheres and Oceans*. 2000. Vol. 32. No. 2. P. 81–112.
- [290] GALTIER S. Weak inertial-wave turbulence theory // *Phys. Rev. E*. 2003. Vol. 68. No. 1. Art. #015301(R).
- [291] PROMENT D., NAZARENKO S.V., ONORATO M. Quantum turbulence cascades in the Gross–Pitaevskii model // *Phys. Rev. A*. 2009. Vol. 80. No. 5. Art. #051603.
- [292] PROMENT D., NAZARENKO S.V., ONORATO M. Sustained turbulence in the three-dimensional Gross–Pitaevskii model // *Physica D*. 2012. Vol. 241. No. 3. P. 304–314.
- [293] ZEL'DOVICH YA.B., RAIZER YU.P. *Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena*. New York: Acad. Press. 1967. Vol. 2. 916 p.
- [294] BELL N.K., NAZARENKO S.V. Reflected wave solution of Alfvén wave turbulence // *J. of Phys. A: Mathematical and Theoretical*. 2018. Vol. 51. No. 40. Art. #405501.
- [295] NAZARENKO S.V., GREBENEV V., MEDVEDEV S., GALTIER S. The focusing problem for the Leith model of turbulence: a self-similar solution of the third kind // *J. of Phys. A: Mathematical and Theoretical*. 2019. Vol. 52. No. 15. Art. #155501.
- [296] SEMIKOZ D. V., TKACHEV I. I. Condensation of bosons in the kinetic regime // *Phys. Rev. D*. 1997. Vol. 55. No. 2. Art. #489.
- [297] DÜRING G., PICOZZI A., RICA S. Breakdown of weak-turbulence and nonlinear wave condensation // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2009. Vol. 238. No. 16. P. 1524–1549.

- [298] BERLOFF N.G., SVISTUNOV B.V. Scenario of strongly nonequibrated Bose–Einstein condensation // *Phys. Rev. A*. 2002. Vol. 66. No. 1. Art. #013603.
- [299] MADEIRA L., GARCIA-OROZCO A.D., MORENO-ARMIJOS M.A., FRITSCH A.R., BAGNATO V.S. A differential approach to investigate universal scaling in far-from-equilibrium quantum systems // *PNAS*. 2024. Vol. 121 (30). Art. #e2404828121.
- [300] CONNAUGHTON C., NAZARENKO S.V. Warm cascades and anomalous scaling in a diffusion model of turbulence // *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 92. No. 4. Art. #044501.
- [301] CONNAUGHTON C., NEWELL A.C., POMEAU Y. Non-stationary spectra of local wave turbulence // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2003. Vol. 184. No. 1-4. P. 64–85.
- [302] GREBENEV V.N., NAZARENKO S.V., MEDVEDEV S.B., SCHWAB I.V., CHIRKUNOV YU.A. Self-similar solution in the Leith model of turbulence: anomalous power law and asymptotic analysis // *J. of Phys. A: Mathematical and Theoretical*. 2013. Vol. 47. No. 2. Art. #025501.
- [303] THALABARD S., NAZARENKO S.V., GALTIER S., MEDVEDEV S.B. Anomalous spectral laws in differential models of turbulence // *J. of Phys. A: Mathematical and Theoretical*. 2015. Vol. 48. No. 28. Art. #285501.
- [304] GALTIER S., NAZARENKO S.V., BUCHLIN È., THALABARD S. Nonlinear diffusion models for gravitational wave turbulence // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2019. Vol. 390. P. 84–88.
- [305] BELL N.K., GREBENEV V.N., MEDVEDEV S.B., NAZARENKO S.V. Self-similar evolution of Alfvén wave turbulence // *J. of Phys. A: Mathematical and Theoretical*. 2017. Vol. 50. No. 43. Art. #435501.
- [306] LE ROUX CH. Existence and uniqueness of the flow of second-grade fluids with slip boundary conditions // *Arch. Rational Mech. Anal.* 1999. Vol. 148. P. 309–356.
- [307] DUSSAN V. E.B., DAVIS S.H. On the motion of a fluid-fluid interface along a solid surface // *J. of Fluid Mech.* Vol. 65. Is. 1. P. 71–95.
- [308] ПУХНАЧЕВ В.В., СОЛОННИКОВ В.А. К вопросу о динамическом краевом угле // *Прикладная мат. и мех.* 1982. Т. 46, вып. 6. С. 961–971.
- [309] БАХВАЛОВ Н. С., ЖИДКОВ Н. П., КОБЕЛЬКОВ Г. М. Численные методы. 6-е изд. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. 636 с.
- [310] LUBINSKY D.S., RABINOWITZ P. Rates of convergence of Gaussian quadrature for singular integrands // *Math. of Comp.* 1984. Vol. 43. No. 167. P. 219–242.

- [311] ТАКАНАСИ Н., МОРИ М. Double exponential formulas for numerical integration // PM. RIMS. Kyoto Univ. 1974. Vol. 9. P. 721–741.
- [312] МАРШАК А.Л. Асимптотическое представление весов квадратурной формулы Гаусса // Мат. заметки. 1990. Т. 47, вып. 4. С. 63–68.
- [313] АHN B. Y., WALKER S. B., SLIMMER S. C. ET AL. Planar and three-dimensional printing of conductive inks // J. of Visualized Exp. 2011. Vol. 58. Art. #3189.
- [314] HOATH S. D., HSIAO W.-K., MARTIN G. D. ET AL. Oscillations of aqueous PEDOT:PSS fluid droplets and the properties of complex fluids in drop-on-demand inkjet printing // J. of Non-Newtonian Fluid Mech. 2015. Vol. 223. P. 28–36.
- [315] КАНОЛ P. K., HO J. CH., CHEN Y. SH. ET AL. On metallic characteristics in some conducting polymers // Synthetic Metals. 2005. Vol. 151. Is. 2. P. 65–72.
- [316] LE TH.-H., KIM Y., YOON H. Electrical and electrochemical properties of conducting polymers // Polymers. 2017. Vol. 9. Is. 4. Art. #150.
- [317] MURO K., WATANABE M., TAMAI T., YAZAWA K., MATSUKAWA K. PEDOT/PSS nano-particles: synthesis and properties // RSC Adv. 2016. Vol. 6. Is. 90. P. 87147–87152.
- [318] YOON D. G., KANG M. G., KIM J. B., KANG K.-T. Nozzle printed-PEDOT:PSS for organic light emitting diodes with various dilution rates of ethanol // Appl. Sci. 2018. Vol. 8. Is. 2. Art. #203.
- [319] PΑΡΑΘΑΝΑSSIOU A. N., SAKELLIS I., GRAMMATIKAKIS J., VITORATOS E., SAKKOPOULOS S. Exploring electrical conductivity within mesoscopic phases of semiconducting PEDOT: PSS films by broadband dielectric spectroscopy // Appl. Phys. Lett. 2013. Vol. 103. Art. #123304.
- [320] LIU J., WANG X., LI D. ET AL. Thermal conductivity and elastic constants of PEDOT:PSS with high electrical conductivity // Macromolecules. 2015. Vol. 48. Is. 3. P. 585–591.
- [321] KHAN N. Z. Modeling and simulation of organic MEM relay for estimating the coefficient of thermal expansion of PEDOT: PSS // TechConnect Briefs. 2017. Vol. 4. P. 120–123.

# Приложение I

## Определения и теоремы, используемые в диссертации

Пусть далее  $\|\cdot\|_p$  –  $L_p$ -норма на отрезке  $D = [a, b] \subset \mathbb{R}$  или на окружности  $S$  (в зависимости от контекста),  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_\infty$ . Будем рассматривать функции из классов  $C^r(D)$ ,  $\tilde{C}^r$ ,  $W_p^r(M, D)$  и  $\mathcal{W}_p^r(M)$ .

### § I.1. Прямые теоремы теории приближений

**Определение I.1.** *Аппроксимирующее пространство  $L_N$  размерности  $N$  – линейное пространство, элементы которого приближают функцию  $u \in C(D)$ . Компактное подмножество  $K_N \subset L_N$  размерности  $N$  будем называть аппроксимирующим компактом.*

**Определение I.2.** *Пусть  $P_N : C(D) \rightarrow K_N$  ( $P_N : W_p^r(M, D) \rightarrow K_N$ ) – непрерывное отображение;  $N$ -точечным приближением функции  $u \in C(D)$  ( $u \in W_p^r(M, D)$ ) будем называть приближение  $u(x)$  элементом  $P_N(u)$   $N$ -мерного компакта  $K_N$ . При этом  $P_N$  – оператор (метод)  $N$ -точечного приближения.*

**Определение I.3.** *Наилучшее приближение функции  $u(x)$  на компакте  $K_N$  – это элемент  $P_N^b(u) \in K_N$ , на котором достигается нижняя грань  $E_N^b(u) = \inf \|u - g\|_p$  по всем  $g \in K_N$  в норме  $L_p$ ,  $1 \leq p \leq \infty$ . Отметим, что в силу конечномерности  $K_N$  нижняя грань здесь достигается всегда.*

**Теорема I.1 Неравенство Джексона [122].** *Для фиксированного  $r$ ,  $2\pi$ -периодической функции  $u(t) \in \tilde{C}^r(S)$  и любого  $N \in \mathbb{N}$ :  $N \geq r$  существует тригонометрический полином  $\mathfrak{T}_N(t)$  такой, что*

$$|u(t) - \mathfrak{T}_N(t)| \leq 12^{r+1} \frac{1}{N^r} \omega\left(u^{(r)}; \frac{1}{N}\right), \quad (I.1)$$

где  $\omega(u; q) = \sup_{t \in [0, 2\pi-h], h \in [0, q]} |u(t+h) - u(t)|$  – первый модуль непрерывности  $f(t)$ .

**Следствие I.1 Наилучшее приближение функций по классу [6, 123].** *Пусть  $u(x) \in W_p^r(M, D)$  задана на отрезке и  $u^{(r-1)} \in H_M^{\tilde{\alpha}}$ , тогда имеют место неулучшаемые оценки для наилучшего приближения  $E_N^b(u)$ :*

$$E_N^b(u) \leq M \tilde{C}_r \frac{1}{N^{r+\tilde{\alpha}}}, \quad \sup_{u \in W_p^r(M, D): u^{(r-1)} \in H_M^{\tilde{\alpha}}} E_N^b(u) \leq M C_r \frac{1}{N^{r+\tilde{\alpha}}}. \quad (I.2)$$

**Теорема I.2 о приближении функции нескольких переменных [6, гл. 3, § 1, п. 7].** Пусть  $D \subset \mathbb{R}^d$ ,  $\mathbf{x} \in D$ ,  $\mathbf{M} = (M_1, \dots, M_d)$ ,  $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_d)$ ;  $u(\mathbf{x}) \in \mathbf{W}_p^{\mathbf{r}}(\mathbf{M}, D) := \text{Cl}\{f \in C^{(r_i-1)}(D) : \|D_i^{(r_i)} f\|_p \leq M_i\}$ ,  $i = \overline{1, d}$ , тогда существует многочлен  $\mathcal{P}$  степени не выше  $N_j$  по переменной  $x_j$ , что

$$\|u - \mathcal{P}(u)\| \leq K_{\mathbf{r}} \sum_{j=1}^d M_j n_j^{-r_j} \sim (\max_j n_j)^{-r_j},$$

$K_{\mathbf{r}}$  – величина, зависящая только от  $\mathbf{r}$ .

**Теорема I.3 о приближении аналитических функций [125].** Пусть  $\mathfrak{M}$  – ограниченное множество со связным дополнением в  $\mathbb{C}$ , тогда если функция  $u(z)$  ( $z \in \mathfrak{M}$ ) аналитична в области  $\mathfrak{M}_1 \subset \mathfrak{M}$  вплоть до границы  $\Gamma = \partial\mathfrak{M}_1$ , то существуют число  $q$  ( $0 < q < 1$ ) и последовательность полиномов  $P_N(z)$ , обеспечивающая экспоненциальную сходимость:

$$\forall z \in \mathfrak{M}_1 \quad |u(z) - P_N(z)| \leq A_f C q^N, \quad A_f = \max_{z \in \partial\mathfrak{M}_1} |u(z)|, \quad C = \text{const}. \quad (\text{I.3})$$

Частный случай теоремы – сходимость приближений Фурье–Чебышёва (I.7) в эллипсе Бернштейна  $\mathfrak{E}_\rho$ . При этом  $\mathfrak{M}_1 = [-1, 1] \subset \mathbb{R}$ ,  $\mathfrak{M} = \mathfrak{E}_\rho$  – эллипс в  $\mathbb{C}$  с фокусами в точках  $\pm 1$  и суммой полуосей  $\rho = 1/q$ .

**Теорема I.4 о приближении целых функций [309].** Пусть  $u(x)$  аналитична во всей  $\mathbb{C}$ , и  $M(N)$  – набор чисел, таких что  $\forall x \in [a, b] \subset \mathbb{R} \quad |u^{(N)}(x)| \leq M(N)$ . Тогда

$$E_N^b(u, K_N) \leq \frac{M(N)(b-a)^N 2^{1-2N}}{N!} = \frac{M(N)q^N}{N!}, \quad \text{где } \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M(N)}{N!} = 0. \quad (\text{I.4})$$

Правая часть оценки (I.4) получена для интерполяционного полинома с узлами Чебышёва.

## § I.2. Обратные теоремы теории приближений

**Теорема I.5 для периодических функций [123, гл. V, § 5].** Для того чтобы при некотором  $r \in \mathbb{N}$  и  $0 < \tilde{\alpha} \leq 1$  для  $2\pi$ -периодической функции имели место включения  $u(x) \in \tilde{C}^{r-1}$  и  $u^{(r)} \in H_M^{\tilde{\alpha}}$ , где  $H^{\tilde{\alpha}}$  – класс Гёльдера, необходимо и достаточно, чтобы при каждом  $N \in \mathbb{N}$  нашлись тригонометрический полином  $T_N(t)$  и число  $A = A(r, \tilde{\alpha})$  такие, что  $\forall t \in [0, 2\pi]$

$$|u(t) - T_N(t)| \leq \frac{A}{N^{r+\tilde{\alpha}}}.$$

**Теорема I.6 для функций на отрезке  $D = [a, b]$  [127].** Для того чтобы при некотором  $r \in \mathbb{N}$  и  $0 < \tilde{\alpha} \leq 1$  имели место включения  $u(x) \in C^{r-1}(D)$  и  $u^{(r)} \in H_M^{\tilde{\alpha}}$ , где  $H_M^{\tilde{\alpha}}$  – класс Гёльдера, необходимо и достаточно, чтобы при каждом  $N \geq r$  нашлись алгебраический многочлен  $P_N(x)$  и число  $A = A(r, \tilde{\alpha})$  такие, что  $\forall x \in D$

$$|u(x) - P_N(x)| \leq A(\rho_N(x))^{r+\tilde{\alpha}}, \quad \text{где } \rho_N(x) = \frac{\sqrt{(b-x)(x-a)}}{N} + \frac{1}{N^2}.$$

**Теорема I.7 для аналитических функций [125].** Пусть для функции  $u \in C[a, b]$  существует последовательность полиномов  $P_N(x)$ , удовлетворяющих оценке

$$\|u(x) - P_N(x)\| \leq C\rho^{-N},$$

для некоторых констант  $\rho > 1$  и  $C > 0$ . Тогда функция  $u(x)$  является аналитической и имеет аналитическое продолжение в эллипс Бернштейна  $\mathfrak{E}_\rho$ .

### § I.3. Константы Лебега

**Определение I.4.** Константа Лебега  $\Lambda_N = \sup_{u \in C[a, b], u \neq 0} \frac{\|P_N(u)\|}{\|u\|}$  – норма оператора  $N$ -точечного приближения  $P_N$ .

