

# Численный анализ установившихся течений полимерной жидкости типа Пуазейля

к. ф.-м. н. Семисалов Борис Владимирович

с. н. с. лаборатории вычислительных проблем задач мат. физики  
Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН

доц. кафедры диф. уравнений ММФ  
Новосибирского государственного университета

e-mail: [vibis@ngs.ru](mailto:vibis@ngs.ru)

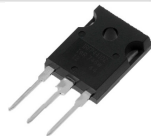
# Содержание доклада

- 1 Мезоскопическая модель течения растворов и расплавов полимерных материалов. Стационарные течения пита Пуазейля.
- 2 Нелокальный метод без насыщения решения краевых задач для нелинейных уравнений эллиптического типа.
- 3 Обобщение алгоритма на случай произвольной размерности. Теоремы об аппроксимации, устойчивости и оценка вычислительных затрат.
- 4 Приложение метода для численного анализа течений растворов и расплавов полимеров в технологиях 3D печати.
- 5 Верификация полученных результатов при сравнении с методом коллокаций и наименьших квадратов (МКНК) и методом конечных элементов (МКЭ).

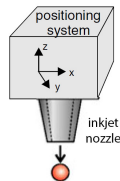
# Мотивация создания новых численных методов

Необходимость решения нелинейных краевых задач высокой вычислительной сложности с контролем погрешностей и минимальными вычислительными затратами

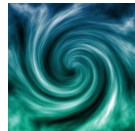
**Физика полупроводников.** Диссертация Б.В. Семисалова  
«Математическое моделирование в задачах переноса заряда в полупроводниковых кремниевых устройствах» + проект РФФИ 10-01-00320-а (рук. А. М. Блохин)

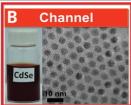


**Механика полимерной жидкости.** Проекты РНФ 17-71-10135, 20-71-00071 «**Численный анализ** динамики растворов и расплавов полимеров в технологиях микро- и наноэкструзии, импульсной печати и напыления» (рук. Б. В. Семисалов)

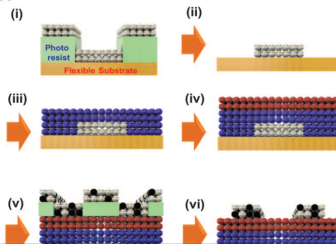
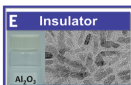
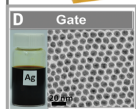
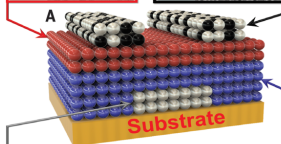


**Волновая турбулентность** Проект Simons Foundation 2019–2022.  
Анализ эволюции спектра уравнения Гросса–Питаевского, автомодельные режимы и конденсация (рук. С. В. Назаренко).  
Новый **алгоритм численного решения кинетического уравнения** для спектра. (Б. В. Семисалов)



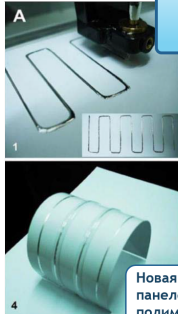


**ПРОБЛЕМА:** расчёт и оптимизация параметров новых материалов на полимерной основе и технологических процессов для достижения требуемых характеристик электронных устройств, производимых методом 3D печати.

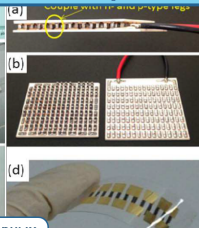


Печать транзисторов полимерными чернилами с нанокристаллами [Choi, 2016]

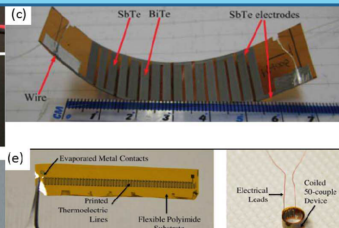
**РЕШЕНИЕ:** разработка математических моделей и численных методов, позволяющих определить требуемые параметры с высокой степенью достоверности и точности.



Новая технология печати сенсорных панелей, использующая металлы и полимеры [Zheng et al. 2013]



Производство LED экранов и термоэлектрических матриц на гибкой подложке методом 3D печати [Orrill, LeBlanc 2017]





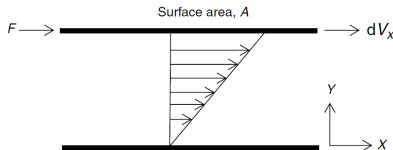
# О моделях динамики полимерных сред

# Феноменологические модели [Chhabra, 2007]

Ньютоновские жидкости. Связь напряжений и скоростей сдвига:

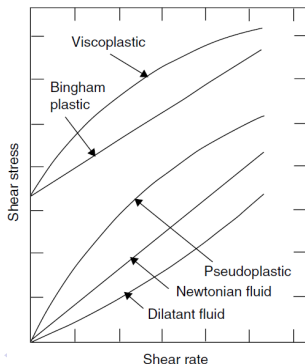
2D  $\frac{F}{A} = \sigma_{xy} = \eta \left( -\frac{dv_x}{dy} \right)$ ,  $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$  – скорость,  $\eta = \eta_0$  (Pa·s) – динам. вязкость.

3D в плоскости  $y$   $\sigma_{xy} = -\eta \left( \frac{dv_x}{dy} + \frac{dv_y}{dx} \right)$ ,  
 $\sigma_{yz} = -\eta \left( \frac{dv_z}{dy} + \frac{dv_y}{dz} \right)$ ,  $\sigma_{yy} = -2\eta \frac{dv_y}{dy} + \frac{2}{3} \eta \text{div} \vec{v}$ .



Неньютоновская жидкость

- Степенные модели:  $\sigma_{xy} = -K \left( \frac{dv_x}{dy} \right)^\gamma$ ,  $K, \gamma > 0$  определяются по измерениям в реометре.
- Модели вязко-пластичных течений:  
 $\frac{dv_x}{dy} = 0$  ( $|\sigma_{xy}| \leq |\sigma_0|$ ),  $|\sigma_{xy}| = |\sigma_0| + K \left( \frac{dv_x}{dy} \right)^\gamma$ ,  
( $|\sigma_{xy}| > |\sigma_0|$ ).
- Модель Кассона:  
 $\frac{dv_x}{dy} = 0$  ( $|\sigma_{xy}| \leq |\sigma_0|$ ),  $|\sigma_{xy}|^\gamma = |\sigma_0|^\gamma + K \left( \frac{dv_x}{dy} \right)^\gamma$ ,  
( $|\sigma_{xy}| > |\sigma_0|$ ).
- ... и множество других моделей.



# Микроструктурные модели

основаны на подходах статистической физики

Исходные положения, [Rouse, 1953], [Zimm, 1956], [De Gennes, 1971], [Bird, 1987]

- Молекула есть система из  $\hat{N}$  частиц и связей между ними (вектора  $\vec{r}_n$ ,  $n = 1, \dots, \hat{N}$ ).
- Каждая модель определяет принципы взаимодействия частиц между собой и с внешней средой.
- Динамика частиц, как правило, представляет Броуновское движение и описывается уравнением Ланжевена (1) или Фоккера–Планка для плотности вероятности.
- Переход на макроуровень — континуализация при  $\hat{N} \rightarrow \infty$  и осреднение.

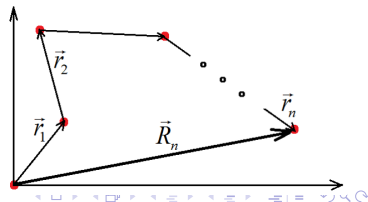
$$m\vec{a} = m \frac{d^2 \vec{R}_n}{dt^2} = \vec{\Phi}(\vec{R}_n) - \vec{F}_{res}(\vec{v}_n) + \vec{f}_n(t), \quad \vec{v}_n = \frac{d\vec{R}_n}{dt} \quad (1)$$

$\vec{R}_n = \vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \dots + \vec{r}_n$ ,  $m$  — масса частицы,

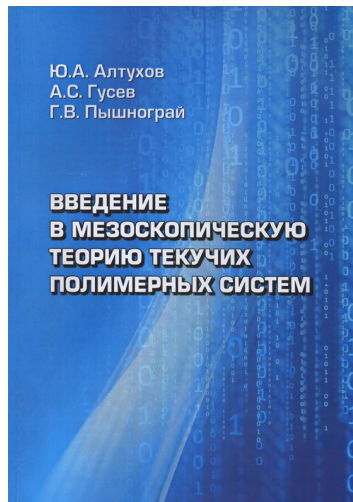
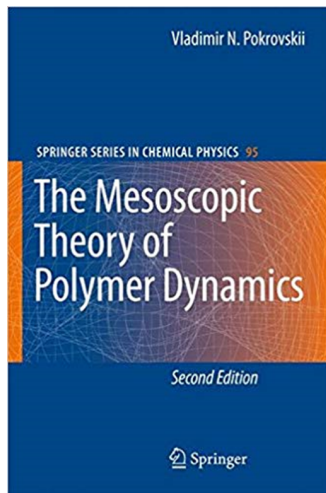
$\vec{\Phi}(\vec{R}_n)$  — сила воздействия других частиц,

$\vec{F}_{res}(\vec{v}_n)$  — сопротивление среды,

$\vec{f}_n(t)$  — случайный процесс, описывающий столкновения с другими частицами.



# Мезоскопические модели



# Обобщённая модель Покровского–Виноградова

Уравнения мезоскопической реологической модели Покровского–Виноградова, описывающие неизотермическое течение несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости, в безразмерной форме в декартовой системе координат [Блохин, Семисалов, 2020]:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} u &= 0, \quad (u)_t = -\nabla P + \frac{1}{\operatorname{Re}} \operatorname{div}(Y\Pi) + \operatorname{Ga}(Y-1)e_1, \\ R \quad (a_{11})_t - 2A_1u_x - 2a_{12}u_y - 2a_{13}u_z + \mathfrak{L}_{11} &= 0, \\ H \quad (a_{22})_t - 2a_{12}v_x - 2A_2v_y - 2a_{23}v_z + \mathfrak{L}_{22} &= 0, \\ E \quad (a_{33})_t - 2a_{13}w_x - 2a_{23}w_y - 2A_3w_z + \mathfrak{L}_{33} &= 0, \\ O \quad (a_{12})_t + w_za_{12} - A_1v_x - A_2u_y - v_za_{13} - u_za_{23} + \mathfrak{L}_{12} &= 0, \\ L \quad (a_{13})_t - w_ya_{12} - A_1w_x - A_3u_z + v_ya_{13} - u_ya_{23} + \mathfrak{L}_{13} &= 0, \\ . \quad (a_{23})_t + u_xa_{23} - A_2w_y - A_3v_z - w_xa_{12} - v_xa_{13} + \mathfrak{L}_{23} &= 0, \\ \operatorname{Pr}(Y)_t &= (\Delta Y + AY\Phi). \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь  $(\cdot)_t = \frac{\partial}{\partial t} + (u, \nabla)$ ,  $e_1 = (1, 0, 0)^T$ ,  $a_{ij}$  – компоненты симметрического тензора анизотропии  $\Pi$  второго ранга,  $W$  – число Вайсенберга;  $A_i = a_{ii} + W^{-1}$ ;  $P$  – давление.

# Описание параметров модели

$Y = T/T_0$ ,  $T$  и  $T_0$  – температуры жидкости и внешней среды;

$$\mathcal{E}_{ij} = \frac{K_I a_{ij} + \beta(a_i, a_j)}{\bar{\tau}_0(Y)}; \quad \bar{\tau}_0 = \frac{J(Y)}{Y}, \quad J(Y) = \exp\left(-\bar{E}_A \frac{Y-1}{Y}\right);$$

$K_I = W^{-1} + \bar{k}I/3$ ,  $\bar{k} = k - \beta$ ,  $I = (a_{11} + a_{22} + a_{33})$  – первый инвариант  $\Pi$ ;

$k, \beta$  ( $0 < \beta < 1$ ) – феноменологические параметры,  $\beta$  учитывает ориентацию макромолекул полимера,  $k$  – их размеры.

$Re = \frac{\rho u_H l}{\eta_0^*}$  и  $W = \frac{\tau_0^* u_H}{I}$  – числа Рейнольдса и Вайсенберга ( $\rho = \text{const}$ );

$\eta_0^*, \tau_0^*$  – начальные значения сдвиговой вязкости и времени релаксации;

$l, u_H$  – характерная длина и скорость;

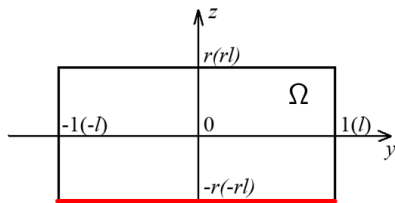
$Ra$  and  $Pr$  – числа Рэлея и Прандтля,  $Ga = Ra/Pr$ ;

$\bar{E}_A = E_A/T_0$ ,  $E_A$  – энергия активации;

$A$  – константа диссипации;  $\Phi$  – диссипативная функция [Shibata, 2016]:

$$\Phi = \Pi : \nabla \mathbf{u} = \sum_{i,j=1}^3 a_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$$

# Поиск стационарного течения типа Пуазейля



Граничные условия для скорости имеют вид:

$$u = 0, (y, z) \in \partial\Omega, x \in \mathbb{R};$$

Условия для температуры имеют вид

$$Y = 1 + \bar{\theta}, z = -r, |y| < 1,$$

$$Y = 1, z = r, |y| < 1,$$

$$Y_y = 0, |z| < r, y = \pm 1.$$

Будем искать частные решения системы (2) в следующем виде (течения типа Пуазейля):

$$\begin{cases} v = w \equiv 0, u = \hat{u}(y, z), P = \hat{P}(x, y, z) = \mathcal{P}(y, z) - \hat{A}x, \\ a_{ij} = \hat{a}_{ij}(y, z), i, j = 1, 2, 3, Y = \hat{Y}(y, z). \end{cases} \quad (3)$$

Ищутся стационарные течения под действием постоянного перепада давления вдоль оси канала  $y = z = 0$ :

$$\hat{P}_x = -\hat{A}(=\text{const}), \quad \hat{A} = \hat{\Delta P}/(\rho u_H^2 h), \quad (4)$$

где  $(-\frac{\hat{\Delta P}}{\rho u_H^2})$  – безразмерный перепад давления на отрезке по оси  $x$  длины  $h$ .