Константа Лебега определяет точность и устойчивость приближения:

$$\|u - P_N(u)\| \leq (1 + \Lambda_N)E_N^b(u), \quad u \in C(D), \quad (I.5)$$

$$\|u - P_N(u + u_\delta)\| \leq (1 + \Lambda_N)E_N^b(u) + \Lambda_N\delta. \quad (I.6)$$

Здесь  $u_\delta$  – возмущение  $u(x)$ ,  $\|u_\delta\| \leq \delta\|u\|$ ,  $\delta$  – малая величина.

**Теорема I.8 [123, гл. II, § 3].** Пусть  $S_N(u)$  – приближение функции  $u(t)$   $N$ -й частичной суммой ряда Фурье. Константа Лебега приближения  $S_N(u)$  растёт логарифмически с ростом  $N$ :

$$\Lambda_N = \frac{4}{\pi} \ln N + R_N, \quad R_N < 3.$$

**Следствие I.2** (неравенство Колмогорова). Из теоремы I.8 и неравенства (I.5) для приближения функции  $u(t)$   $N$ -й частичной суммой ряда Фурье  $S_N(u)$  имеем (см. также [190, комментарий к теореме 10]; [6, гл. 3, § 1, задачи к п. 9]):

$$\|u - S_N(u)\| \leq \left(5 + \frac{4}{\pi^2} \ln N\right) E_N^b(u),$$

тогда по теореме I.1 для случая  $r = 0$  получаем что  $\|u - S_N(u)\| \rightarrow 0$  тогда и только тогда, когда  $\omega(u; \frac{1}{N}) = o(1/\ln N)$ , т. е.  $u(x)$  удовлетворяет условию Дини–Липшица.

**Теорема I.9 [191].** Константа Лебега интерполяционного полинома с узлами Чебышёва имеет логарифмическую скорость роста:

$$\Lambda_N = \frac{2}{\pi} \ln N + 1 - \theta_N, \quad 0 < \theta_N < \frac{1}{4}.$$

**Теорема I.10 [6, гл. 3, § 5].** Пусть  $\Omega$  –  $d$ -мерная область канонической формы, в которой возможно построение интерполяционного полинома для функции  $u(x^1, \dots, x^d) \in C(\Omega)$  в виде прямого (тензорного) произведения  $d$  одномерных интерполяционных полиномов  $P_{N_k}(x^k)$ ,  $k = \overline{1, d}$ , с константами Лебега  $\lambda_{N_k}$ . Тогда константа Лебега такого приближения выражается так:  $\Lambda_N = \prod_{k=1}^d \lambda_{N_k}$ .

## § I.4. Методы без насыщения

**Определение I.5.** *Методом приближения будем называть набор  $P = \{P_N, N = 1, 2, \dots\}$ .*

**Определение I.6.** *Диаметр прообраза  $P_N(u)$ :  $d(u, P_N) = \text{diam}[P_N^{-1} \circ P_N(u)] = \text{diam}[P_N^{-1}(\xi)] = \sup_{g, h \in P_N^{-1}(\xi)} \|g - h\|$ .*

**Определение I.7.** *Точность приближения элементов класса  $X = W_p^r(M, D)$  с помощью  $P_N$ :  $E(P_N, K_N) = \sup_{u \in X} d(u, P_N)$ .*

**Определение I.8.** *Поперечник Колмогорова  $\bar{\kappa}_N(X, C(D)) := \inf_{K_N} \sup_{u \in X} E_N^b(u)$ .*

**Определение I.9.** *Поперечник Александра –*

$$\bar{\alpha}_N(X, C(D)) := \inf_{K_m, P_m, m \leq N} E(P_N, K_N).$$

Функция  $n_{\bar{\alpha}}(\epsilon) = \inf\{k : \bar{\alpha}_k \leq \epsilon\}$  определяет аппроксимационные свойства наилучшего приближения при  $\epsilon \rightarrow \infty$ . Рассмотрим вложения  $W_p^r(M, D) \subset W_p^{r-1}(M, D) \subset \dots \subset W_p^1(M, D)$ . Построим для заданного  $r$  метод приближения

$P^r = \{P_N^r, N = 1, 2, \dots\}$  и рассмотрим множество  $\mathcal{P} = \{P^r, r = 1, 2, \dots\} = \{P_N^r, N, r = 1, 2, \dots\}$ .

В соответствии с (I.2)  $\forall \rho < r$  имеем

$$\bar{\alpha}_m(W_p^r(M, D), C(D)) = o(\bar{\alpha}_m(W_p^\rho(M, D), C(D))), \text{ при } m \rightarrow \infty.$$

Пусть  $d_N^r(u)$  – диаметры прообразов  $P_N^r(u)$  и  $\delta(N, r)$  – такой набор чисел, что  $\exists C : \forall N, r$  и  $u \in W_p^r(M, D)$   $d_N^r(u) \leq C\delta(N, r)$ . Положим

$$X_0^r = \{u \in C(D) : d_N^r(u) = o(\delta(N, r)) \text{ при } N \rightarrow \infty\}.$$

**Определение I.10 насыщения по К.И. Бабенко [6, с. 208–210].** *Метод приближения  $\mathcal{P}$  имеет насыщение, если  $\exists \rho : \forall r > \rho \exists u \in W_p^r(M, D) \setminus X_0^\rho$ . В таком случае  $W_p^r(M, D)$  называется классом насыщения,  $\delta(N, \rho)$  – погрешностью насыщения.*

Пусть  $B$  – нормированное пространство,  $(\mathfrak{R}, <)$  – линейно упорядоченное множество, элементы которого  $r \in \mathfrak{R}$  называются (абстрактной) гладкостью,  $N \in \mathbb{N}$  – параметр дискретизации (число узлов, размерность аппроксимирующего пространства и т. п.). Пусть для любого  $r \in \mathfrak{R}$  задано подмножество  $W^r \subseteq B$ , называемое классом, а для каждого достаточно большого  $N$  задан функционал погрешности  $\delta_N : B \rightarrow [0, \infty]$ . Введём также обозначение погрешностей на классах  $W^r$ :  $\delta_N W^r = \sup_{x \in W^r} \delta_N(x)$ , причём  $\forall N, r$   $\delta_N W^r > 0$ .

**Определение I.11 насыщения по О. В. Локуциевскому [11, § 15].** Последовательность функционалов  $\delta_N$  имеет насыщение на классах  $W^r$ , если существует  $r_0 \in \mathfrak{A}$ , для которого выполнены условия

- 1)  $\lim_{N \rightarrow \infty} \delta_N W^r = 0$  при любом  $r \leq r_0$ ,
- 2)  $\forall r < s \leq r_0$  имеем  $\delta_N W^s = o(\delta_N W^r)$ , при  $r \rightarrow \infty$ ,
- 3)  $\forall r_0 < r \exists x \in W^r$  и константа  $C > 0$ , для которых при всех достаточно больших  $N$  справедливо

$$\delta_N(x) \geq C \delta_N W^{r_0}, \text{ т. е. } \delta_N W^{r_0} = O(\delta_N(x)).$$

Принципиальное отличие определения по К. И. Бабенко от определения по О. В. Локуциевскому состоит в том, что в рамках последнего для анализа явления насыщения от конструкции численного алгоритма требуется только его погрешность, а от погрешности – только соблюдение условий 1)–3).

**Теорема I.11 [190, теорема 9].** Пусть  $p_N(u)$  – приближение функции  $u \in W^r = W_\infty^r(M, [a, b])$  интерполяционным полиномом с узлами в нулях многочлена Чебышёва степени  $N$ ,  $\delta_N(u) = E_N^T(u) = \|p_N(u) - u\|$ , тогда для достаточно больших  $N$  и  $r \geq 1$  существуют  $C_r > 0$  и  $B_r = \left(9 + \frac{4}{\pi}\right) \left(\frac{\pi r}{2}\right)^r \frac{1}{r!}$ , не зависящие от  $N$ , такие что

$$C_r \left(\frac{b-a}{2}\right)^r \frac{M}{N^r} \leq \delta_N W^r \leq B_r \left(\frac{b-a}{2}\right)^r M \frac{\ln N}{N^r},$$

т. е. метод приближения  $p_N(u)$  не имеет насыщения.

**Теорема I.12 [190, теорема 10].** Пусть  $S_N(u)$  – приближение функции  $u \in W^r = W_p^r(M)$   $N$ -й частичной суммой ряда Фурье,  $\delta_N(u) = \|S_N(u) - u\|$ , тогда для  $N \rightarrow \infty$  и  $r \geq 1$

$$\delta_N W^r \sim \frac{4M \ln N}{\pi^2 N^r},$$

т. е. метод приближения  $S_N(u)$  не имеет насыщения.

## § I.5. Оценки погрешности некоторых приближений

**Теорема I.13 [6, гл. 3, § 3, п. 6, теорема 5].** При использовании для приближения функции  $u \in W_\infty^N(M, [a, b])$  интерполяционного полинома  $p_N(x)$  степени не выше  $N - 1$  с узлами Чебышёва  $x_1, \dots, x_N$  погрешность приближения производных  $s$ -го порядка ( $s < N$ ) имеет следующую оценку:

$$|u^{(s)}(x) - p^{(s)}(x)| \leq \frac{M(b-a)^{N-s}}{(N-s)!} + \left(\frac{2}{b-a}\right)^s \Lambda_{Ns} \delta,$$

где  $\Lambda_{Ns} = \frac{(N-1)^2((N-1)^2-1)\dots((N-1)^2-(s-1)^2)}{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2s-1)} \sim N^{2s}$ , число  $\delta = \max_{i=1, N} |p(x_i) - u(x_i)|$  может рассматриваться, как погрешность округления действительных чисел в памяти ЭВМ.



Пусть  $u(x)$  – функция, непрерывная по Липшицу на отрезке  $[-1, 1]$ . Приближение  $u(x)$  частичной суммой Фурье–Чебышёва  $\pi_N(u)$ :

$$u(x) \approx \pi_N(u) = \pi_N(u, x) = \sum_{k=0}^N a_k T_k(x), \quad a_k = c_k \int_{-1}^1 \frac{u(x) T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx, \quad (I.7)$$

где  $c_0 = 1/\pi$ ,  $c_k = 2/\pi$  при  $k = \overline{1, N}$ . Пусть, кроме того,  $p_N(x)$  – интерполяционный полином для функции  $u(x)$  с узлами в нулях многочлена  $T_N(x)$ .

**Теорема I.14 [18, ch. 4].** *Имеют место равенства:*

$$u(x) - \pi_N(x) = \sum_{k=N+1}^{\infty} a_k T_k(x), \quad u(x) - p_N(x) = \sum_{k=N+1}^{\infty} a_k (T_k(x) - T_m(x)),$$

где  $m = m(k, N) = |(k + N - 1)(\text{mod } 2N) - (N - 1)|$ , «mod  $2N$ » – деление по модулю  $2N$ .

**Следствие I.3.**  $\|u(x) - p_N(x)\| \leq 2\|u(x) - \pi_N(x)\|$ .

**Определение I.12.** *Полной вариацией функции  $u(x)$  на отрезке  $[-1, 1]$  будем называть  $L_1$ -норму первой производной  $u'(x)$  и обозначать символом  $V$ . При необходимости производная понимается в обобщённом смысле.*

**Теорема I.15 [18, ch. 7].** *Пусть все производные функции  $u(x)$  на отрезке  $[-1, 1]$  вплоть до порядка  $\nu - 1$  ( $\nu \geq 1$ ) непрерывны, а производная  $u^\nu$  имеет полную вариацию  $V$ . Тогда при  $N > \nu$*

$$|a_k| \leq \frac{2V}{\pi k(k-1)\dots(k-\nu)},$$

$$\|u(x) - \pi_N(x)\| \leq \frac{2V}{\pi \nu (N-\nu)^\nu}, \quad \|u(x) - p_N(x)\| \leq \frac{4V}{\pi \nu (N-\nu)^\nu}.$$

**Теорема I.16 [18, ch. 8].** *Пусть функция  $u(x) \in C^\infty[-1, 1]$  имеет аналитическое продолжение с отрезка  $[-1, 1]$  в эллипс Бернштейна  $\mathfrak{E}_\rho$  с суммой полюсов  $\rho$  ( $\rho > 1$ ), и внутри  $\mathfrak{E}_\rho$   $\|u(x)\| \leq M$  для некоторой константы  $M > 0$ . Тогда*

$$|a_k| \leq 2M\rho^{-k}, \quad \|u(x) - \pi_N(x)\| \leq \frac{2M\rho^{-N}}{\rho-1}, \quad \|u(x) - p_N(x)\| \leq \frac{4M\rho^{-N}}{\rho-1}.$$

**Определение I.13.** *Квадратурную формулу*

$$I^1 = \int_{-1}^1 u(x) dx \approx I_n^1 = \int_{-1}^1 \sum_{k=0}^n a_k T_k(x) dx = \sum_{k=0, k \text{ нечётное}}^n \frac{2a_k}{1-k^2} \quad (I.8)$$

*будем называть формулой Clenshaw–Curtis.*

**Теорема I.17 [18, ch. 19].** *Пусть функция  $u(x) \in C^\infty[-1, 1]$  имеет аналитическое продолжение с отрезка  $[-1, 1]$  в эллипс Бернштейна  $\mathfrak{E}_\rho$  с суммой полюсов  $\rho$  ( $\rho > 1$ ), и внутри  $\mathfrak{E}_\rho$   $\|u(x)\| \leq M$  для некоторой константы  $M > 0$ . Тогда*

$$|I^1 - I_n^1| \leq \frac{64 M \rho^{1-n}}{15 \rho^2 - 1}.$$

## § I.6. Оценки погрешности некоторых методов интегрирования

Рассмотрим задачу поиска интеграла

$$I^h = I^h(u) = \int_{-1}^1 h(x)u(x)dx, \quad (\text{I.9})$$

где  $h(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$ ,  $\alpha > -1$ ,  $\beta > -1$  – действительные числа,  $u \in C[-1, 1]$ . Для приближённого вычисления (I.9) используем квадратурную формулу Гаусса–Якоби,  $I_n^\gamma = I_n^\gamma(u)$ , с узлами в нулях полиномов Якоби степени  $n$ , ортогональных с весом  $\gamma(x) = h(x)$  [203, с. 2.7]. Рассмотрим функционал погрешности  $I_n^\gamma: E_n^\gamma(u) = I^\gamma - I_n^\gamma$ . Для  $E_n^\gamma(u)$  имеется следующее представление.

**Теорема I.18 [203, р. 98].** Пусть  $u(x) \in C^{2n}[-1, 1]$ , тогда

$$E_n^\gamma(u) = \frac{2^{2n+\alpha+\beta+1}\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)\Gamma(n+\alpha+\beta+1)n!}{\Gamma(2n+\alpha+\beta+1)\Gamma(2n+\alpha+\beta+2)(2n)!} u^{(2n)}(\xi), \quad (\text{I.10})$$

где  $-1 < \xi < 1$  – некоторое число,  $\Gamma$  – гамма-функция Эйлера.

Отсюда видно, что если  $u \in C^\infty[-1, 1]$ , то  $|E_n^\gamma(u)| \sim Cn^\vartheta \frac{2^{2n}(n!)^4}{[(2n)!]^3} \|u^{(2n)}\|$  при  $n \rightarrow \infty$ , где  $C$  и  $\vartheta$  зависят только от  $\alpha$  и  $\beta$ ,  $\|\cdot\|$  – супремум норма функции. Таким образом, при условии достаточно медленного роста  $\|u^{(n)}\|$  убывание погрешности с ростом  $n$  является очень быстрым (факториальным).

Отметим, однако, что в случае ограниченной гладкости  $u(x)$  или при наличии у её аналитического продолжения особых точек в комплексной плоскости, величина  $\|u^{(n)}\|$  может не существовать либо расти быстрее, чем  $n!$ . В связи с этим целесообразно применять более общую оценку погрешности, основанную на теории наилучших полиномиальных приближений.