# Система разрешающих уравнений

Случай  $\beta \ll 1$  был исследован в [Блохин, Семисалов, Шевченко, 2016] с помощью асимптотических разложений.

В общем случае ( $0 < \beta < 1$ ) после преобразований из (2) получаем

$$\hat{a}u_{yy} - 2\hat{b}u_{yz} + \hat{c}u_{zz} + \hat{d}u_y + \hat{e}u_z = -\hat{D}\hat{K}, \quad u = 0 \text{ for } (y, z) \in \partial\Omega, \quad (5)$$

$$\Delta Y + AY\lambda\mu = 0, \quad Y \text{ is given for } (y, z) \in \partial\Omega, \quad (6)$$

где

$$\hat{a} = 1 - u_y^2 \mathcal{L}, \quad \hat{c} = 1 - u_z^2 \mathcal{L}, \quad \hat{b} = u_y u_z \mathcal{L}, \quad \mathcal{L} = \frac{1 - \Delta}{\lambda^2}, \quad \Delta = \frac{\Lambda}{\mu} \mu_\Lambda,$$

$$\hat{d} = (1 - \Delta) \frac{Y_y}{Y} - \Delta \bar{E}_A \frac{Y_y}{Y^2}, \quad \hat{e} = (1 - \Delta) \frac{Y_z}{Y} - \Delta \bar{E}_A \frac{Y_z}{Y^2}, \quad \hat{D} = -\text{Re}[\hat{A} + \text{Ga}(\hat{Y} - 1)],$$

$$\sigma = a_{22} + a_{33}, \quad \mu = \sqrt{a_{12}^2 + a_{13}^2}, \quad \hat{K}\mu = \Lambda := \bar{\tau}_0 \lambda, \quad \lambda = \sqrt{u_y^2 + u_z^2}.$$

Если  $(\hat{a}\hat{c} - \hat{b}^2) > 0$ , то уравнение (5) имеет эллиптический тип.

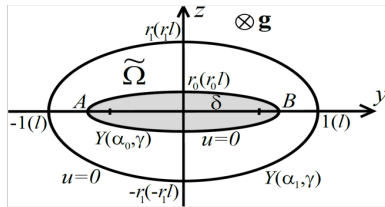


# Течения в канале с эллиптическим сечением

Переходим в эллиптическую систему координат  $\alpha_0 \leq \alpha \leq \alpha_1$ ,  $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ :

$$y = \delta \cosh \alpha \sin \gamma, \quad z = \delta \sinh \alpha \cos \gamma,$$

$$\delta = \sqrt{1 - r^2} \quad (2\delta - \text{фокусное расстояние}).$$



От уравнений

$$\hat{a}u_{yy} - 2\hat{b}u_{yz} + \hat{c}u_{zz} + \hat{d}u_y + \hat{e}u_z = -\hat{D}\hat{K}, \quad \Delta_{y,z}Y + AY\lambda\mu = 0$$

переходим к

$$\tilde{a}u_{\alpha\alpha} - 2\tilde{b}u_{\alpha\gamma} + \tilde{c}u_{\gamma\gamma} + \tilde{d}u_{\alpha} + \tilde{e}u_{\gamma} = -\tilde{D}\hat{K}, \quad Y_{\alpha\alpha} + Y_{\gamma\gamma} + (Ag\mu\sqrt{u_{\alpha}^2 + u_{\gamma}^2})Y = 0,$$

где

$$\tilde{a} = \hat{a}R^2 + \hat{c}Q^2 - 2\hat{b}RQ = \frac{1}{g^2} - \frac{\hat{u}_{\alpha}^2}{g^4}L,$$

$$\tilde{c} = \hat{a}Q^2 + \hat{c}R^2 + 2\hat{b}RQ = \frac{1}{g^2} - \frac{\hat{u}_{\gamma}^2}{g^4}L,$$

$$\tilde{b} = \hat{b}(Q^2 - R^2) + RQ(\hat{c} - \hat{a}) = \frac{\hat{u}_{\alpha}\hat{u}_{\gamma}}{g^4}L,$$

$$\tilde{d} = \frac{\mathcal{L}}{g^2}[(R_{\gamma}R + R_{\alpha}Q)(u_{\alpha}^2 - u_{\gamma}^2) + 2(R_{\gamma}R + R_{\alpha}Q)u_{\alpha}u_{\gamma}] + \frac{(1 - \Psi)Y - \Psi}{(Yg)^2}Y_{\alpha},$$

$$\tilde{e} = \frac{\mathcal{L}}{g^2}[(R_{\gamma}Q - R_{\alpha}R)(u_{\alpha}^2 - u_{\gamma}^2) - 2(R_{\gamma}Q - R_{\alpha}R)u_{\alpha}u_{\gamma}] + \frac{(1 - \Psi)Y - \Psi}{(Yg)^2}Y_{\gamma},$$

$$\text{Здесь } R = \frac{y_{\alpha}}{y_{\alpha}^2 + y_{\gamma}^2} = \frac{\delta \sinh \alpha \sin \gamma}{g^2}, \quad Q = \frac{y_{\gamma}}{y_{\alpha}^2 + y_{\gamma}^2} = \frac{\delta \cosh \alpha \cos \gamma}{g^2}, \quad g^2 = \delta^2(\sinh^2 \alpha + \cos^2 \gamma).$$

# Нелокальный метод без насыщения (НМБН) для решения краевых задач

# Нелинейное уравнение эллиптического типа

Рассмотрим краевую задачу для уравнения

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y, u) \quad (7)$$

в области  $D = \{(x, y) : -1 \leq x, y \leq 1\}$ , где  $u(x, y) \in C^2(D)$  – неизвестная функция,  $f(x, y, u)$  – известная правая часть.

Введём фиктивную временную переменную  $t$ , положим  $u = u(x, y, t)$  и будем искать решение (7) как предел при  $t \rightarrow \infty$  решений уравнения

$$B_t u = \Delta u - f(x, y, u).$$

Здесь  $B_t$  – регуляризующий оператор одного из двух видов:

- $B_t = \frac{\partial}{\partial t}$  (простая регуляризация) и
- $B_t = (k_1 - k_2 \Delta) \frac{\partial}{\partial t}$ , где  $k_1, k_2 > 0$  – постоянные (регуляризация Соболева).

# Итерационный метод установления

Введём сетку по  $t$  с шагом  $\tau$  и узлами  $t_n = n\tau$ ,  $n = 1, 2, \dots$ . Обозначим  $u^{[n]} = u^{[n]}(x, y) = u(x, y, t_n)$  и аппроксимируем  $u_t \approx (u^{[n]} - u^{[n-1]})/\tau$ .

- Для простой регуляризации получаем

$$u^{[n]} - \tau \Delta u^{[n]} = u^{[n-1]} - \tau f(x, y, u^{[n-1]}) = \tilde{f}(x, y, u^{[n-1]}). \quad (8)$$

- Для регуляризации Соболева имеем

$$k_1 u^{[n]} - (k_2 + \tau) \Delta u^{[n]} = (k_1 - k_2 \Delta) u^{[n-1]} - \tau f(x, y, u^{[n-1]}) = \tilde{f}. \quad (9)$$

## Основная идея метода установления

Будем переходить с предыдущего на следующий временной слой до тех пор, пока решение не установится. Конкретно, критерий остановки –

$$\|B_t u\| / \|u\| \leq \varepsilon_S, \quad \text{где } \varepsilon_S - \text{невязка установления.}$$

Задавая (8), (9) как  $u^{[n]} = S(u^{[n-1]})$  с оператором  $S : C(D) \rightarrow C(D)$ , можно применять теоремы о неподвижной точке для анализа сходимости.

Практика решения нелинейных задач показывает, что удачный выбор  $\tau$  и  $k_1$ ,  $k_2$  позволяет уменьшить число итераций в десятки и сотни раз.

# Приближения, используемые в работе

1. Полином с ядром Дирихле для  $2\pi$ -периодических функций  $f(t)$

$$f(t) \approx \frac{2}{2n-1} \sum_{j=0}^{2n-2} D_{n-1}(t, t_j) f(t_j), \quad t_j = \frac{2\pi j}{2n-1}, \quad j = \overline{0, 2n-2}. \quad (10)$$

$D_{n-1}(t, t_j) = \frac{\sin((n-0.5)(t-t_j))}{2 \sin((t-t_j)/2)}$  – ядро Дирихле.

2. Интерполяционный полином с узлами Чебышёва  $x_j = \cos \frac{(2j-1)\pi}{2n}$ :

$$f(x) \approx \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (-1)^{j-1} \mathcal{T}_n(x, x_j) f(x_j), \quad \mathcal{T}_n = \frac{\sqrt{1-x_j^2}}{x-x_j} \cos(n \arccos x). \quad (11)$$

3. Прямое произведение полиномов (11) в  $d$ -мерном кубе  $D$  (по аналогии, используя (10) и (11), приближаем функции в торе, цилиндре, шаре и т.п.):

$$f(\vec{x}) \approx \frac{1}{n_1 n_2 \dots n_d} \sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_d=1}^{n_d} (-1)^{\sum_{k=1}^d j_k - d} f(x_{j_1}^1, \dots, x_{j_d}^d) \prod_{k=1}^d \mathcal{T}_{n_k}(x^k, x_{j_k}^k), \quad (12)$$

$\vec{x} = (x^1, \dots, x^d) \in D$ ;  $(x_{j_1}^1, \dots, x_{j_d}^d) \in D$  – узлы интерполяции;  $j_k = \overline{1, n_k}$ .

# Насыщение приближений и оценки констант Лебега

**Теорема 1.** Приближения (10)–(12) не имеют насыщения [Бабенко, 2002], т. е. для любой гладкости  $r$  функции  $f$  удовлетворяют оценкам погрешности наилучших полиномиальных приближений  $\varepsilon_n^*(f)$  с точностью до множителей  $1 + \Lambda_n$ , где  $\Lambda_n$  – константа Лебега, см. также [Белых, 2020], [Гавриков, 2019].

**Теорема 2.** Константа Лебега приближения (10) растёт логарифмически с ростом  $n$  [Lebesgue, 1909]:

$$\Lambda_n = (4/\pi) \ln n + R_n, \quad R_n < 3.$$

**Теорема 3.** Константа Лебега интерполяционного полинома (11) имеет логарифмическую скорость роста [Dzjadyk, Ivanov, 1983]:

$$\Lambda_n = (2/\pi) \ln n + 1 - \theta_n, \quad 0 < \theta_n < 1/4.$$

**Теорема 4.** Константы Лебега (12) выражаются так:  $\Lambda_n = \prod_{k=1}^d \ln n_k$ .

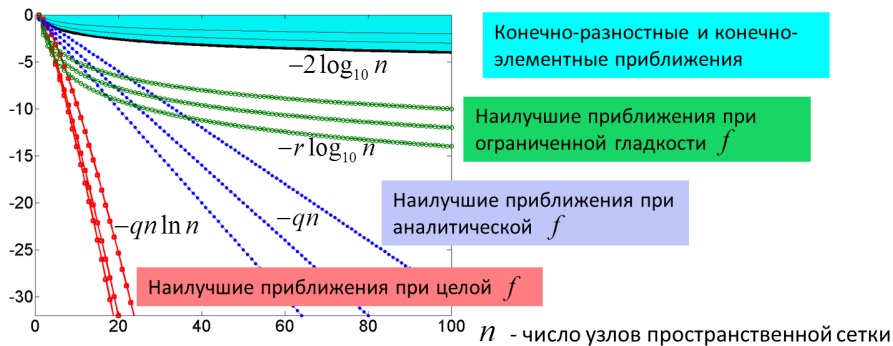
**Теорема 5.** Пусть  $f(\vec{x}) \in W_p^r(\tilde{M}, D) := \text{Cl}\{f : \|D_i^{(r_i)} f\|_p \leq M_i\}$ ,  $i = \overline{1, d}$ , тогда существует такой многочлен  $P$  порядка не выше  $n_j$  по переменной  $x_j$ , что

$$\|f - P(f)\| \leq K_r \sum_{j=1}^d M_j n_j^{-r_j} \sim (\max_j n_j)^{-r_j}.$$

# Три типа оценок погрешности $\varepsilon_n^*(f)$

1.  $f \in W_p^r(M, D) = \text{Cl}\{f \in C^{r-1}(D) : \|f^{(r)}\|_p \leq M\}$ ,  $r = 1, \dots$  – **конечный порядок сходимости**  $\varepsilon_n^*(f) \leq MC_r n^{-r}$ , [Jackson, 1912], [Бабенко, 2002].
2.  $f \in C^\infty(D)$  допускает аналитическое продолжение в  $\mathbb{C}$  с особенностью – **экспоненциальная сходимость**  $\varepsilon_n^*(f) \leq Cq^{-n}$ ,  $q < 1$  [Бернштейн, 1912].
3.  $f$  – целая – **скорость сходимости выше экспоненциальной**.

$\log_{10} \varepsilon_n(f)$  – количество точных знаков приближённого представления функции



# Модифицированный полином и производные

Модифицируем полином (11) для учёта условий Дирихле:

$$p[u](x) = p_{Ch}(x) = \sum_{j=1}^N \frac{(-1)^{j-1}}{N} \zeta(x, x_j) \mathcal{T}_N(x, x_j) u(x_j), \quad \zeta(x, x_j) = \frac{1-x^2}{1-x_j^2}. \quad (13)$$

В 1D случае решение записывается как  $\tilde{u}(x) \approx P_N[\tilde{u}](x) = p[u](x) + w(x)$ , где  $w(x)$  – функция с заданными (ненулевыми) условиями на границе.