**Теорема I.19 [6, гл. 5, § 3, п. 3].** Имеет место оценка погрешности

$$|E_n^\gamma(u)| \leq 2E_{2n}^b(u) \int_{-1}^1 \gamma(x)dx, \quad (\text{I.11})$$

где  $E_n^b(u)$  – погрешность наилучшего приближения функции  $u(x)$  полиномом степени не выше  $n$ .

Скорость убывания величины  $E_n^b(u)$  строго связана со свойствами гладкости  $u(x)$ , см. § I.1 и оценки теорем I.15, I.16.

Важен также случай, когда для приближения (I.9) используется классическая формула Гаусса.

**Лемма I.1 [310, лемма 6.1].** Пусть интегранд (I.9),  $\psi(x) = h(x)u(x)$ , и все его производные до порядка  $2n$  существуют и непрерывны на интервале  $(-1, 1)$ , и  $\psi^{(j)}(x) \geq 0$  при  $x \in (-1, 1)$ ,  $j = \overline{0, 2n}$  (множество таких функций будем обозначать  $\mathcal{M}_{2n}^+(-1, 1)$ ). Для приближения интеграла (I.9) построим классическую квадратурную формулу Гаусса, КФГ,  $I_n^1$  (формулу (1.58) при  $\gamma(x) \equiv 1$ ) с узлами  $x_j^q$ , весами  $\omega_j^q$ ,  $j = \overline{1, n}$ , и обозначим  $E_n^1(\psi) = I^h(u) - I_n^1(\psi)$ . Тогда

$$\max \left\{ \int_{x_n^q}^1 \psi(x) dx - \omega_n^q \psi(x_n^q), 0 \right\} \leq E_n^1(\psi) \leq \int_{x_n^q}^1 \psi(x) dx. \quad (\text{I.12})$$

Если же  $\psi^{(j)}(x) \leq 0$  при  $x \in (-1, 1)$ ,  $j = \overline{0, 2n}$  (множество таких функций обозначено  $\mathcal{M}_{2n}^-(-1, 1)$ ), то

$$\max \left\{ \int_{-1}^{x_1^q} \psi(x) dx - \omega_1^q \psi(x_1^q), 0 \right\} \leq E_n^1(\psi) \leq \int_{-1}^{x_1^q} \psi(x) dx. \quad (\text{I.13})$$

**Теорема I.20 [152, § 3], погрешность двуэкспоненциальной квадратурной формулы на отрезке.** Пусть  $\varkappa(y) = \tanh \left[ A \sinh \frac{2By}{1-y^2} \right]$  – отображение отрезка  $[-1, 1]$  в себя, где  $A = \pi/2$ ,  $B = \pi/4$ , см. (1.66). В интеграле (I.9) положим  $h(x) = (1-x^2)^\alpha$ ,  $u(x) \equiv 1$  и сделаем замену переменной  $x = \varkappa(y)$ . Приближение полученного интеграла с помощью формулы трапеций на равномерной сетке из  $n$  узлов  $y_j^{\text{DE}} = -1 + (j-1)s$ ,  $s = \frac{2}{n+1}$ , лежащих на отрезке  $[-1, 1]$ ,  $j = \overline{1, n}$ , обозначим  $I_n^{\text{DE}}[h]$ . Асимптотика убывания погрешности  $I_n^{\text{DE}}[h]$  носит экспоненциальный характер:

$$E_n^{\text{DE}}[h] = |I^h[1] - I_n^{\text{DE}}[h]| \sim C_1 \exp \left( -C_2 \frac{n}{\log^2 n} \right), \quad \text{при } n \rightarrow \infty,$$

где  $C_1$  и  $C_2$  – положительные постоянные.

Рассмотрим задачу поиска интегралов на прямой и полупрямой:

$$I_{\mathbb{R}}(u) = \int_{-\infty}^{\infty} u(x) dx, \quad I_{\mathbb{R}}^+(u) = \int_0^{\infty} u(x) dx,$$

где  $u(x)$  является аналитической на  $\mathbb{R}$  или на  $\mathbb{R}^+$  соответственно. В интегралах  $I_{\mathbb{R}}(u)$  и  $I_{\mathbb{R}}^+(u)$  сделаем соответственно замены переменной

$$x = \varkappa(y) = \sinh\left(\frac{\pi}{2} \sinh y\right), \quad x = \varkappa(y) = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh y\right),$$

приводящие к задаче поиска интеграла

$$I^{\text{DE}}(u) = \int_{-\infty}^{\infty} u(y) \varkappa'(y) dy.$$

Используем для приближения интеграла  $I^{\text{DE}}$  формулу

$$I^{\text{DE}} \approx I_{N_t, s}^{\text{DE}} = \frac{\pi}{2} s \sum_{j=-N_t}^{N_t} u(\varkappa(js)) \varkappa'(js), \quad (\text{I.14})$$

где  $s$  – шаг равномерной сетки с узлами  $js$ ,  $j = \overline{-N_t, N_t}$ , построенной на отрезке  $[-N_t s, N_t s]$  по переменной  $y$ . Имеет место следующий результат:

**Теорема I.21 Такахаша–Мори [311], погрешность двуэкспоненциальной квадратурной формулы на прямой и полупрямой.** Пусть  $u(x)$  аналитична, тогда при  $s \rightarrow 0$ ,  $N_t \rightarrow \infty$ ,  $I^{\text{DE}} \approx I_{\infty, s}^{\text{DE}} \approx I_{N_t, s}^{\text{DE}}$ . Кроме того, если  $s \approx \log(4\theta N_t)/N_t$ , то

$$|I^{\text{DE}} - I_{\infty, s}^{\text{DE}}| \sim |I_{\infty, s}^{\text{DE}} - I_{N_t, s}^{\text{DE}}| \sim \exp\left\{-\frac{2\pi\theta}{\log(4\theta N_t)} N_t\right\}, \quad (\text{I.15})$$

где  $\theta > 0$  характеризует расстояние от ближайшей к  $\mathbb{R}$  особой точки  $u(x)$ , лежащей в  $\mathbb{C}$ , до действительной оси.

## Приложение II

# Доказательства лемм и теорем, сформулированных в диссертации

**Доказательство леммы 1.1.** Первое из выражений (1.31) является интерполяционным полиномом для функции  $u(x) \equiv 1$  в точке  $x = 1$ . Действительно,

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{1-x_j} = \sum_{j=1}^N \frac{T_N(x) \cdot 1}{T'_N(x_j^{\text{ch}})(x-x_j^{\text{ch}})} \Big|_{x=1} = 1. \quad (\text{II.1})$$

В силу равенства  $T_N(-1) = (-1)^N$ , аналогичная формула имеет место для первого из выражений (1.32):

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{1+x_j^{\text{ch}}} = \sum_{j=1}^N \frac{-(-1)^N T_N(x) \cdot 1}{T'_N(x_j^{\text{ch}})(x-x_j^{\text{ch}})} \Big|_{x=-1} = (-1)^{N+1}. \quad (\text{II.2})$$

Для того чтобы получить вторую из формул (1.31), необходимо продифференцировать (II.1), положить  $x = 1$  и учесть, что  $T'_N(1) = N^2$ . В результате приходим к формуле  $\sum_{j=1}^N \frac{N^2(x-x_j^{\text{ch}}) - 1}{T'_N(x_j^{\text{ch}})(x-x_j^{\text{ch}})^2} = 0$ , из которой вытекает, что

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1-x_j^{\text{ch}})^2} = \sum_{j=1}^N \frac{1}{T'_N(x_j^{\text{ch}})(1-x_j^{\text{ch}})^2} = N^2 \sum_{j=1}^N \frac{1}{T'_N(x_j^{\text{ch}})(1-x_j^{\text{ch}})} = N^2.$$

По аналогии, учитывая, что  $T'_N(-1) = (-1)^N N^2$ , можно вывести вторую из формул (1.32). <

**Доказательство теоремы 1.2.** Приближение функции, тождественно равной единице, полиномом (1.1) имеет вид

$$1 \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{x-x_j^{\text{ch}}} T_N(x) = \mathfrak{D}_N(x) T_N(x) / N.$$

Поскольку единица есть полином нулевой степени, то записанное приближение является точным, поэтому  $\mathfrak{D}_N(x) T_N(x) / N = 1$ . В рамках этого доказательства будем использовать обозначение  $\tau_N = \mathfrak{D}_N(x) T_N(x) / N$ .

Проверим, что при  $g(x) = \text{id}$  приближение (1.29) есть полином (1.3), делённый на  $\tau_N$ . Действительно, разделив первое слагаемое в правой части (1.3) на  $\tau_N$  и сократив  $T_N(x)$  и  $1/N$ , получаем в точности первое слагаемое в правой части (1.29). Для проверки равенства  $\sigma_{\pm 1}(x) = \zeta_{\pm 1}(x) \tau_N$  необходимо воспользоваться леммой 1.1. В случае условий второго типа распишем выражения, присутствующие под знаком суммы в формулах для  $\zeta_{\pm 1}$ :

$$\frac{x_j(x-2) - 2x + 3}{(1-x_j)^2} = -\frac{x-2}{1-x_j} + \frac{1-x}{(1-x_j)^2}, \quad (\text{II.3})$$

$$\frac{x_j(x+2) + 2x + 3}{(1+x_j)^2} = \frac{x+2}{1+x_j} + \frac{1+x}{(1+x_j)^2}. \quad (\text{II.4})$$

В итоге, пользуясь леммой 1.1, получаем

$$\begin{aligned} \zeta_{\pm 1}(x) &= \pm \frac{(x \pm 1)^2}{4\mathfrak{D}_N(x)} \left[ (2 \mp x) \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{1 \mp x_j} + (1 \mp x) \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1 \mp x_j)^2} \right] = \\ &= \pm \frac{(x \pm 1)^2 N}{4\mathfrak{D}_N(x)} [(2 \mp x)(\pm 1)^{N+1} + (1 \mp x)(\pm 1)^{N+1} N^2], \end{aligned} \quad (\text{II.5})$$

что совпадает с выражением для  $\sigma_{\pm 1}(x)$ , стоящим в (1.7), делённым на  $\tau_N$ .

Для случая однородных граничных условий третьего типа необходимо показать, что

$$\zeta_{\pm 1}(x) = \sigma_{\pm 1}(x)/\tau_N = N \frac{\sigma_{\pm 1}^{H1}(x) - \kappa_{\pm 1} s_{\pm 1}(x)}{\mathfrak{D}_N(x) T_N(x)}, \quad (\text{II.6})$$

где  $\sigma_{\pm 1}^{H1}(x)$  – функция, определённая в (1.14). Для вывода (II.6) представим выражения, стоящие под знаком суммы в  $\zeta_{\pm 1}(x)$ , в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{x_j[\kappa_{+1}(x-1) + x - 2] - 2x + 3 + \kappa_{+1}(1-x)}{(1-x_j)^2} &= \frac{x_j(x-2) - 2x + 3}{(1-x_j)^2} + \kappa_{+1} \frac{1-x}{1-x_j}, \\ \frac{x_j[\kappa_{-1}(x+1) - x - 2] - 2x - 3 + \kappa_{-1}(1+x)}{(1+x_j)^2} &= \\ &= -\frac{x_j(x+2) + 2x + 3}{(1+x_j)^2} + \kappa_{-1} \frac{1+x}{1+x_j}. \end{aligned}$$

Первые члены в правых частях этих равенств уже рассмотрены выше (формулы (II.3), (II.4)). Результат их линейных комбинаций с множителями  $\omega_j$  даётся равенством (II.5). Линейные комбинации последних членов в правых частях с множителями  $\omega_j$  есть

$$\kappa_{+1} \sum_{j=1}^N \omega_j \frac{1-x}{1-x_j} = \kappa_{+1} N(1-x), \quad \kappa_{-1} \sum_{j=1}^N \omega_j \frac{1+x}{1+x_j} = (-1)^{N+1} \kappa_{-1} N(1+x).$$

Здесь мы опять использовали лемму 1.1. Подставляя полученные выражения в формулу для  $\zeta_{\pm 1}(x)$  в случае смешанных граничных условий третьего типа, получаем (II.6).

Выкладки, необходимые для вывода равенства  $\zeta_{\pm 1}(x) = \sigma_{\pm 1}(x)/\tau_N$ , в случае граничных условий 4-го и 5-го типов проводятся аналогично. ◀

**Доказательство леммы 1.2.** Определим вспомогательную функцию

$$\mathfrak{a}(z, x) = \frac{z-x}{g(z)-g(x)}, \text{ такую что } \lim_{z \rightarrow x} \mathfrak{a}(z, x) = \frac{1}{g'(x)}.$$

Используя интерполяционный полином с узлами Чебышёва для приближения  $\mathfrak{a}(z, x)$  как функции переменной  $x$ , получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{g'(x)} &= \lim_{z \rightarrow x} \left( \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j T_N(x)}{x - x_j^{\text{ch}}} \frac{z - x_j^{\text{ch}}}{g(z) - g(x_j^{\text{ch}})} \right) + \varepsilon_N^g(x) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j T_N(x)}{g(x) - g(x_j^{\text{ch}})} + \varepsilon_N^g(x). \end{aligned} \quad (\text{II.7})$$

Теперь, полагая  $x = 1$  и учитывая, что  $g(1) = 1$  и  $T_N(1) = 1$ , можно вывести первую из формул (1.35). Первая из формул (1.36) тоже может быть получена из (II.7) с учётом  $T_N(-1) = (-1)^N$ .

Дифференцируя (II.7) по  $x$ , получаем

$$-\frac{g''(x)}{(g'(x))^2} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \omega_j \frac{T'_N(x)(g(x) - g(x_j^{\text{ch}})) - T_N(x)}{(g(x) - g(x_j^{\text{ch}}))^2} + (\varepsilon_N^g)'(x).$$

Подставим в последнее выражение  $x = 1$  и учтём, что  $T'_N(1) = N^2$  и  $T_N(1) = 1$ . В итоге получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1 - g(x_j^{\text{ch}}))^2} &= \frac{g''(1)}{(g'(1))^2} + N \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{1 - g(x_j^{\text{ch}})} + (\varepsilon_N^g)'(1) = \\ &= \frac{g''(1)}{(g'(1))^2} + \frac{N^2}{g'(1)} - N^2 \varepsilon_N^g(1) + (\varepsilon_N^g)'(1). \end{aligned} \quad (\text{II.8})$$

Рассуждая аналогичным образом, можно вывести второе из соотношений (1.36).  $\triangleleft$

**Доказательство теоремы 1.3** проведём только для случая, в котором  $\mathbf{p}_N(u, x) = \tilde{p}_N^{H1}(u, x)$  удовлетворяет однородным условиям Неймана на границе (условия второго типа). Для условий других типов доказательство делается по аналогии. Используя идею из [20], введём вспомогательные функции

$$\mathfrak{a}(z, x) = \frac{z - x}{g(z) - g(x)}, \text{ такую что } \lim_{z \rightarrow x} \mathfrak{a}(z, x) = \frac{1}{g'(x)} \text{ и} \quad (\text{II.9})$$

$$\Sigma^{H1}(z, x) = \frac{\sigma^{H1}(g(z), g(x))}{\sigma^{H1}(z, x)}, \quad \sigma^{H1}(z, x) = \frac{1 - z^2}{1 - x^2}, \quad \lim_{z \rightarrow x} \Sigma^{H1}(z, x) \equiv 1, \quad (\text{II.10})$$

и запишем соотношение

$$u(g(x)) = \lim_{z \rightarrow x} \frac{u(g(x)) \mathfrak{a}(z, x) \Sigma^{H1}(z, x)}{\mathfrak{a}(z, x)} \approx \lim_{z \rightarrow x} \frac{\mathbf{p}_N((u \circ g) \mathfrak{a} \Sigma^{H1}, x, z)}{p_N(\mathfrak{a}, x, z)}, \quad (\text{II.11})$$