Обозначим  $u_j = u(x_j)$ ,  $(u_x)_j = u_x(x_j)$ ,  $(u_{xx})_j = u_{xx}(x_j)$ . Используя правило Лопиталя, получаем

$$(u_x)_j \approx \lim_{x \rightarrow x_i} \frac{\partial p_{Ch}(x)}{\partial x} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \underbrace{(-1)^{i+j} \frac{\sqrt{1-x_i^2}}{(x_i-x_j)\sqrt{1-x_j^2}}}_{a_{ij}, i \neq j} u_j - \underbrace{\frac{3}{2} \frac{x_i}{1-x_i^2}}_{v_j} u_i$$

$$(u_{xx})_j \approx \lim_{x \rightarrow x_i} \frac{\partial^2 p_{Ch}(x)}{\partial x^2} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \underbrace{(-1)^{i+j} \frac{2(1-x_i^2) + 3x_i(x_i-x_j)}{(x_i-x_j)^2 \sqrt{1-x_j^2} \sqrt{1-x_i^2}}}_{b_{ij}, i \neq j} u_j - \underbrace{\left( \frac{N^2+5}{1-x_i^2} + \frac{3x_i^2}{(1-x_i^2)^2} \right)}_{\mu_i} u_i$$



# Матрицы, аппроксимирующие производные

Введём обозначения:

$U = (u_1, \dots, u_N)^T$ ,  $U_x = ((u_x)_1, \dots, (u_x)_N)^T$ ,  $U_{xx} = ((u_{xx})_1, \dots, (u_{xx})_N)^T$   
и сформируем  $N \times N$  матрицы:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \nu_1 & a_{12} & \dots & a_{1N} \\ a_{21} & \nu_2 & \dots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \dots & \nu_N \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} \mu_1 & b_{12} & \dots & b_{1N} \\ b_{21} & \mu_2 & \dots & b_{2N} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ b_{N1} & b_{N2} & \dots & \mu_N \end{pmatrix}.$$

Для аппроксимации производных в задачах Дирихле получаем формулы

$$U_x \approx \mathcal{A}U, \quad U_{xx} \approx AU.$$

Далее будет использовано спектральное разложение матрицы  $A$  с диагональной матрицей собственных значений  $D_A = \text{diag}(d_A^1, \dots, d_A^n)$  и матрицей собственных векторов  $R_A$ :

$$A = R_A D_A R_A^{-1}.$$

Матрицы  $\mathcal{A}$ ,  $A$  и их разложения  $R_A^{-1}$ ,  $R_A$ ,  $D_A$  для разных  $N$  рассчитаны **ОДНОКРАТНО** и сохранены в базе данных, что сокращает время расчёта. ☺☺☺

# Двумерная краевая задача

Рассмотрим задачу Дирихле в квадрате  $D = [-1, 1]^2$ :

$$\tilde{u}_{xx} + \tilde{u}_{yy} = f(x, y, \tilde{u}), \quad \tilde{u}(\pm 1, y) = \varphi_{\pm 1}(y), \quad \tilde{u}(x, \pm 1) = \psi_{\pm 1}(x). \quad (14)$$

Введём сетку  $(x_j, y_k)$ ,  $x_j = \cos \frac{2j-1}{2N}\pi$ ,  $y_k = \cos \frac{2k-1}{2K}\pi$ ,  $j = \overline{1, N}$ ,  $k = \overline{1, K}$ .

Пусть  $\tilde{u}(x, y) = u(x, y) + w(x, y)$ , где  $u$  зануляется на границе,  $w$  реализует ненулевые граничные условия, и положим  $u_{jk} = u(x_j, y_k)$ ,  $(u_\mu)_{jk} = u_\mu(x_j, y_k)$ , где  $\mu$  – одна из производных  $\mu \in \{x, y, xx, yy, xy\}$ .

Аппроксимация  $u(x, y)$  прямым произведением  $p_{Ch}(x) \times p_{Ch}(y)$  имеет вид

$$u(x, y) \approx p[u](x, y) = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^K \frac{\zeta(x, x_j) T_N(x)}{(x - x_j) T'_N(x_j)} \frac{\zeta(y, y_k) T_K(y)}{(y - y_k) T'_K(y_k)} u(x_j, y_k). \quad (15)$$

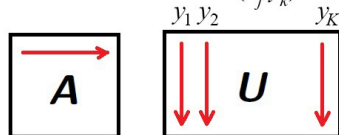
Дифференцирование (15) даёт матричную аппроксимацию производных:

$$U_{xx} \approx AU, \quad U_{yy} \approx UB^T, \quad U_x \approx AU, \quad U_y \approx UB^T, \quad U_{xy} \approx AUB^T. \quad (16)$$

Пусть  $\tilde{F}(U^{[n]}) = (\tilde{f}(x_j, y_k, u_{jk}^{[n]} + w(x_j, y_k)))$ ,  $U^{[n]} = (u_{jk}^{[n]})$ ,  $U_\mu^{[n]} = ((u_\mu^{[n]})_{jk})$  –  $N \times K$  матрицы на  $n$ -м временном слое.

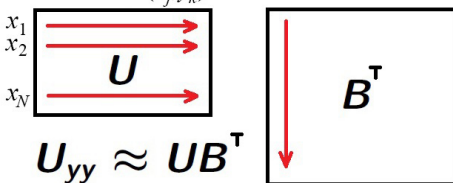
# Формирование и решение СЛАУ

Для фиксированного  $y_k$   $u_{xx}(x, y_k)$  – линейная комбинация  $u(x_j, y_k)$  по  $j$



$$U_{xx} \approx AU$$

Для фиксированного  $x_j$   $u_{yy}(x_j, y)$  – линейная комбинация  $u(x_j, y_k)$  по  $k$



$$U_{yy} \approx UB^T$$

Пусть  $A = R_A D_A R_A^{-1}$ ,  $B = R_B D_B R_B^{-1}$  – спектральные разложения и  $V^{[n]} = R_A^{-1} U^{[n]} R_B = (v)_{jk}$ ,  $G^{[n]} = R_A^{-1} \tilde{F}(U^{[n-1]}) R_B = (g)_{jk}$ .

Для случая простой регуляризации получаем

$$R_A^{-1} \times |U^{[n]} - \tau(AU^{[n]} + U^{[n]}B^T) = \tilde{F}(U^{[n-1]})| \times R_B,$$

$$V^{[n]} - \tau(D_A V^{[n]} + V^{[n]} D_B) = G^{[n]} \Rightarrow v_{jk} = g_{jk} / (1 - \tau(d_A^j + d_B^k)).$$

Решение –  $U^{[n]} = R_A V^{[n]} R_B^{-1}$ , и необходимо, чтобы  $\tau \neq (d_A^j + d_B^k)^{-1}$ ,  $\forall j, k$ .

Для реализации метода требуется порядка  $O(NK(N + K))$  операций.

# Обобщение метода на случай произвольной размерности

# Традиционная схема и предложенный метод

$$\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ (n_1 \dots n_d) \times (n_1 \dots n_d) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ u_{j_1 \dots j_d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ f_{j_1 \dots j_d} \end{pmatrix}$$

Пусть задача поставлена в  $d$ -мерном кубе

**Традиционная схема метода коллокаций:**

– матрица нерегулярной структуры,

–  $N^{3d}$  операций для решения при  
 $n_1 = n_2 = \dots = n_d = N$ ,

– проблемы с распараллеливанием метода.

**Предложенный алгоритм** аппроксимирует вторые производные по  $x^1, \dots, x^d$  матрицами  $A_1, \dots, A_d$ . Используются операции свёртки матриц и тензора  $U^{[n]}$  ранга  $d$  по направлениям  $1, 2, \dots, d$ . Метод установления с шагом  $\tau$  даёт

[Семисалов, 2022]

$$\begin{pmatrix} U^{[n]} \\ n_1 \times \dots \times n_d \end{pmatrix} - \tau \left( \begin{pmatrix} A_1 \\ n_1 \times n_1 \end{pmatrix} \overset{1 \times}{\times} U^{[n]} + U^{[n]} \overset{2 \times}{\times} \begin{pmatrix} A_2 \\ n_2 \times n_2 \end{pmatrix} + U^{[n]} \overset{3 \times}{\times} \begin{pmatrix} A_3 \\ n_3 \times n_3 \end{pmatrix} + \dots \right) = \begin{pmatrix} \tilde{F}^{[n-1]} \\ n_1 \times \dots \times n_d \end{pmatrix}$$

# Традиционная схема и предложенный метод

$$\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ (n_1 \dots n_d) \times (n_1 \dots n_d) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ u_{j_1 \dots j_d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ f_{j_1 \dots j_d} \end{pmatrix}$$

Пусть задача поставлена в  $d$ -мерном кубе

**Традиционная схема метода коллокаций:**

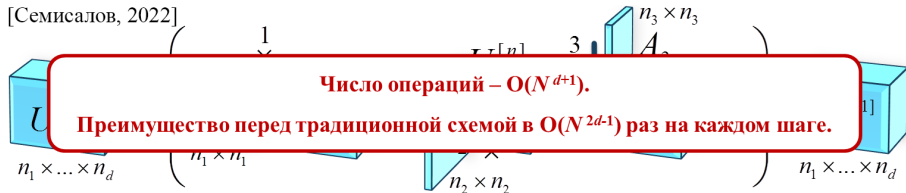
– матрица нерегулярной структуры,

–  $N^{3d}$  операций для решения при  
 $n_1 = n_2 = \dots = n_d = N$ ,

– проблемы с распараллеливанием метода.

**Предложенный алгоритм** аппроксимирует вторые производные по  $x^1, \dots, x^d$  матрицами  $A_1, \dots, A_d$ . Используются операции свёртки матриц и тензора  $U^{[n]}$  ранга  $d$  по направлениям  $1, 2, \dots, d$ . Метод установления с шагом  $\tau$  даёт

[Семисалов, 2022]



## Теорема I о числе операций и расходах памяти [Семисалов, 2022]

Пусть  $n_1 = n_2 = \dots = N$ . Метод требует  $p(\{2d + \sigma(d + 1)\}N^{d+1} + O(N^d))$  операций и  $s(3N^2 + N + \{\sigma(d + 1) + 5\}N^d + O(N^{d-1}))$  байт оперативной памяти,  $\sigma$  – количество различных производных от неизвестной функции,  $p$  – количество итераций метода установления,  $s$  – объём памяти в байтах, занимаемый одним действительным числом.

## Теорема II об аппроксимации, [Семисалов, 2022]

Пусть  $\tilde{u}(x) \in W_{\infty}^{N+2}(M, [-1, 1])$  и  $\tilde{u}(-1) = a$ ,  $\tilde{u}(1) = b$ . Тогда погрешность приближения  $u$  модифицированным полиномом  $P_N(\tilde{u}, x) = \tilde{p}_N(u, x) + w(x)$ , где  $u = \tilde{u} - w$ ,  $w = ((b - a)x + (a + b))/2$ ,  $\tilde{p}_N$  – полином из теоремы 1, при  $N \geq 2$  удовлетворяет оценке

$$\|P_N^{(s)}[\tilde{u}](x) - \tilde{u}^{(s)}(x)\| \leq M \frac{2^{N+2-s}}{(N+2-s)!}, \quad 0 \leq s < N+2.$$

Доказательство опирается на то, что при  $u(\pm 1) = 0$   $p[u](x)$  есть интерполяционный полиномом на  $(N+2)$ -х узлах Чебышёва, и на теорему Ролля для последнего.

# Анализ обусловленностей и норм матриц, аппроксимирующих вторые производные

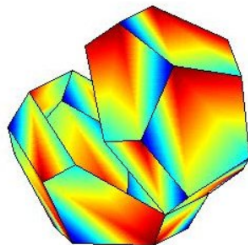
С помощью пакета INTLAB получены интервалы значений обусловленностей и норм [Rump, 2010]. Далее будут показаны зависимости правых концов интервалов и их радиусов от  $N$ :

Код на языке MATLAB:

```
function [maxVal,ra]=getCond(matr, no, N)
y=zeros(N);
Y=intval(y);
[V,D] = eig(matr);

for k=1:N
    [L,X] = verifyeig(matr,D(k,k),V(:,k));
    Y(:,k)=X;
end

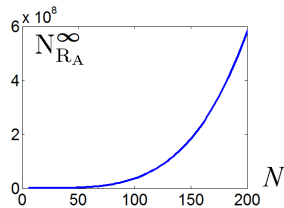
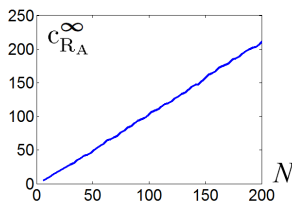
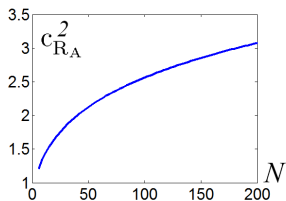
res = norm(Y,no)*norm(inv(Y),no);
ra=rad(res);
maxVal=abs(mid(res))+ra;
```



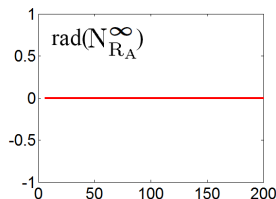
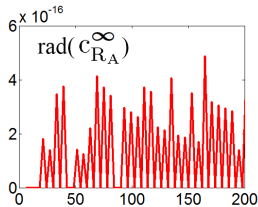
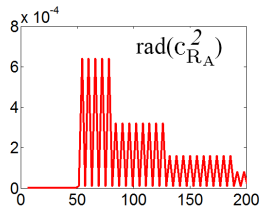


# Анализ матриц в задачах Дирихле

**Верхние границы гарантированных интервалов для обусловленностей и нормы в зависимости от числа узлов**



**Относительные радиусы гарантированных интервалов**



# Собственные числа матриц

Значения собственных чисел  $d_A^j$  матрицы  $A$  при  $N = 10$  и радиусы интервалов  $rad_j$ , гарантированно содержащих собственные числа  $d_A^j$ :

$j$	$d_A^j$	$rad_j$	$j$	$d_A^j$	$rad_j$
1	-3.169920593590947e+03	9.09e-13	6	-62.595104941014185	2.13e-14
2	-3.034196464055946e+03	4.55e-13	7	-39.453871795378625	2.84e-14
3	-1.964915419758917e+02	5.68e-14	8	-22.206898938237902	2.13e-14
4	-1.785341309646627e+02	5.68e-14	9	-9.869604101936476	2.66e-14
5	-84.264388535869273	2.84e-14	10	-2.467401100161208	2.44e-14

Видно, что все собственные числа матрицы, аппроксимирующей вторую производную, в случае условий Дирихле являются действительными, отрицательными и хорошо отделимыми друг от друга и от нуля.