где

$$\mathbf{p}_N((u \circ g) \mathfrak{a}, x, z) = \frac{T_N(x)}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j^{H1}(x) \Sigma^{H1}(z, x_j^{\text{ch}}) \frac{\omega_j u(g(x_j^{\text{ch}}))}{x - x_j^{\text{ch}}} \mathfrak{a}(z, x_j^{\text{ch}}) + \mathcal{L}_{-1}(x) + \mathcal{L}_1(x), \quad (\text{II.12})$$

$$p_N(\mathfrak{a}, x, z) = \frac{T_N(x)}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{x - x_j^{\text{ch}}} \mathfrak{a}(z, x_j^{\text{ch}}), \quad (\text{II.13})$$

$$\mathcal{L}_{-1}(x) = \lim_{z \rightarrow -1} \left( \sigma_{-1}^{H_1}(x)(u(g(-1))\mathfrak{a}(z, -1)\Sigma^{H_1}(z, -1)) + s_{-1}^{H_1}(x)(u(g(x))\mathfrak{a}(z, x)\Sigma^{H_1}(z, x))' \Big|_{x=-1} \right),$$

$$\mathcal{L}_1(x) = \lim_{z \rightarrow 1} \left( \sigma_1^{H_1}(x)(u(g(1))\mathfrak{a}(z, 1)\Sigma^{H_1}(z, 1)) + s_1^{H_1}(x)(u(g(x))\mathfrak{a}(z, x)\Sigma^{H_1}(z, x))' \Big|_{x=1} \right).$$

Поскольку  $g(\pm 1) = \pm 1$ ,  $\lim_{z \rightarrow \pm 1} \Sigma^{H_1}(z, \pm 1) = 1$ ,  $[\Sigma^{H_1}(z, x)]'_x \Big|_{x=\pm 1} = 0$  и  $u(x)$  удовлетворяет однородным условиям Неймана:  $u'(-1) = u'(1) = 0$ , то

$$\lim_{z \rightarrow \pm 1} [u(g(\pm 1))\mathfrak{a}(z, \pm 1)] = u(\pm 1) \frac{1}{g'(\pm 1)},$$

$$\lim_{z \rightarrow \pm 1} \{ [u(g(x))\mathfrak{a}(z, x)]'_x \Big|_{x=\pm 1} \} = -u(\pm 1) \frac{g''(\pm 1)}{(g'(\pm 1))^2}.$$

Таким образом, используя выражения (1.14) для  $\sigma_{\pm 1}^{H_1}(x)$  и  $s_{\pm 1}^{H_1}(x)$ , приходим к формуле

$$\mathcal{L}_{\pm 1}(x) = (\pm 1)^N \frac{(x \pm 1)^2}{4} T_N(x) \left[ \frac{2 \mp x + (1 \mp x)N^2}{g'(\pm 1)} + (x \mp 1) \frac{-g''(\pm 1)}{(g'(\pm 1))^2} \right] u(\pm 1).$$

Далее, если мы повторим выкладки (II.3)–(II.5), используя при этом лемму 1.2 вместо леммы 1.1, то для случая однородных граничных условий второго типа получим

$$\zeta_{\pm 1}(x) = (\pm 1)^N \frac{(x \pm 1)^2}{4 \mathfrak{D}_N(g(x))} N \left[ (1 \mp x) \left( \frac{N^2}{g'(\pm 1)} + \frac{g''(\pm 1)}{(g'(\pm 1))^2} - N^2 \varepsilon_N^g(\pm 1) + \hat{\varepsilon}_N^g(\pm 1) \right) + \right. \\ \left. + (2 \mp x) \left( \frac{1}{g'(\pm 1)} - \varepsilon_N^g(\pm 1) \right) \right] = N \frac{\mathcal{L}_{\pm 1}(x) + \epsilon_N^{\pm}(x)}{\mathfrak{D}_N(g(x)) T_N(x) u(\pm 1)}, \quad (\text{II.14})$$

где  $\epsilon_N^{\pm}(x) = (\pm 1)^N (x \pm 1)^2 [(1 \mp x)(\hat{\varepsilon}_N^g(\pm 1) - N^2 \varepsilon_N^g(\pm 1)) - (2 \mp x) \varepsilon_N^g(\pm 1)] T_N(x) u(\pm 1) / 4$ .

Теперь, используя идею из [20, sec. 1.1], получим для модифицированной ДРБИ  $\tilde{r}_N(u, x)$  следующее представление:

$$\tilde{r}_N(u \circ g, x) = \lim_{z \rightarrow x} \frac{\mathfrak{p}_N((u \circ g)\mathfrak{a}\Sigma^{H_1}, x, z)}{p_N(\mathfrak{a}, x, z)} + \epsilon_N^-(x) + \epsilon_N^+(x). \quad (\text{II.15})$$

Следовательно, в силу (II.11) это приводит к приближению композиции  $u \circ g$ . Действительно, в знаменателе (II.15) можно получить

$$\lim_{z \rightarrow x} p_N(\mathfrak{a}, x, z) = \lim_{z \rightarrow x} \frac{T_N(x)}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{x - x_j^{\text{ch}}} \frac{z - x_j^{\text{ch}}}{g(z) - g(x_j^{\text{ch}})} = \\ = \frac{T_N(x)}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{g(x) - g(x_j^{\text{ch}})} = \frac{T_N(x)}{N} \mathfrak{D}_N(g(x)). \quad (\text{II.16})$$

Переходя к тому же пределу в числителе, используя (II.12) и (II.14) и предельное равенство  $\lim_{x \rightarrow z} \sigma_j^{H_1}(x) \Sigma^{H_1}(z, x_j^{\text{ch}}) = \sigma_j^{H_1}(g(x))$ , выводим

$$\lim_{z \rightarrow x} \mathfrak{p}_N((u \circ g)\mathfrak{a}\Sigma^{H_1}, x, z) = \frac{T_N(x)}{N} \lim_{z \rightarrow x} \sum_{j=1}^N \sigma_j^{H_1}(g(x)) \frac{\omega_j u(g(x_j^{\text{ch}}))}{x - x_j^{\text{ch}}} \mathfrak{a}(z, x_j^{\text{ch}}) + \\ + \frac{T_N(x) \mathfrak{D}_N(g(x))}{N} [\zeta_{-1}(x) u(-1) + \epsilon_N^-(x) + \zeta_1(x) u(1) + \epsilon_N^+(x)]. \quad (\text{II.17})$$



Пользуясь (II.17) и (II.16), несложно видеть, что (II.15) верно. Заметив, что  $\tilde{r}_N(u \circ g, x) = \tilde{r}_N(u, g(x))$ ,  $u(g(\pm 1)) = u(\pm 1)$ , положив  $\hat{x} = g(x)$  и отбросив в полученных формулах крышку над переменными, приходим к (1.33).

Теперь мы можем получить оценку (1.34). Следуя (II.9), (II.10), (II.15), запишем

$$\tilde{r}_N(u, \hat{x}) - u(\hat{x}) = \frac{\frac{(u \circ g)(x)}{g'(x)} - E[\mathbf{p}_N](x) + [\epsilon_N^+(x) + \epsilon_N^-(x) - u \circ g(x)]\left(\frac{1}{g'(x)} - \varepsilon_N^g(x)\right)}{1/g'(x) - \varepsilon_N^g(x)},$$

где  $E[\mathbf{p}_N](x)$  – погрешность приближения  $\mathbf{p}_N((u \circ g)/g', x)$ ,  $\varepsilon_N^g(x) = \frac{1}{g'(x)} - p_N\left(\frac{1}{g'}, x\right)$ . Умножим числитель и знаменатель последнего равенства на  $g'(x)$ , для оценки выражения в числителе используем неравенство треугольника и найдём минимальное значение знаменателя, предполагая, что  $\|g'\| < 1/\varepsilon_N^g$ . В итоге получим

$$\|\tilde{r}_N(u, \hat{x}) - u(\hat{x})\| \leq \|g'\| \frac{E[\mathbf{p}_N] + \|u\|[\epsilon_N(1/\|g'\| + \varepsilon_N^g) + \varepsilon_N^g]}{1 - \|g'\|\varepsilon_N^g},$$

где  $E[\mathbf{p}_N] = \|E[\mathbf{p}_N](x)\|$ ,  $\varepsilon_N^g = \|\varepsilon_N^g(x)\|$ ,

$$\epsilon_N = \|\epsilon_N^+(x) + \epsilon_N^-(x)\|/\|u\| \leq 2[(2N^2 + 3)\varepsilon_N^g + 2\hat{\varepsilon}_N^g]. \quad (\text{II.18})$$

Отбрасывая крышку над переменной  $x$ , приходим к оценке (1.34). Слагаемое  $(\hat{c}_N \varepsilon_N^g + \hat{c} \hat{\varepsilon}_N^g)$  в числителе (1.34) появляется с учётом оценки для  $\epsilon_N$ . Из (II.18) следует, что для однородных условий Неймана  $\hat{c}_N = 4N^2 + 6$ ,  $\hat{c} = 4$ .  $\triangleleft$

**Доказательство леммы 1.3.** Оценки (1.59), (1.60) следуют из (I.12), из неравенства

$$\int_{x_n^q}^1 (1-x)^\alpha u(x) dx \leq M \frac{(1-x_n^q)^{1+\alpha}}{1+\alpha} \quad (\text{II.19})$$

и из асимптотических представлений для узлов и весов КФГ:

$$1 - x_n^q \sim \frac{j_1^2}{2n^2}, \quad \omega_n^q = \frac{\pi s_n}{2n+1} + O(1/(n^3 s_n)) \text{ при } n \rightarrow \infty, \quad s_n = \sqrt{1 - (x_n^q)^2}.$$

Доказательство первого представления см. в [216, теорема 8.1.2], второго – в [312].  $\triangleleft$

**Доказательство теоремы 1.4.** Без ограничения общности положим  $h(x) = (1-x)^\alpha$ . Тогда для КФГ с узлами  $y_1, \dots, y_n$  по аналогии с (II.19) имеем

$$\int_{y_n}^1 (1-\varkappa(y))^\alpha \varkappa'(y) u(\varkappa(y)) dy \leq M \int_{\varkappa(y_n)}^1 (1-x)^\alpha dx = M \frac{(1-\varkappa(y_n))^{1+\alpha}}{1+\alpha}. \quad (\text{II.20})$$

Эта оценка используется для анализа погрешности КФГ в случае применения всех трёх замен переменной, указанных в условии теоремы.

1. Для замены (1.62) при  $n \rightarrow \infty$  получаем

$$\pm 1 - \varkappa(y_n) \sim -\varepsilon \sinh \left[ \mp \frac{j_1^2}{4n^2} \sinh^{-1} \frac{2}{\varepsilon} \right] \sim \pm \varepsilon \sinh^{-1} \left[ \frac{2}{\varepsilon} \right] \frac{j_1^2}{4n^2}.$$

Обозначим  $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon \sinh^{-1}[2/\varepsilon]$  и учтём, что  $\tilde{\varepsilon} \sim \varepsilon \ln[1/\varepsilon]$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Тогда после подстановки  $1 - \varkappa(y_n)$  в (II.20) по аналогии с доказательством леммы 1.3 приходим к оценке (1.63).

2. Для замены (1.64) при  $n \rightarrow \infty$  имеем

$$1 - \varkappa(y_n) = 1 - \sin \left( \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2}(1 - y_n) \right) = 1 - \cos \frac{\pi}{2}(1 - y_n) \sim \frac{\pi^2(1 - y_n)^2}{8} = \frac{\pi^2 j_1^4}{32n^4}.$$

Подстановка последнего выражения в (II.20) по аналогии с леммой 1.3 даёт оценку (1.65).

3. Для (1.66) в силу  $1 - \tanh(\sinh x) = \frac{2}{\exp(\exp(x) - \exp(-x)) + 1}$  и  $\frac{2By_n}{(y_n^2 - 1)} \sim -\frac{2Bn^2}{j_1^2}$  при  $n \rightarrow \infty$  имеем

$$1 - \varkappa(y_n) \sim \frac{2}{\exp(A \exp(2Bn^2/j_1^2))}.$$

Таким образом, имеет место очень быстрое убывание компоненты погрешности интегрирования, связанной с разрывами функции  $h(x)$  и/или её производных. В связи с этим асимптотика погрешности при расчёте интеграла (1.61) определяется особенностями функции  $\varkappa(x)$  и характеризуется теоремой I.19, в которой для оценки  $E_n^b(u)$  можно воспользоваться теоремами I.15, I.16.

Конкретно, в [152] показано, что функция  $\varkappa(y)$  вида (1.66) имеет бесконечное число точек ветвления, расположенных на определённой кривой в комплексной плоскости и образующих последовательность, сходящуюся к точке 1, поэтому функция  $\varkappa(y)$ , являясь бесконечно-дифференцируемой на  $[-1, 1]$ , не может быть аналитически продолжена в комплексную плоскость. Поскольку подынтегральная функция (1.61) имеет те же особые точки, что и  $\varkappa(y)$ , то из теорем I.19, I.1, I.3 следует, что скорость убывания  $E_n^1([\psi \circ \varkappa]\varkappa')$  выше степенной, но ниже экспоненциальной.  $\triangleleft$

**Доказательство теоремы 1.5.** Рассмотрим наилучшее полиномиальное приближение  $P_M^b(x) = P_M^b(u, x)$  функции  $u(x)$  с погрешностью  $E_M^b(u)$ . Используя разложение  $\pi_M(u, x)$  вида (I.7) и учитывая, что оно является точным на полиномиальных функциях степени не выше  $M$ , получаем

$$\int_{-1}^1 (1 \pm x)^\alpha P_M^b(x) dx - \sum_{m=0}^M a_m T_m^\alpha = 0. \quad (\text{II.21})$$

Разложим  $P_M^b(x)$  в ряд Фурье–Чебышёва:

$$P_M^b(x) = \sum_{m=0}^M \tilde{a}_m T_m(x), \quad \tilde{a}_m = c_m \int_{-1}^1 \frac{P_M^b(x) T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx.$$

Используя обозначения (1.68) и неравенство  $|T_m(x)| \leq 1$ , получаем

$$\begin{aligned}
|I^h - I_M^h| &\leq \int_{-1}^1 (1 \pm x)^\alpha |P_M^b(x) - u(x)| dx + \sum_{m=0}^M |\tilde{a}_m - a_m| \cdot |\mathcal{T}_m^\alpha| \leq \\
&\leq E_M^b(u) \left( 1 + \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \right) \int_{-1}^1 (1 \pm x)^\alpha dx = 3 \frac{2^{1+\alpha}}{1+\alpha} E_M^b(u). \quad \triangleleft
\end{aligned} \tag{II.22}$$

**Доказательство теоремы 2.1.** Итерацию метода установления представим как  $\widehat{U} = S(U)$ , где  $S : \mathbb{R}^{\mathcal{N}} \rightarrow \mathbb{R}^{\mathcal{N}}$  – линейный оператор с максимальным собственным значением  $\lambda_{\max}$ ,  $\mathcal{N} = N_1 \times \dots \times N_d$ . Отметим, что анализ значений спектра матриц  $A_\delta$ , проведённый в п. 1.3.2 (см. также приложение III), позволяет гарантировать, что матрицы  $A_\delta$  (а значит, и матрицы перехода) являются нормальными, и все их собственные числа являются строго отрицательными за исключением случаев чистой задачи Неймана, задач на окружности и сфере, а также задач с условиями, указанным в замечании 1.7. Этот анализ сделан с применением интервальных методов, при этом число узлов менялось в диапазоне  $N_\delta = \overline{2, 500}$ . Из отрицательности спектра с учётом (2.9), (2.10) несложно сделать следующие выводы:

– для простой регуляризации  $\lambda_{\max} = (1 + \tau m)^{-1}$ , значит,  $\forall \tau |\lambda_{\max}| < 1$ , поскольку все матрицы  $A_\delta$  невырождены ( $m \neq 0$ );

– для регуляризации Соболева  $\lambda_{\max} = \frac{k_1 + k_2 M}{k_1 + (k_2 + \tau)m}$ , т. е.  $|\lambda_{\max}| \leq 1$  при  $\tau \geq k_2(M/m - 1)$ .