Аналогичная ситуация имеет место для других типов условий, только в случае условий Неймана одно из собственных чисел равно нулю.

# Теорема III об устойчивости в линейном приближении

При решении задачи Дирихле для уравнения Пуассона разработанный метод является абсолютно устойчивым для любых  $\tau$  при использовании простой регуляризации и для  $\tau \geq k_2 \left( \frac{M}{m} - 1 \right)$  в случае регуляризации Соболева, где

$$M = \sum_{\delta=1}^d \max_{j_{\delta}=1, \dots, N_{\delta}} |d_{A_{\delta}}^{j_{\delta}}|, \quad m = \sum_{\delta=1}^d \min_{j_{\delta}=1, \dots, N_{\delta}} |d_{A_{\delta}}^{j_{\delta}}|, \quad A_{\delta} - \text{матрицы,}$$

аппроксимирующие вторые производные по переменным  $x_1, \dots, x_d$ ,  $d_{A_{\delta}}^{j_{\delta}}$  – их собственные числа.

▷ Представим итерацию метода установления как  $U^{[n]} = S(U^{[n-1]})$ , где  $S: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$  – линейный оператор с максимальным собственным значением  $\lambda_{\max}$ , и учтём, что все собственные числа отрицательны. Тогда

– для простой регуляризации  $\lambda_{\max} = (1 + \tau m)^{-1} \Rightarrow$  поскольку все матрицы  $A_i$  невырождены, то  $|\lambda_{\max}| < 1$ ;

– для регуляризации Соболева  $\lambda_{\max} = \frac{k_1 + k_2 M}{k_1 + (k_2 + \tau)m} \cdot |\lambda_{\max}| \leq 1$  при  $\tau \geq k_2(M/m - 1)$ .

Спектральный критерий устойчивости (критерий Неймана) выполнен. ◁

# Расчёт 2D установившихся течений полимерной жидкости

# Сравнение с результатами измерений

Течение полиэтилена Lupolen 1840H в экструдере.

Параметры идентифицированы по данным из работ

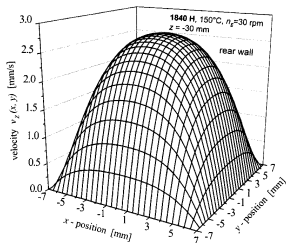
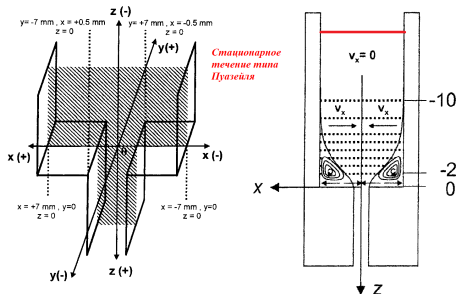
[Schmidt, 1999], [Кузнецов, 2018]

$\eta_0 = 5.45 \times 10^4 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ ,  $\tau_0 = 4.1\text{s}$ ,

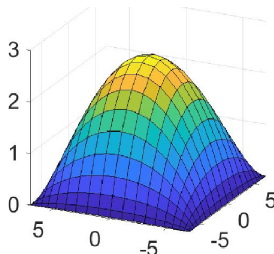
$E_A = 5.8 \times 10^4 \text{ K}$ ,  $T_0 = 150^\circ \text{ C}$ ,

$\rho = 918 \text{ kg/m}^3$   $\text{Ra}=0.053$ ,

$\text{Pr}=5.4$ ;  $k = \beta = 0.0062$ .

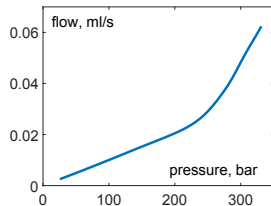


Measurements from [Schmidt, 1999].

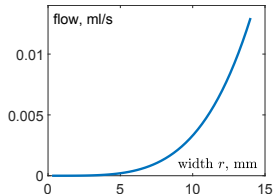
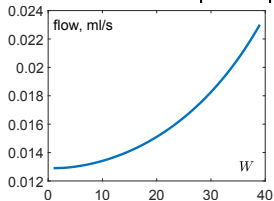


# Исследование течений в прямоугольном канале

Задача о течении полимера Lupolen 1840H в экструдере [Schmidt, 1999].  
Стационарные профили скорости при разных значениях градиента давления.



Зависимости потока от параметров модели



# Анализ течения в дюзе эллиптической формы

В рамках проекта РНФ 17-71-10135 по данным натурных испытаний идентифицированы параметры модели течения материала PEDOT:PSS в технологиях печати, см. также [Блохин, Семисалов, 2020, приложение]

Ниже – стационарные профили скорости и температуры для различных значений градиента давления в дюзе с внутренним нагревательным элементом при  $\bar{E}_A = 0.614$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $k = 1.2\beta$ ,  $W = 0.1$ ,  $A = 0.5$ ,  $l = 0.1\text{mm}$ .

# Верификация результатов НМБН другими методами<sup>1</sup>

[Semisalov et al., 2022]

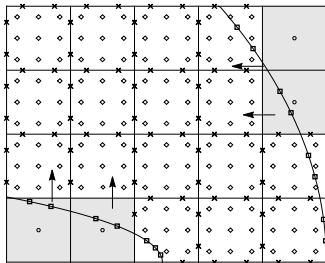
<sup>1</sup>В сотрудничестве с Беляевым В.А., Брындиным Л.С., Шапеевым В.П. (метод коллокаций и наименьших квадратов);

в сотрудничестве с Горыниным А.Г., Голушко С.К. (метод конечных элементов).



# Метод коллокаций и наименьших квадратов

## Расположение узлов в ячейках



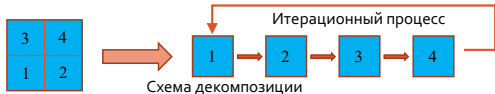
“◇” — точки коллокации, “x” — точки согласования, “□” — точки записи краевых условий, “o” — центры малых/вытянутых n-ячеек.