Таким образом, спектральный критерий устойчивости (критерий фон Неймана) при указанных ограничениях на шаг  $\tau$  обеспечивает устойчивость предложенного метода в линейных задачах за исключением чистой задачи Неймана, задач на окружности и сфере, а также задач с условиями, указанными в замечании 1.7. Для последних имеет место лишь условная устойчивость ( $|\lambda_{\max}| = 1$ ) схемы на основе простой регуляризации.  $\triangleleft$

**Доказательство теоремы 2.2.** Поскольку арифметические операции, стоящие в правой части  $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ , в рамках данного метода «превращаются» в соответствующие операции с  $N^d$  элементами массивов решения и его производных, то таких операций насчитывается  $O(N^d)$ . Основные затраты времени при вычислении  $H(U)$  состоят в операциях по расчёту производных по формулам (1.56). Общее количество таких операций –  $\sigma N^{d+1}$ . Остальные операции включают вычисление  $G(U)$  по формулам (2.17) ( $dN^{d+1}$  операций), расчёт элементов массивов  $\widehat{V}$  ( $O(N^d)$  операций) и  $\widehat{U}$  по формулам (2.18) ( $dN^{d+1}$  операций), а также добавочных массивов и их произведений на аппроксимирующие матрицы по формулам вида (1.54) ( $dN^{d+1} + O(N^d)$  операций для каждой производной в уравнении). Суммируя все затраты, получаем  $(2d + \sigma(d + 1))N^{d+1} + O(N^d)$  операций на каждой итерации.

В ходе расчётов в оперативной памяти должны храниться:

1) аппроксимирующие матрицы  $\mathcal{A}_\delta$ ,  $A_\delta$ , матрица спектрального разложения  $R_{A_\delta}$  и обратная к ней (в сумме, 3 или 4 матрицы размера  $N \times N$  в зависимости от того, есть ли

необходимость аппроксимировать первые производные массивом  $\mathcal{A}_\delta$ );

2) диагональная матрица  $D_A$  (суммарным объёмом  $N$  чисел);

3) массивы значений производных в выражениях правой части (всего таких производных  $\sigma - d$ ), массивы решения на текущем и предыдущем временных слоях, массив правой части и массивы  $\widehat{V}$ ,  $G$ , см. (2.17) (суммарный объём  $s(\sigma - d + 5)N^d$ );

4) добавочные массивы для неизвестной функции и её производных, реализующие граничные условия (в сумме,  $d(\sigma + 1)$  массивов);

5) прочие данные малого объёма (параметры метода, коэффициенты уравнения).

Суммируя все затраты памяти, получаем выражение из условия теоремы.  $\triangleleft$

## Приложение III

# Анализ матриц, аппроксимирующих операторы дифференцирования

Ниже приведены формулы для вычисления производных от интерполяционных полиномов  $\tilde{p}_N^2, \tilde{p}_N^4, \tilde{p}_N^5$  при  $\hat{\alpha} = 0, \hat{\beta} = 1, \hat{\gamma} = 0, \hat{\theta} = 1$  и  $p_N$ . Здесь верхний индекс в обозначении интерполяционного полинома соответствует номеру типа краевого условия, см. п. 1.1.1. При использовании этих формул найдены выражения элементов матриц  $\mathcal{A}, A$ , аппроксимирующих операторы первой и второй производных, см. п. 1.3.1. Кроме того, построены графики зависимости норм и обусловленностей этих матриц и матриц их спектральных разложений от количества узлов интерполяции (рис. III.1–III.4). Значения норм и обусловленностей рассчитаны с гарантией точности с помощью пакета INTLAB. Радиусы интервалов, гарантированно содержащих эти значения, на несколько порядков меньше самих значений, поэтому графики радиусов опущены. На рисунках приведены данные, соответствующие первым (штрих-пунктир), вторым (пунктир) и бесконечным (сплошная линия) матричным нормам. Далее полагаем  $s = \sqrt{1-x^2}$ ,  $u_j = u(x_j^{\text{ch}})$ ,  $x_j^{\text{ch}} = -\cos \frac{(2j-1)\pi}{2N}$ ,  $j = \overline{1, N}$  (узлы упорядочены по возрастанию, см. замечание 1.4). Заметим, что такое упорядочивание узлов приводит к изменению формул для элементов матриц  $\mathcal{A}$  и  $A$ , полученных при использовании полиномов  $\tilde{p}_N^4$  и  $\tilde{p}_N^5$ .

Дифференцируя  $\tilde{p}_N^2$  по  $x$ , получаем

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{p}_N^2(u, x)}{dx} = \frac{s^2}{N} \sum_{j=1}^N \frac{1}{\omega_j^3} \left( \frac{4xx_j^{\text{ch}} - 3x^2 - 1}{(x - x_j^{\text{ch}})^2} T_N(x) + \frac{s^2 T'_N(x)}{x - x_j^{\text{ch}}} \right) u_j + \\ + \sigma'_{+1}(x) u_N + \sigma'_{-1}(x) u_1, \end{aligned} \quad (\text{III.1})$$

где

$$\begin{aligned} \sigma'_{+1}(x) &= (x+1)[(N^2+1)(1-3x)+2]T_N(x)/4 - \\ &\quad - (x+1)^2[(N^2+1)x - (N^2+2)]T'_N(x)/4, \\ \sigma'_{-1}(x) &= (-1)^N(x-1)[(N^2+1)(3x+1)+2]T_N(x)/4 + \\ &\quad + (-1)^N(x-1)^2[(N^2+1)x + (N^2+2)]T'_N(x)/4. \end{aligned}$$

Добавляя к узлам  $x_i^{\text{ch}}$  точки  $\pm 1$  и вводя новую нумерацию узлов:  $x_1 = -1$ ,  $x_i^{\text{ch}} = -\cos \frac{(2i-3)\pi}{2N}$ ,  $i = \overline{2, N+1}$ ,  $x_{N+2} = 1$ , сформируем  $\mathfrak{N} \times \mathfrak{N}$  матрицу ( $\mathfrak{N} = N+2$ ), аппроксимирующую первую производную функции, удовлетворяющей однородным условиям Неймана. Переходя в (III.1) к пределу при  $x \rightarrow x_i^{\text{ch}}$  и используя, как и ранее, правило Лопиталю, находим элементы этой матрицы:

$$\mathbf{a}_{ij} = \frac{\omega_i^3}{\omega_j^3(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})} \quad \text{при } i \neq j, \quad i, j = \overline{2, N+1},$$

$$\mathbf{a}_{i1} = \frac{N(x_i^{\text{ch}} + 1)^2}{4\omega_i} (N^2 - x_i^{\text{ch}}(N^2 + 1) + 2), \quad i = \overline{2, N+1},$$

$$\mathbf{a}_{iN+2} = \frac{(-1)^N N(x_i^{\text{ch}} - 1)^2}{4\omega_i} (N^2 + x_i^{\text{ch}}(N^2 + 1) + 2), \quad i = \overline{2, N+1},$$

$$\mathbf{a}_{1j} = \mathbf{a}_{N+2j} = 0, \quad j = \overline{1, N+2}, \quad \mathbf{n}_i = -\frac{7x_i^{\text{ch}}}{2\omega_i^2}, \quad i = \overline{2, N+1}, \quad \mathbf{n}_1 = \mathbf{n}_{N+2} = 0.$$

Дифференцируя  $\tilde{p}_N^2(u, x)$  по  $x$  дважды, получаем

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \tilde{p}_N^2}{dx^2} = & \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{1}{\omega_j^3} \left\{ \left( \frac{2(1-x^4) - 4(x_j^{\text{ch}})^2 s^2}{(x-x_j^{\text{ch}})^3} + \frac{8x^2 - N^2 s^2}{x-x_j^{\text{ch}}} \right) T_N(x) - \right. \\ & \left. - \frac{2s^4 + 7s^2 x(x-x_j^{\text{ch}})}{(x-x_j^{\text{ch}})^2} T'_N(x) \right\} u_j + \sigma''_{+1}(x) u_N + \sigma''_{-1}(x) u_1, \end{aligned} \quad (\text{III.2})$$

где

$$\begin{aligned} \sigma''_{+1}(x) = & \frac{N^2 T_N(x) - x T'_N(x)}{4s^2} (x+1)^2 [(N^2+1)x - (N^2+2)] + \\ & + \frac{N^2+1}{2} [(x+1)(1-3x)T'_N(x) - (3x+1)T_N(x)] + \frac{T_N(x)}{2} + (x+1)T'_N(x), \\ \sigma''_{-1}(x) = & (-1)^{N-1} \left( \frac{N^2 T_N(x) - x T'_N(x)}{4s^2} (x-1)^2 [(N^2+1)x + N^2+2] + \right. \\ & \left. + \frac{N^2+1}{2} [(1-x)(3x+1)T'_N(x) - (3x-1)T_N(x)] - \frac{T_N(x)}{2} + (1-x)T'_N(x) \right). \end{aligned}$$

Нетрудно проверить, что  $(N^2 T_N(x) - x T'_N(x))/s^2 = -T''_N(x)$ , поэтому приведённые выражения для  $\sigma''_{\pm 1}(x)$  являются полиномиальными. Переходя в (III.2) к пределу при  $x \rightarrow x_i^{\text{ch}}$ , получаем элементы  $\mathfrak{N} \times \mathfrak{N}$  матрицы, аппроксимирующей вторую производную:

$$a_{ij} = -\frac{2\omega_i^3 + 7x_i^{\text{ch}}\omega_i(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})}{\omega_j^3(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})^2} \text{ при } i \neq j, \quad i, j = \overline{2, N+1},$$

$$a_{i1} = c_1 \left( \begin{aligned} & [-N^2 + 5x_i^{\text{ch}}(N^2+1) - 4](x_i^{\text{ch}})^2 + \\ & + [N^2 - x_i^{\text{ch}}(N^2+1) + 2]x_i^{\text{ch}} + 2N^2 - 6x_i^{\text{ch}}(N^2+1) + 6 \end{aligned} \right),$$

$$a_{iN+2} = c_2 \left( \begin{aligned} & -[N^2 + 5x_i^{\text{ch}}(N^2+1) + 4](x_i^{\text{ch}})^2 - \\ & - [N^2 + x_i^{\text{ch}}(N^2+1) + 2]x_i^{\text{ch}} + 2N^2 + 6x_i^{\text{ch}}(N^2+1) + 6 \end{aligned} \right),$$

$$\text{где } c_1 = \frac{N(x_i^{\text{ch}} + 1)}{4\omega_i^3}, \quad c_2 = \frac{(-1)^N N(x_i^{\text{ch}} - 1)}{4\omega_i^3}, \quad i = \overline{2, N+1};$$

$$a_{1j} = \frac{8}{N\omega_j^3(1-x_j^{\text{ch}})}, \quad a_{N+2j} = \frac{8(-1)^{N-1}}{N\omega_j^3(1+x_j^{\text{ch}})}, \quad j = \overline{2, N+1},$$

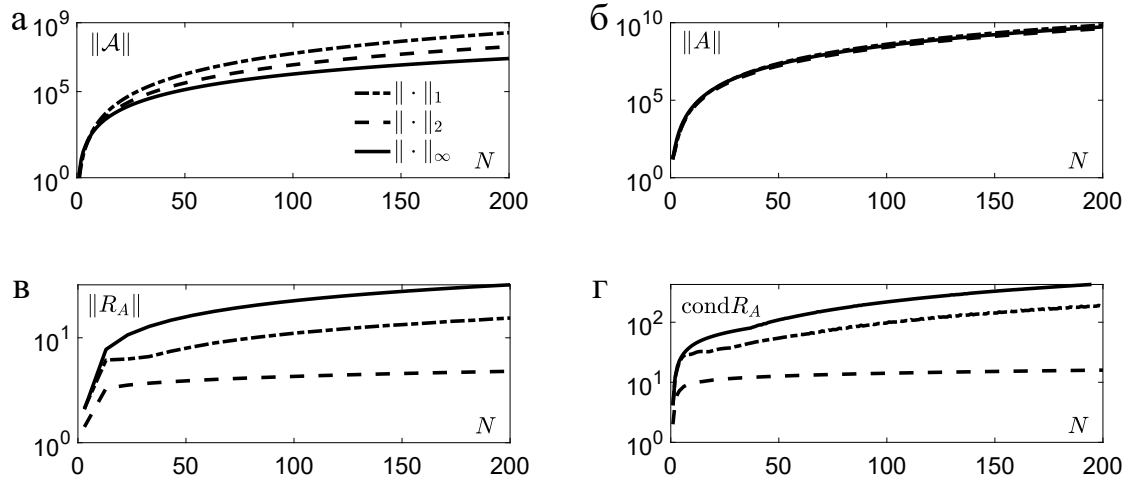
$$a_{1 \ N+2} = a_{N+2 \ 1} = (-1)^N(2N^2 + 3)/2,$$

$$\nu_i = -\frac{N^2 + 26}{3\omega_i^2} + \frac{5}{\omega_i^4}, \quad i = \overline{2, N+1}, \quad \nu_1 = \nu_{N+2} = -\frac{N^2(5N^2 + 7)}{3} - \frac{3}{2}.$$

В табл. 32 приведены собственные числа матрицы  $A$  с элементами  $a_{ij}$ ,  $i \neq j$ , вне диагонали и  $\nu_i$  на диагонали, а также радиусы интервалов, гарантированно содержащих эти значения, и их относительные отклонения от собственных чисел  $\lambda_j$  задачи Штурма–Лиувилля на отрезке  $[-1, 1]$  с условиями Неймана,  $\text{dev}_j = |d_A^j - \lambda_j|/\lambda_j$ .

**Таблица 32.** Значения собственных чисел  $d_A^j$  матрицы  $A$  для условий Неймана при  $N = 8$  ( $\mathfrak{N} = 10$ ), радиусы интервалов  $\text{rad}_j$ , гарантированно содержащих  $d_A^j$ , и отклонения  $\text{dev}_j$

$j$	$d_A^j$	$\text{rad}_j$	$\text{dev}_j$	$j$	$d_A^j$	$\text{rad}_j$	$\text{dev}_j$
1	4.92e-13	2.65e-13	—	6	-60.515396107357439	9.38e-13	1.9e-2
2	-2.467401100318094	4.61e-13	1.85e-11	7	-145.3493946469375	3.58e-12	0.636
3	-9.869635764269276	5.81e-13	3.18e-6	8	-177.2279282778076	2.22e-12	0.466
4	-22.199821816607038	4.48e-13	3.06e-4	9	-4028.594944537915	3.18e-12	24.51
5	-40.186025050892496	4.69e-13	1.79e-2	10	-4348.589452697921	3.64e-12	20.76



**Рис. III.1.** Значения обусловленностей и норм матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$ ,  $R_A$ , соответствующих однородным условиям Неймана: а)  $\log_{10} N_{\mathcal{A}}^{1,2,\infty}$ ; б)  $\log_{10} N_A^{1,2,\infty}$ ; в)  $\log_{10} N_{R_A}^{1,2,\infty}$ ; г)  $\log_{10} \text{cond}_{R_A}^{1,2,\infty}$

Дифференцируя  $\tilde{p}_N^4$  по  $x$ , получаем

$$\frac{d\tilde{p}_N^4(u, x)}{dx} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{(1-x)}{\omega_j(x_j^{\text{ch}} - 1)} \left\{ \frac{s^2 + (3x+1)(x-x_j^{\text{ch}})}{(x-x_j^{\text{ch}})^2} T_N(x) - \frac{s^2 T'_N(x)}{x-x_j^{\text{ch}}} \right\} u_j + \sigma'_{+1}(x) u_{N+1}, \quad (\text{III.3})$$

где

$$\sigma'_{+1}(x) = [0.5 - (N^2 + 0.5)x]T_N(x) + [s^2(N^2 + 0.5) + x + 1]T'_N(x)/2.$$

Добавляя к нулям полиномов Чебышёва точку 1 и вводя новую нумерацию узлов:  $x_i^{\text{ch}} = -\cos \frac{(2i-1)\pi}{2N}$ ,  $i = \overline{1, N}$ ,  $x_{N+1} = 1$ , сформируем  $\mathfrak{N} \times \mathfrak{N}$  матрицу ( $\mathfrak{N} = N + 1$ ), аппроксимирующую первую производную функции  $u(x)$ , удовлетворяющей однородным условиям:  $u(-1) = 0$ ,  $u'(1) = 0$ . Переходя в (III.3) к пределу при  $x \rightarrow x_i^{\text{ch}}$  и используя правило Лопиталя, находим элементы этой матрицы:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{ij} &= \frac{(1 + x_i^{\text{ch}})^2(1 - x_i^{\text{ch}})\omega_j}{(1 + x_j^{\text{ch}})^2(1 - x_j^{\text{ch}})\omega_i(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})} \text{ при } i \neq j, \quad i, j = \overline{1, N}, \\ \mathbf{a}_{i \ N+1} &= \frac{(-1)^N N(x_i^{\text{ch}} - 1)}{2\omega_i} [(N^2 + 0.5)(x_i^{\text{ch}} + 1) + 1], \quad i = \overline{1, N}, \\ \mathbf{a}_{N+1 \ j} &= 0, \quad j = \overline{1, N}, \quad \mathbf{n}_i = -\frac{5x_i^{\text{ch}} - 2}{2\omega_i^2}, \quad i = \overline{1, N}, \quad \mathbf{n}_{N+1} = 0. \end{aligned}$$

Дифференцируя  $\tilde{p}_N^4$  по  $x$  дважды, находим

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \tilde{p}_N^4(u, x)}{dx^2} &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N l_j^1 \left\{ \left( \lambda_j^1 + \frac{(x-1)[2s^2 - N^2(x - x_j^{\text{ch}})^2]}{x - x_j^{\text{ch}}} \right) T_N(x) - \right. \\ &\quad \left. - 2(x-1) \left[ s^2 + (x - x_j^{\text{ch}}) \left( \frac{5}{2}x + 1 \right) \right] T'_N(x) \right\} u_j + \sigma''_{+1}(x) u_N, \end{aligned} \quad (\text{III.4})$$

где  $l_j^1 = \frac{1}{N\omega_j(x - x_j^{\text{ch}})^2(x_j^{\text{ch}} - 1)}$ ,  $\lambda_j^1 = 2[x_j^{\text{ch}}(3x - 1) - x - 1]$ ,

$$\sigma''_{+1} = \left( 1 - \frac{3x(N^2 + 0.5)}{2} + \frac{x(x+1)}{2s^2} \right) T'_N(x) - \frac{1}{2} \left( N^4 + \frac{5}{2}N^2 + 1 + \frac{N^2}{s^2}(x+1) \right) T_N(x).$$

Осуществляя в (III.4) переход к пределу при  $x \rightarrow x_i^{\text{ch}}$ , вычисляем элементы  $\mathfrak{N} \times \mathfrak{N}$  матрицы, аппроксимирующей вторую производную:

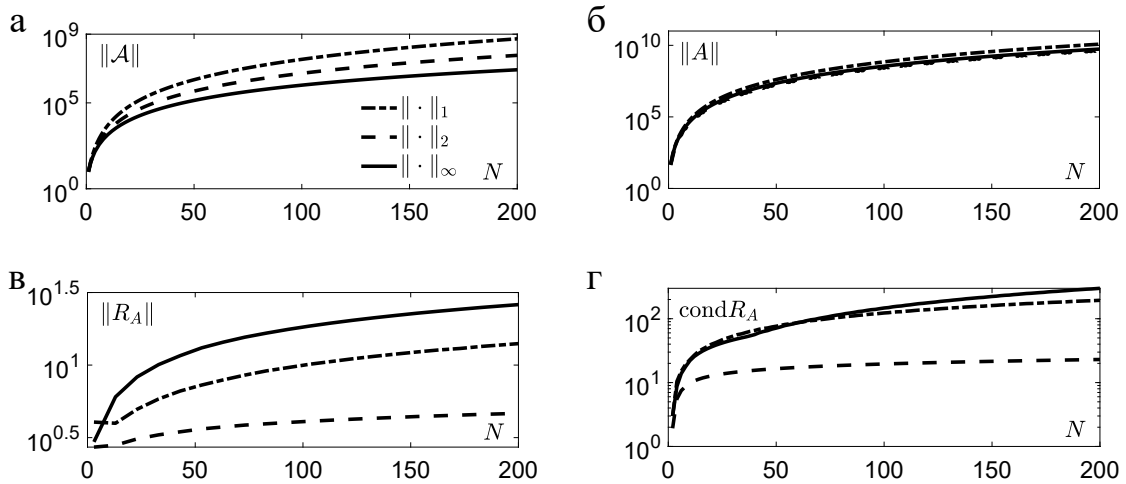
$$\begin{aligned} a_{ij} &= \frac{(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})(2 + x_i^{\text{ch}})(1 + x_i^{\text{ch}}) + 2\omega_i^2(2x_j^{\text{ch}} - x_i^{\text{ch}} + 1)}{\omega_i\omega_j(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})^2(1 + x_j^{\text{ch}})} \text{ при } i \neq j, \quad i, j = \overline{1, N}, \\ a_{i \ N+1} &= \frac{(-1)^N N}{2\omega_i^3} \left( 2\omega_i^2[x_i^{\text{ch}}(2N^2 + 1) + 1] + x_i^{\text{ch}}[(N^2 + 0.5)(x_i^{\text{ch}} + 1) + 1](x_i^{\text{ch}} - 1) \right), \quad i = \overline{1, N}, \\ a_{N+1 \ j} &= \frac{(-1)^N \omega_j}{N(1 + x_j^{\text{ch}})^3(1 - x_j^{\text{ch}})}, \quad j = \overline{1, N}, \\ \nu_i &= \frac{1 - N^2}{3\omega_i^2} + \frac{4(x_i^{\text{ch}})^2 - 3x_i^{\text{ch}} - 2}{\omega_i^4}, \quad i = \overline{1, N}, \quad \nu_{N+1} = \frac{N^2(2 - 5N^2)}{3}. \end{aligned}$$

В табл. 33 приведены собственные числа матрицы  $A$  с элементами  $a_{ij}$ ,  $i \neq j$ , вне диагонали и  $\nu_i$  на диагонали, а также радиусы интервалов, гарантированно содержащих эти значения, и их относительные отклонения от собственных чисел  $\lambda_j$  задачи Штурма–Лиувилля на отрезке  $[-1, 1]$  для функции  $u$  с условиями  $u(-1) = 0$ ,  $u'(1) = 0$ ,  $\text{dev}_j = |d_A^j - \lambda_j|/\lambda_j$ .



**Таблица 33.** Значения собственных чисел  $d_A^j$  матрицы  $A$  для условий Неймана при  $N = 9$  ( $\mathfrak{N} = 10$ ), радиусы интервалов  $\text{rad}_j$ , гарантированно содержащих  $d_A^j$ , и отклонения  $\text{dev}_j$

$j$	$d_A^j$	$\text{rad}_j$	$\text{dev}_j$	$j$	$d_A^j$	$\text{rad}_j$	$\text{dev}_j$
1	-0.616850275069793	4.48e-13	2.77e-13	6	-73.042737969700852	9.09e-13	2.14e-2
2	-5.551652423389034	4.56e-13	9.41e-9	7	-131.7627780166721	4.55e-13	0.264
3	-15.421261608817975	4.49e-13	3.07e-7	8	-226.8540880261749	7.87e-12	0.634
4	-30.218412243368626	5.26e-13	2.4e-4	9	-2099.348399975198	4.55e-13	10.78
5	-50.022588052115559	4.9e-13	1.16e-3	10	-6250.161231409513	5.46e-12	27.07



**Рис. III.2.** Значения обусловленностей и норм матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$ ,  $R_A$ , соответствующих условиям  $u(-1) = 0$ ,  $u'(1) = 0$ : а)  $\log_{10} N_A^{1,2,\infty}$ ; б)  $\log_{10} N_A^{1,2,\infty}$ ; в)  $\log_{10} N_{R_A}^{1,2,\infty}$ ; г)  $\log_{10} \text{cond}_{R_A}^{1,2,\infty}$

Дифференцируя  $\tilde{p}_N^5$  по  $x$ , получаем

$$\frac{d\tilde{p}_N^5(u, x)}{dx} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{-(1+x)}{\omega_j(x_j^{\text{ch}} + 1)} \left\{ \frac{s^2 + (3x-1)(x-x_j^{\text{ch}})}{(x-x_j^{\text{ch}})^2} T_N(x) - \frac{s^2 T_N'(x)}{x-x_j^{\text{ch}}} \right\} u_j + \sigma'_{-1}(x) u_1, \quad (\text{III.5})$$

$$\sigma'_{-1}(x) = (-1)^N ([s^2(N^2 + 0.5) - x + 1] T_N'(x) / 2 - [0.5 + (N^2 + 0.5)x] T_N(x)).$$

Добавляя к нулям полиномов Чебышёва точку  $-1$  и вводя новую нумерацию узлов:  $x_1 = -1$ ,  $x_i^{\text{ch}} = -\cos \frac{(2i-3)\pi}{2N}$ ,  $i = 2, N+1$ , сформируем  $\mathfrak{N} \times \mathfrak{N}$  матрицу ( $\mathfrak{N} = N+1$ ), аппроксимирующую первую производную функции  $u(x)$ , удовлетворяющей однородным условиям:  $u'(-1) = 0$ ,  $u(1) = 0$ . Переходя в (III.5) к пределу при  $x \rightarrow x_i^{\text{ch}}$  и используя правило Лопиталья, находим элементы этой матрицы:

$$\mathbf{a}_{ij} = \frac{(1 - x_i^{\text{ch}})^2(1 + x_i^{\text{ch}})\omega_j}{(1 + x_j^{\text{ch}})(1 - x_j^{\text{ch}})^2\omega_i(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})} \text{ при } i \neq j, \quad i, j = \overline{2, N+1},$$

$$\mathbf{a}_{i1} = \frac{-N(x_i^{\text{ch}} + 1)}{2\omega_i} [(N^2 + 0.5)(x_i^{\text{ch}} - 1) - 1], \quad i = \overline{2, N+1},$$

$$\mathbf{a}_{1j} = 0, \quad j = \overline{2, N+1}, \quad \mathbf{n}_i = -\frac{5x_i^{\text{ch}} + 2}{2\omega_i^2}, \quad i = \overline{2, N+1}, \quad \mathbf{n}_1 = 0.$$

Дифференцируя  $\tilde{p}_N^5$  по  $x$  дважды, выводим

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \tilde{p}_N^5(u, x)}{dx^2} &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N l_j^2 \left\{ \left( \lambda_j^2 + \frac{(x+1)[2s^2 - N^2(x - x_j^{\text{ch}})^2]}{x - x_j^{\text{ch}}} \right) T_N(x) - \right. \\ &\quad \left. - 2(x+1) \left[ s^2 + \left( \frac{5}{2}x - 1 \right) (x - x_j^{\text{ch}}) \right] T'_N(x) \right\} u_j + \sigma''_{-1}(x) u_1, \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

$$\text{где } l_j^2 = \frac{1}{\omega_j(x - x_j^{\text{ch}})^2(x_j^{\text{ch}} + 1)}, \quad \lambda_j^2 = 2[x_j^{\text{ch}}(3x + 1) + x - 1],$$

$$\begin{aligned} \sigma''_{-1}(x) &= (-1)^N \left( \frac{N^2}{2s^2} (x - 1) - (N^2 + 0.5)(1 + 0.5N^2) \right) T_N(x) + \\ &\quad + (-1)^N \left( \frac{x(1-x)}{2s^2} - \frac{3x(N^2 + 0.5)}{2} - 1 \right) T'_N(x). \end{aligned}$$

Переходя в (III.6) к пределу при  $x \rightarrow x_i^{\text{ch}}$ , вычисляем элементы  $\mathfrak{N} \times \mathfrak{N}$  матрицы, аппроксимирующей вторую производную:

$$a_{ij} = \frac{(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})(x_i^{\text{ch}} - 1)(x_i^{\text{ch}} - 2) + 2\omega_i^2(2x_j^{\text{ch}} - x_i^{\text{ch}} - 1)}{\omega_i\omega_j(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})^2(1 - x_j^{\text{ch}})}, \quad i \neq j, \quad i, j = \overline{2, N+1},$$

$$a_{i1} = \frac{-N}{2\omega_i^3} \left( 2\omega_i^2[2x_i^{\text{ch}}(N^2 + 0.5) - 1] + x_i^{\text{ch}}[(N^2 + 0.5)(x_i^{\text{ch}} - 1) - 1](x_i^{\text{ch}} + 1) \right), \quad i = \overline{2, N+1},$$

$$a_{1j} = \frac{\omega_j}{N(1 - x_j^{\text{ch}})^3(1 + x_j^{\text{ch}})}, \quad j = \overline{2, N+1},$$

$$\nu_i = \frac{1 - N^2}{3\omega_i^2} + \frac{4(x_i^{\text{ch}})^2 + 3x_i^{\text{ch}} - 2}{\omega_i^4}, \quad i = \overline{2, N+1}, \quad \nu_1 = \frac{N^2(2 - 5N^2)}{3}.$$

В табл. 34 приведены собственные числа матрицы  $A$  с элементами  $a_{ij}$ ,  $i \neq j$ , вне диагонали и  $\nu_i$  на диагонали, а также радиусы интервалов, гарантированно содержащих эти значения, и их относительные отклонения от собственных чисел  $\lambda_j$  задачи Штурма–Лиувилля на отрезке  $[-1, 1]$  для функции  $u$  с условиями  $u'(-1) = 0$ ,  $u(1) = 0$ ,  $\text{dev}_j = |d_A^j - \lambda_j|/\lambda_j$ .

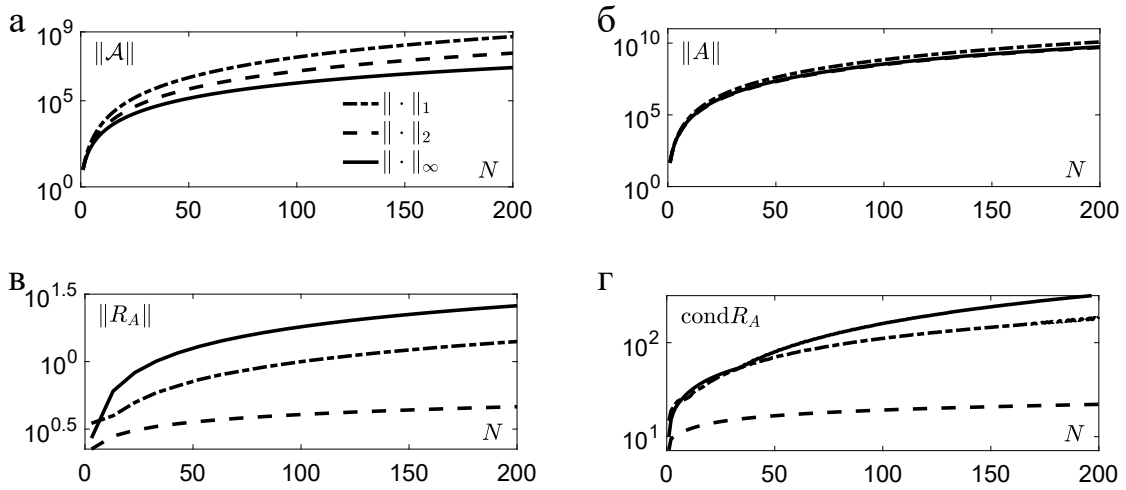
Дифференцируя  $p_N$  по  $x$ , получаем

$$p'_N(u, x) = -\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \omega_j \left\{ \frac{T_N(x)}{(x - x_j^{\text{ch}})^2} - \frac{T'_N(x)}{x - x_j^{\text{ch}}} \right\} u_j, \quad (\text{III.7})$$

$$p_N''(u, x) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{s^2} \left\{ \frac{2s^2 - N^2(x - x_j^{\text{ch}})^2}{(x - x_j^{\text{ch}})^3} T_N(x) + \frac{3x^2 - xx_j^{\text{ch}} - 2}{(x - x_j^{\text{ch}})^2} T_N'(x) \right\} u_j. \quad (\text{III.8})$$

**Таблица 34.** Значения собственных чисел  $d_A^j$  матрицы  $A$  для условий Неймана при  $N = 9$  ( $\mathfrak{N} = 10$ ), радиусы интервалов  $\text{rad}_j$ , гарантированно содержащих  $d_A^j$ , и отклонения  $\text{dev}_j$

$j$	$d_A^j$	$\text{rad}_j$	$\text{dev}_j$	$j$	$d_A^j$	$\text{rad}_j$	$\text{dev}_j$
1	-0.616850275069356	3.34e-13	2.06e-12	6	-73.042737969699488	7.39e-13	2.14e-2
2	-5.551652423389263	3.09e-13	9.41e-9	7	-131.7627780166722	3.69e-13	0.264
3	-15.421261608816687	3.42e-13	3.07e-7	8	-226.8540880261845	6.17e-12	0.634
4	-30.218412243368942	4.19e-13	2.4e-4	9	-2099.348399975197	4.55e-13	10.78
5	-50.022588052114280	4.19e-13	1.16e-3	10	-6250.161231409511	5.46e-12	27.07



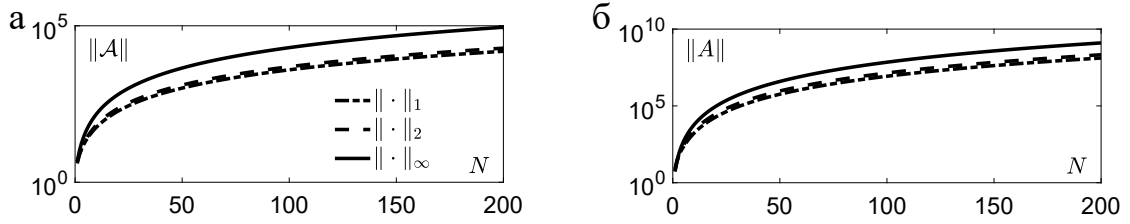
**Рис. III.3.** Значения обусловленностей и норм матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$ ,  $R_A$ , соответствующих условиям  $u'(-1) = 0$ ,  $u(1) = 0$ : а)  $\log_{10} N_A^{1,2,\infty}$ ; б)  $\log_{10} N_A^{1,2,\infty}$ ; в)  $\log_{10} N_{R_A}^{1,2,\infty}$ ; г)  $\log_{10} \text{cond}_{R_A}^{1,2,\infty}$

Переходя в (III.7), (III.8) к пределу при  $x \rightarrow x_i^{\text{ch}}$  и используя правило Лопиталья, находим элементы матриц, аппроксимирующих первые и вторые производные функций, имеющих произвольные краевые условия:

$$a_{ij} = \frac{\omega_j}{\omega_i(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})}, \quad a_{ij} = -\frac{(2\omega_i^2 - x_i^{\text{ch}}(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}}))\omega_j}{\omega_i^3(x_i^{\text{ch}} - x_j^{\text{ch}})^2}, \quad i, j = \overline{1, N}, \quad i \neq j,$$

$$n_i = x_i^{\text{ch}}/(2\omega_i^2), \quad \nu_i = ((1 - N^2)\omega_i^2 + 3(x_i^{\text{ch}})^2)/(3\omega_i^4), \quad i = \overline{1, N}.$$

Отметим, что матрица  $A$  в данном случае вырождена, её спектральное разложение также даёт вырожденную матрицу  $R_A$ , поэтому полином  $p_N$  может быть использован только для аппроксимации производных, стоящих в правой части уравнения. В заключение отметим несколько важных фактов.



**Рис. III.4.** Значения норм матриц  $\mathcal{A}$ ,  $A$ , соответствующих произвольным граничным условиям: а)  $\log_{10} N_A^{1,2,\infty}$ ; б)  $\log_{10} \tilde{N}_A^{1,2,\infty}$

**Замечание II.1.** Из приведённых формул следует, что нормы матриц первых производных от полиномов  $\tilde{p}_N^1$ , (1.41), и  $p_N$  растут пропорционально  $N^2$ ; а от полиномов  $\tilde{p}_N^2$ ,  $\tilde{p}_N^4$ ,  $\tilde{p}_N^5$  – пропорционально  $N^3$ . Нормы матриц вторых производных от полиномов  $\tilde{p}_N^1$ ,  $p_N$  растут пропорционально  $N^3$ ; а от полиномов  $\tilde{p}_N^2$ ,  $\tilde{p}_N^4$ ,  $\tilde{p}_N^5$  – пропорционально  $N^5$ .

**Замечание II.2.** Для расчёта производных, стоящих в правых частях дифференциальных уравнений, независимо от типа краевых условий можно использовать матрицы, соответствующие полиному  $p_N$ , поскольку при этом не возникает задачи поиска обратной матрицы. Значительным плюсом использования таких матриц является то, что их нормы растут наименее быстро.

**Замечание II.3.** При вычислениях значений производных по формулам (1.37), (1.38), (III.1)–(III.8) следует учитывать, что если  $|x - x_i^{\text{ch}}|$  мал, то возникает существенная погрешность, связанная с округлением действительных чисел в памяти ЭВМ. В ходе вычисления производной от полинома в точке  $x$  целесообразно рассмотреть 2 случая:

- 1) если  $|x - x_i^{\text{ch}}| > \varepsilon_D$ , то использовать формулы (1.37), (1.38), (III.1)–(III.8);
- 2) если  $|x - x_i^{\text{ch}}| \leq \varepsilon_D$ , то слагаемое, соответствующее  $x_i^{\text{ch}}$  в формулах (1.37), (1.38), (III.1)–(III.8), заменить на предельное значение этого слагаемого при  $x \rightarrow x_i^{\text{ch}}$ , определяемое величиной  $\mathbf{n}_i$  или  $\nu_i$ .

Достаточно точный результат может быть получен, если привести каждое слагаемое (1.37), (1.38), (III.1)–(III.8) к общему знаменателю и использовать значения  $\varepsilon_D = 10^{-8}$  при вычислениях первых производных и  $\varepsilon_D = 10^{-4}$  при вычислениях вторых производных. Для более точных расчётов следует проводить асимптотические разложения указанных слагаемых по малому параметру  $|x - x_i^{\text{ch}}|$ .

Приведём теперь формулы для аппроксимации операторов дифференцирования в задаче на окружности с условиями чётности или нечётности решения. Введём обозначения узлов  $\tilde{t}_j = \frac{2j-1}{2N}\pi$  и  $t_j = \frac{j}{N+1}\pi$ ,  $j = \overline{1, N}$ , и значений приближаемых функций и их производных  $u_j = u(\tilde{t}_j)$ ,  $(u_t)_j = u_t(\tilde{t}_j)$ ,  $(u_{tt})_j = u_{tt}(\tilde{t}_j)$  для чётной функции и  $u_j = u(t_j)$ ,  $(u_t)_j = u_t(t_j)$ ,  $(u_{tt})_j = u_{tt}(t_j)$  – для нечётной. Дифференцируя (1.18), (1.19) по  $t$  нужное число раз, используя правило Лопиталя и очевидные соотношения

$$\sin(Nt_j) = 0, \quad \cos(Nt_j) = (-1)^j, \quad \cos(N\tilde{t}_j) = 0, \quad \sin(N\tilde{t}_j) = (-1)^{j+1},$$

где  $j = \overline{1, N}$ , получаем

$$\left. \frac{ds_N^e(u, t)}{dt} \right|_{t=\tilde{t}_j} = \sum_{i=1, i \neq j}^N (-1)^{i+j-1} \sin \tilde{t}_i P(\tilde{t}_j, \tilde{t}_i) u_i + \mathbf{n}_i^e u_j, \quad (\text{III.9})$$

$$\left. \frac{ds_N^o(u, t)}{dt} \right|_{t=t_j} = \sum_{i=1, i \neq j}^N (-1)^{i+j-1} \sin t_i P(t_j, t_i) u_i + \mathbf{n}_i^o u_j, \quad (\text{III.10})$$

$$\left. \frac{d^2 s_N^e(u, t)}{dt^2} \right|_{t=\tilde{t}_j} = 2 \sum_{i=1, i \neq j}^N (-1)^{i+j-1} \sin \tilde{t}_i \sin \tilde{t}_j P^2(\tilde{t}_j, \tilde{t}_i) u_i + \nu_j^e u_j, \quad (\text{III.11})$$

$$\left. \frac{d^2 s_N^o(u, t)}{dt^2} \right|_{t=t_j} = 2 \sum_{i=1, i \neq j}^N (-1)^{i+j-1} \sin t_i \sin t_j P^2(t_j, t_i) u_i + \nu_j^o u_j, \quad (\text{III.12})$$

где  $P(t_j, t_i) = (\cos t_j - \cos t_i)^{-1}$ ,  $\mathbf{n}_i^e = -\text{ctg } \tilde{t}_i/2$ ,  $\mathbf{n}_i^o = -\text{ctg } t_i/2$ ,  
 $\nu_j^e = -\left(\frac{N^2}{3} + \frac{1}{6} - \frac{1}{2 \sin^2 \tilde{t}_j}\right)$ ,  $\nu_j^o = -\left(\frac{(N+1)^2}{3} + \frac{1}{6} - \frac{1}{2 \sin^2 t_j}\right)$ .

Введём обозначения:

$$\mathbf{a}_{ij}^e = (-1)^{i+j-1} \sin \tilde{t}_i P(\tilde{t}_j, \tilde{t}_i), \quad \mathbf{a}_{ij}^o = (-1)^{i+j-1} \sin t_i P(t_j, t_i),$$

$$a_{ij}^e = 2(-1)^{i+j-1} \sin \tilde{t}_i \sin \tilde{t}_j P^2(\tilde{t}_j, \tilde{t}_i), \quad a_{ij}^o = 2(-1)^{i+j-1} \sin t_i \sin t_j P^2(t_j, t_i),$$

где  $i, j = \overline{1, N}$ ,  $i \neq j$ , и сформируем  $N \times N$  матрицы

$$\mathcal{A}^e = \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1^e & \mathbf{a}_{21}^e & \dots & \mathbf{a}_{N1}^e \\ \mathbf{a}_{12}^e & \mathbf{n}_2^e & \dots & \mathbf{a}_{N2}^e \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \mathbf{a}_{1N}^e & \mathbf{a}_{2N}^e & \dots & \mathbf{n}_N^e \end{pmatrix}, \quad \mathcal{A}^o = \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1^o & \mathbf{a}_{21}^o & \dots & \mathbf{a}_{N1}^o \\ \mathbf{a}_{12}^o & \mathbf{n}_2^o & \dots & \mathbf{a}_{N2}^o \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \mathbf{a}_{1N}^o & \mathbf{a}_{2N}^o & \dots & \mathbf{n}_N^o \end{pmatrix},$$

аппроксимирующие первые производные, и симметричные матрицы

$$A^e = \begin{pmatrix} \nu_1^e & a_{21}^e & \dots & a_{N1}^e \\ a_{12}^e & \nu_2^e & \dots & a_{N2}^e \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ a_{1N}^e & a_{2N}^e & \dots & \nu_N^e \end{pmatrix} = (A^e)^T, \quad A^o = \begin{pmatrix} \nu_1^o & a_{21}^o & \dots & a_{N1}^o \\ a_{12}^o & \nu_2^o & \dots & a_{N2}^o \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ a_{1N}^o & a_{2N}^o & \dots & \nu_N^o \end{pmatrix} = (A^o)^T,$$

аппроксимирующие вторые производные.

Характер роста норм матриц  $\mathcal{A}^{e,o}$ ,  $A^{e,o}$  и  $R_{A^{e,o}}$  при увеличении  $N$  совпадает со случаем применения полинома с ядром Дирихле, см. рис. 1.8. В силу симметрии  $A^{e,o}$ , матрицы их собственных векторов  $R_{A^{e,o}}$  являются симметричными и их обусловленность равна единице. Собственные числа  $A^{e,o} - d_{A^{e,o}}^j$  — представлены в табл. 35 вместе со значениями их отклонений  $\text{dev}_j^{e,o}$  от собственных чисел задач Штурма–Лиувилля на отрезке  $[0, \pi]$  с условиями Дирихле и Неймана соответственно.

**Таблица 35.** Собственные числа матриц  $A^o$ ,  $A^e$  при  $N = 9$

$j$	$d_{A^o}^j$	$\text{dev}_j^o$	$d_{A^e}^j$	$\text{dev}_j^e$
9	64	0	$81 - 10^{-15}$	$10^{-15}$
8	$49 - 4 \times 10^{-14}$	$4 \times 10^{-14}$	$64 + 4 \times 10^{-14}$	$4 \times 10^{-14}$
7	$36 + 10^{-14}$	$10^{-14}$	49	0
6	$25 + 7 \times 10^{-15}$	$7 \times 10^{-15}$	36	0
5	$16 + 7 \times 10^{-15}$	$7 \times 10^{-15}$	$25 - 4 \times 10^{-14}$	$4 \times 10^{-14}$
4	9	0	$16 - 4 \times 10^{-15}$	$4 \times 10^{-15}$
3	$2 + 2 \times 10^{-15}$	$2 \times 10^{-15}$	$9 - \times 10^{-15}$	$10^{-15}$
2	$1 + 2 \times 10^{-15}$	$2 \times 10^{-15}$	$4 - 2 \times 10^{-14}$	$2 \times 10^{-14}$
1	0	0	$1 - 10^{-15}$	$10^{-15}$

При использовании дробно-рациональных интерполяций (1.29) также можно получить матрицы, аппроксимирующие производные. Формулы для элементов этих матриц описаны после (1.47). Применение этих формул с выражениями для  $\zeta_j^*(x)$ ,  $\zeta_{\pm 1}(x)$ , заданными в § 1.2 для соответствующих типов граничных условий, не вызывает затруднений за исключением вычисления предельных выражений  $D^{(1)}(x_i, x_0)$ ,  $D^{(2)}(x_i, x_0)$ ,  $D^{(1)}(x_i, x_{N+1})$ ,  $D^{(2)}(x_i, x_{N+1})$ ,  $i = \overline{0, N+1}$ , для условий типов  $2_r$ – $5_r$ , содержащих особенности. Приведём окончательные формулы для этих типов граничных условий:

3<sub>r</sub>. Для смешанных краевых условий  $\widehat{\alpha}u(1) + \widehat{\beta}u'(1) = 0$ ,  $\widehat{\gamma}u(-1) + \widehat{\theta}u'(-1) = 0$ ,  $\widehat{\beta} \neq 0$ ,  $\widehat{\theta} \neq 0$ :

$$\zeta_{\pm 1}(x) = \frac{(x \pm 1)^2}{4\mathfrak{D}_N(x)} \sum_{j=1}^N \omega_j \frac{x_j[\kappa_{\pm 1}(x \mp 1) \pm x - 2] - 2x \pm 3 + \kappa_{\pm 1}(1 \mp x)}{(1 \mp x_j)^2},$$

где  $\kappa_{+1} = \widehat{\alpha}/\widehat{\beta}$ ,  $\kappa_{-1} = \widehat{\gamma}/\widehat{\theta}$ ,  $x_j = g(x_j^{\text{ch}})$ ,  $g(x)$  – отображение, удовлетворяющее условиям теоремы 1.1.

Для элементов матриц, аппроксимирующих первую производную, имеем

$$D^{(1)}(x_i, x_0) = \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta'_{-1}(x) = \frac{(x_i - 1)^2}{4\omega_i} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1 + x_j)^2} \left[ x_j(x_i + 2) + 2x_i + 3 - b_s(1 + x_j)(1 + x_i) \right], \quad i = \overline{1, N},$$

$$D^{(1)}(x_i, x_{N+1}) = \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta'_{+1}(x) = -\frac{(x_i + 1)^2}{4\omega_i} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1 - x_j)^2} \left[ x_j(x_i - 2) - 2x_i + 3 + e_s(x_j - 1)(x_i - 1) \right], \quad i = \overline{1, N},$$

$$D^{(1)}(x_0, x_0) = b_s, \quad D^{(1)}(x_0, x_i) = 0 \quad \text{при } i = \overline{1, N+1},$$

$$D^{(1)}(x_{N+1}, x_{N+1}) = e_s, \quad D^{(1)}(x_{N+1}, x_i) = 0 \quad \text{при } i = \overline{0, N}.$$

Для элементов матриц, аппроксимирующих вторую производную, имеем

$$\begin{aligned}
D^{(2)}(x_i, x_0) &= \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta_{-1}''(x) = \\
&= \frac{1}{2\omega_i} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1+x_j)^2} \left\{ \frac{V_i(x_i-1)^2}{\omega_i} (x_j(x_i+2) + 2x_i + 3 - b_s(x_i+1)(x_j+1)) - \right. \\
&\quad \left. - (3x_i^2(x_j+2) - 2x_i - 4 - 3x_j - b_s(x_j+1)[3x_i^2 - 2x_i - 1]) \right\}, \quad i = \overline{1, N},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D^{(2)}(x_0, x_0) &= \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{\gamma_{-1}(1+x_j)^2} \left\{ \frac{3x_j+7}{2} + 2(1+x_j) \left[ \frac{\delta_{-1}}{\gamma_{-1}} - \left( \frac{\theta_{-1}}{\gamma_{-1}} \right)^2 \right] - \right. \\
&\quad \left. - \frac{2\theta_{-1}}{\gamma_{-1}} + 2b_s(1+x_j) \frac{\theta_{-1} - \gamma_{-1}}{\gamma_{-1}} \right\},
\end{aligned}$$

$$D^{(2)}(x_{N+1}, x_0) = - \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{\gamma_{+1}(1+x_j)^2} [(3x_j+5)/2 + b_s(x_j+1)],$$

$$\begin{aligned}
D^{(2)}(x_i, x_{N+1}) &= \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta_{+1}''(x) = \\
&= \frac{1}{2\omega_i} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1-x_j)^2} \left\{ - \frac{V_i(x_i+1)^2}{\omega_i} (x_j(x_i-2) - 2x_i + 3 + e_s(x_i-1)(x_j-1)) + \right. \\
&\quad \left. + (3x_i^2(x_j-2) - 2x_i + 4 - 3x_j + e_s(x_j-1)[3x_i^2 + 2x_i - 1]) \right\}, \quad i = \overline{1, N},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D^{(2)}(x_{N+1}, x_{N+1}) &= \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{\gamma_{+1}(1-x_j)^2} \left\{ \frac{3x_j-7}{2} + 2(1-x_j) \left[ \left( \frac{\theta_{+1}}{\gamma_{+1}} \right)^2 - \frac{\theta_{+1}}{\gamma_{+1}} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \frac{2\theta_{+1}}{\gamma_{+1}} + 2e_s(x_j-1) \frac{\theta_{+1} + \gamma_{+1}}{\gamma_{+1}} \right\},
\end{aligned}$$

$$D^{(2)}(x_0, x_{N+1}) = \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{\gamma_{-1}(1-x_j)^2} [(5-3x_j)/2 + e_s(1-x_j)].$$

Здесь

$$\gamma_{\pm 1} = \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{\pm 1 - x_j}, \quad \theta_{\pm 1} = \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(\pm 1 - x_j)^2}, \quad \delta_{\pm 1} = \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(\pm 1 - x_j)^3},$$

$$V_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{\omega_j}{x_i - x_j}, \quad b_s = \frac{\kappa_{-1}L}{2}, \quad e_s = \frac{\kappa_{+1}L}{2},$$

$L$  – длина отрезка, на котором строится приближение.

Формулы для условий Неймана,  $2_r$ , получаются из формул  $3_r$ , приведённых выше, подстановкой  $\kappa_{+1} = \kappa_{-1} = 0$ .

$4_r$ . Условия Дирихле и смешанные условия  $u(-1) = 0$ ,  $\widehat{\alpha}u(1) + \widehat{\beta}u'(1) = 0$ :

$$\zeta_{-1}(x) \equiv 0, \quad \zeta_{+1}(x) = \frac{x+1}{4\mathfrak{D}_N(x)} \sum_{j=1}^N \omega_j \frac{x_j(x-3) - 3x + 5 + 2\kappa_{+1}(1-x)(1-x_j)}{(1-x_j)^2}.$$

Для элементов матриц, аппроксимирующих первую производную, имеем

$$D^{(1)}(x_i, x_{N+1}) = \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta'_{+1}(x) = -\frac{x_i + 1}{4\omega_i} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1-x_j)^2} \left[ x_j(x_i - 3) - 3x_i + 5 - 2e_s(1-x_j)(x_i - 1) \right], \quad i = \overline{1, N},$$

$$D^{(1)}(x_{N+1}, x_{N+1}) = e_s, \quad D^{(1)}(x_{N+1}, x_i) = 0 \text{ при } i = \overline{0, N}.$$

Для элементов матриц, аппроксимирующих вторую производную, имеем

$$D^{(2)}(x_i, x_{N+1}) = \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta''_{+1}(x) = \frac{1}{2\omega_i} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1-x_j)^2} \left\{ -\frac{V_i(x_i + 1)}{\omega_i} [x_j(x_i - 3) - 3x_i + 5 + 2e_s(1-x_i)(1-x_j)] + (2x_j(x_i - 1) - 6x_i + 2 + 4e_s(x_j - 1)x_i) \right\}, \quad i = \overline{1, N},$$

$$D^{(2)}(x_{N+1}, x_{N+1}) = \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{\gamma_{+1}(1-x_j)^2} \left\{ \frac{x_j - 3}{2} + 2(1-x_j) \left[ \left( \frac{\theta_{+1}}{\gamma_{+1}} \right)^2 - \frac{\delta_{+1}}{\gamma_{+1}} \right] - \frac{2\theta_{+1}}{\gamma_{+1}} + e_s(x_j - 1) \frac{2\theta_{+1} + \gamma_{+1}}{\gamma_{+1}} \right\},$$

5<sub>r</sub>. Условия Дирихле и смешанные условия  $u(1) = 0$ ,  $\widehat{\gamma}u(-1) + \widehat{\theta}u'(-1) = 0$ :

$$\zeta_{+1}(x) \equiv 0, \quad \zeta_{-1}(x) = \frac{x-1}{4\mathfrak{D}_N(x)} \sum_{j=1}^N \omega_j \frac{x_j(x+3) + 3x + 5 - 2\kappa_{-1}(1+x)(1+x_j)}{(1+x_j)^2}.$$

Для элементов матриц, аппроксимирующих первую производную, имеем

$$D^{(1)}(x_i, x_0) = \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta'_{-1}(x) = \frac{1-x_i}{4\omega_i} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1+x_j)^2} \left[ x_j(x_i + 3) + 3x_i + 5 - 2b_s(1+x_j)(1+x_i) \right], \quad i = \overline{1, N},$$

$$D^{(1)}(x_0, x_0) = b_s, \quad D^{(1)}(x_0, x_i) = 0 \text{ при } i = \overline{1, N+1}.$$

Для элементов матриц, аппроксимирующих вторую производную, имеем

$$D^{(2)}(x_i, x_0) = \lim_{x \rightarrow x_i} \zeta''_{-1}(x) = \frac{1}{2\omega_i} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1+x_j)^2} \left\{ \frac{V_i(x_i - 1)}{\omega_i} (x_j(x_i + 3) + 3x_i + 5 + 2b_s(x_i + 1)(x_j + 1)) + (2x_j(x_i + 1) + 6x_i + 2 - 4b_s x_i(x_j + 1)) \right\}, \quad i = \overline{1, N},$$

$$D^{(2)}(x_0, x_0) = \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{\gamma_{-1}(1+x_j)^2} \left\{ \frac{x_j + 3}{2} + 2(1+x_j) \left[ \frac{\delta_{-1}}{\gamma_{-1}} - \left( \frac{\theta_{-1}}{\gamma_{-1}} \right)^2 \right] - \frac{2\theta_{-1}}{\gamma_{-1}} + b_s(1+x_j) \frac{2\theta_{-1} - \gamma_{-1}}{\gamma_{-1}} \right\}.$$



## Приложение IV

# Идентификация параметров обобщённой мезоскопической модели

Проведён анализ литературы, содержащей данные о реологических и термомеханических свойствах полимерных растворов с различной электропроводностью, а также данные об основных параметрах современных технологий аддитивного производства изделий из электропроводящих полимерных материалов. На основе приведённых данных определены значения основных параметров разработанной обобщённой мезоскопической модели течения полимерной жидкости (табл. 36).

К реологическим свойствам полимерных растворов и расплавов относятся, прежде всего, значения сдвиговой вязкости и времени релаксации, а также их зависимости от скоростей сдвига, температуры и концентрации раствора. Термомеханические свойства включают температуропроводность, теплоёмкость, коэффициент температурного расширения, энергию активации. К прочим свойствам, интересующим исследователей, относятся магнитная восприимчивость, вольт-амперные характеристики, максимальная плотность заряда, мобильность электронов.

Для изготовления электропроводящих устройств используются полимерные полупроводники, такие как полиэтилен гликоль, полиакриламид и др.; полимерные материалы с высокой электропроводностью (самым распространённым является поли(3,4-этилендиокситиофен): полистирол сульфонат, известный также как PEDOT:PSS).

В литературе также имеется информация о механических характеристиках печатных устройств – характерные размеры дюз и капель чернил, значения скоростей и потоков жидкости в дюзе, максимального разрешения при печати, давления в дюзах и т. п. Наиболее распространённые технологии печати – пьезоэлектрическая и термоструйная.

Все указанные данные были использованы для идентификации параметров разработанной модели для расчёта течений PEDOT:PSS (см. табл. 36). Значения феноменологических параметров  $\beta$  и  $\bar{k}$  модели Покровского–Виноградова были исследованы в [36, 47]. Установлено, что для многих линейных полимеров  $\beta \in [0, 0.5]$ ,  $\bar{k} = \beta$  или  $\bar{k} = 1.2\beta$ .

**Таблица 36.** Значения параметров модели (3.1)–(3.5) для расчёта течений в каналах печатающих устройств

Название параметра	Обозначение в модели	Размерность в системе СИ	Ссылка	Диапазон значений	Значение для расчётов
Характерная скорость течения	$u_H$	$\frac{\text{м}}{\text{с}}$	[313, 314]	0.04–1 $\frac{\text{м}}{\text{с}}$ . В отдельных случаях 3–5 $\frac{\text{м}}{\text{с}}$	1 $\frac{\text{м}}{\text{с}}$
Характерная длина (размер сечения)	$l$	микрон	[313]	0.1–250 микрон	100 микрон
Характерная температура	$T_0$	К	[261]	273–700 К (температура спекания)	293.15 К (20° С)
Характерная напряжённость магнитного поля	$H_0$	$\frac{\text{А}}{\text{м}}$	—	Рассчитано по параметрам индукционных катушек	$10^4 \frac{\text{А}}{\text{м}}$
Магнитная проницаемость (PEDOT:PSS)	$\mu$	безразмерна	[315]	$1 + 2.5 \times 10^{-4} - 1 + 3.7 \times 10^{-4}$	$1 + 3 \times 10^{-4}$
Электропроводность раствора PEDOT:PSS	$\sigma_e$	$\frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}}$	[261, 316]	$800 - 3 \times 10^4 \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}}$	$10^4 \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}}$
Начальные значения сдвиговой вязкости проводящего раствора PEDOT:PSS	$\eta_0^*$	Па·с	[317, 318]	$1.3 \times 10^{-3} - 3 \times 10^{-1}$ Па·с	$10^{-2}$ Па·с
Начальные значения времени релаксации проводящего раствора PEDOT:PSS	$\tau_0^*$	с	[314]	$6 \times 10^{-6} - 1.2 \times 10^{-4}$ с	$10^{-5}$ с
Безразмерная энергия активации	$\bar{E}_A$	безразмерна	[319]	0.614–6.14	0.614

Коэффициент теплопроводности (для расчёта чисел Прандтля и Релея)	$c_T$	$\frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$	[320]	$0.3-0.37 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$	$0.37 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$
Удельная теплоёмкость (для расчёта чисел Прандтля и Релея)	$c_P$	$\frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$	[320]	$2000 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$ (твёрдый полимер) – $4180 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$ (водный раствор малой концентрации)	$4000 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$
Коэффициент температурного расширения (для расчёта числа Релея)	$\beta$	$\text{К}^{-1}$	[321]	$5 \times 10^{-5} \text{К}^{-1}$ (твёрдый полимер) – $6 \times 10^{-4} \text{К}^{-1}$ (водный раствор малой концентрации)	$5 \times 10^{-4} \text{К}^{-1}$
Перепад давления в канале	$\Delta P$	Па	[261, 313]	$6.9 \times 10^4 - 6.9 \times 10^5$ Па	$10^5$ Па
Безразмерный перепад при условии, что длина дюзы в 100 раз больше диаметра	$P_d$	безразмерен	[261, 313]	0.69–6.9	1
Число Рейнольдса для растворов PEDOT:PSS	Re	безразмерен	*	10	10
Число Вайсенберга для растворов PEDOT:PSS	W	безразмерен	*	0.06–1.2	0.1
Число Релея для растворов PEDOT:PSS	Ra	безразмерен	*	1.06	1.06

Число Прандтля для растворов PEDOT:PSS	Pr	безразмерен	*	108.1	108.1
Число Грасгофа для растворов PEDOT:PSS	Ga	безразмерен	*	$9.81 \times 10^{-3}$	$9.81 \times 10^{-3}$
Число Фруда для растворов PEDOT:PSS	Fr	безразмерен	*	$\frac{1}{\sqrt{9.81 \times 10^{-4}}}$	31.9
Характеристика ориентации макромолекулярного клубка	$\beta$	безразмерен	[36, 47]	0–0.5	0.1
Характеристика размера макромолекулярного клубка	$\bar{k}$	безразмерен	[36, 47]	$\bar{k} \in [\beta, 1.2\beta]$	$\bar{k} = 1.2\beta$

\* Для расчёта указанных чисел были использованы формулы:

$$Re = \frac{\rho u_H l}{\eta_0^*}, \quad W = \frac{\tau_0^* u_H}{l}, \quad Ra = \frac{g_a b \Delta T l^3 c_P \rho^2}{\eta_0^* c_T}, \quad Pr = \frac{\eta_0^* c_P}{c_T}, \quad Ga = \frac{Ra}{Pr}, \quad Fr = \frac{u_H}{\sqrt{g_a l}},$$

где  $\Delta T = 200$  К – характерная разность температур между стенками и жидкостью, величина  $g_a = 9.81 \frac{M}{c^2}$  – ускорение свободного падения,  $\rho = 1000 \frac{KГ}{M^3}$  – плотность жидкости. Для расчёта относительного безразмерного перепада давления  $P_d$  (см. (3.10)) полагалось, что длина дюзы в 100 раз больше характерного размера сечения  $l$ :  $h = 100$ , см. также рис. 3.1.