## Приближение решения:

$$v_{hj}(y_1, y_2) = \sum_{i_1=0}^K \sum_{i_2=0}^{K-i_1} c_{i_1 i_2 j} y_1^{i_1} y_2^{i_2}$$

## Приближенное решение

- кусочно-полиномиальное решение
- переопределенная СЛАУ
- метод итераций по подобластям + различные способы ускорения



- Ускорение итераций по Крылову
- Многосеточный метод
- Предобуславливание
- Снижение обусловленности СЛАУ

## Слабая постановка задачи

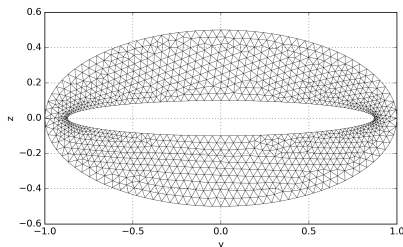
$$u^n \in H_0^1(\Omega), Y^n \in H_E^1(\Omega) : \begin{cases} a_1(u^n, v_1) = L_1^{n-1}(v_1), & \forall v_1 \in H_0^1(\Omega), \\ a_2(Y^n, v_2) = L_2^{n-1}(v_2), & \forall v_2 \in H_0^1(\Omega). \end{cases} \quad (17)$$

На каждом шаге по  $n$  решается задача (17) с помощью МКЭ, после чего правая часть обновляется для следующего  $n$  и процесс повторяется.

$$H_0^1(\Omega) = \{v(x, y) \in H^1(\Omega) | v(\partial\Omega) = 0\},$$
$$H_E^1(\Omega) = \{v(x, y) \in H^1(\Omega) | v(\Gamma_0) = 2, v(\Gamma_1) = 1\}$$

Использованы Лагранжевы конечные элементы второго порядка.

Алгоритм реализован в FEniCS Project [Alnaes et. al., 2015].



Сетка со сгущением вблизи точек

особенностей

## Нелинейная тестовая задача с известными решениями $v(y, z)$ и $w(y, z)$

Погрешность  $\|E_r^v\|_\infty = \frac{\max_{\xi=1,\dots,Q} |v(y_\xi, z_\xi) - v_{ap}(y_\xi, z_\xi)|}{\max_{\xi=1,\dots,Q} |v(y_\xi, z_\xi)|}$ , аналогично  $\|E_r^w\|_\infty$ .

Порядок сходимости  $R = \log_2 \frac{\|E_r^{N_1, N_2}\|_\infty}{\|E_r^{2N_1, 2N_2}\|_\infty}$ .

## Расчёт стационарных течений полимерной жидкости

при  $k = 1.2\beta$ ,  $\bar{E}_A = 1$ ,  $Re=10$ ,  $Ra=1.06$ ,  $Pr=108.1$ ,  $r_1 = 1$ .

— Погрешность

$$\|D_a^u\|_\infty = \|u_{ap}^{N_1, N_2} - u_{ap}^{2N_1, 2N_2}\|_\infty = \max_{\xi=1,\dots,Q} |u_{ap}^{N_1, N_2}(y_\xi, z_\xi) - u_{ap}^{2N_1, 2N_2}(y_\xi, z_\xi)|.$$

— Порядок сходимости  $R = \log_2 \frac{\|u_{ap}^{N_1, N_2} - u_{ap}^{2N_1, 2N_2}\|_\infty}{\|u_{ap}^{2N_1, 2N_2} - u_{ap}^{4N_1, 4N_2}\|_\infty}$ .

—  $\|\tilde{D}_r^u\|_\infty = \frac{\max_{\xi=1,\dots,Q} |u_{ap}^*(y_\xi, z_\xi) - u_{ap}^{**}(y_\xi, z_\xi)|}{\max_{\xi=1,\dots,Q} |u_{ap}^*(y_\xi, z_\xi)|}$ , где  $u_{ap}^*$ ,  $u_{ap}^{**}$  — приближенные решения, полученные двумя различными методами.

# Тестовая задача. Сравнение МКЭ и НМБН

Результаты численных расчетов **МКЭ** тестовой задачи .

$h$	$\ E_r^v\ _\infty$	$R$	$\ E_r^w\ _\infty$	$R$	$N_{iter}$	CPU time
0.512	1.19e-1	—	3.60e-2	—	19	0.83
0.256	4.38e-2	1.44	9.03e-3	1.99	27	2.50
0.128	1.17e-2	1.90	2.06e-3	2.13	44	7.34
0.064	2.22e-03	2.40	5.53e-04	1.89	70	33.26
0.032	3.22e-04	2.78	1.03e-04	2.42	124	225.24
0.016	9.19e-05	1.81	2.56e-05	2.01	221	1911.01

Результаты численных расчетов, полученные **НМБН**

$N_1 \times N_2$	$\ E_r^v\ _\infty$	$R$	$\ E_r^w\ _\infty$	$R$	$N_{iter}$	CPU time
$4 \times 4$	0.239	—	0.04	—	10	0.4
$8 \times 8$	6.62e-3	5.17	7.56e-5	9.07	42	0.6
$16 \times 16$	7.72e-6	9.74	5.18e-8	10.51	192	2.4
$32 \times 32$	1.29e-10	15.87	9.39e-13	15.75	2135	22.5

# Сравнение результатов работы алгоритмов

Результаты численных расчетов при  $W = 0.01$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $r_0 = 0.1$  и различных  $\hat{A}$ . В методе КНК использовалась сетка  $80 \times 320$  (16584 самостоятельных и 716 присоединенных ячеек) и  $K = 4$ . В МКЭ использовалось 217304 элементов.

$\hat{A}$	КНК vs МКЭ		КНК vs НМБН		МКЭ vs НМБН	
	$\ \tilde{D}_r^u\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^Y\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^u\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^Y\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^u\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^Y\ _\infty$
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

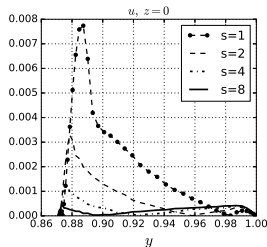
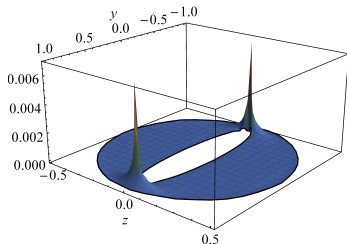
Результаты численных расчетов при  $\beta = 0.1$ ,  $r_0 = 0.1$ ,  $\hat{A} = 10$  и различных  $W$ . В методе КНК использовалась сетка  $80 \times 320$  (16584 самостоятельных и 716 присоединенных ячеек) и  $K = 4$ . В МКЭ использовалось 217304 элементов.

$W$	КНК vs МКЭ		КНК vs НМБН		МКЭ vs НМБН	
	$\ \tilde{D}_r^u\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^Y\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^u\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^Y\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^u\ _\infty$	$\ \tilde{E}_r^Y\ _\infty$
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

# Сходимость МКЭ при сгущении сетки

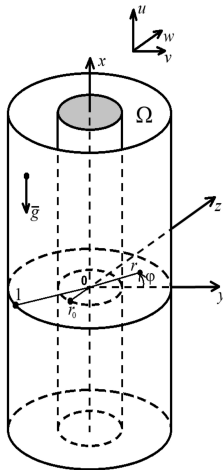
$s = h_{\max}/h_{\min}$	$A = 10$		$A = 51$		$A = 101$	
	$\ \tilde{D}_r^u\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^Y\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^u\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^Y\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^u\ _\infty$	$\ \tilde{D}_r^Y\ _\infty$
0.02/0.02	1.27e-02	1.28e-02	1.27e-02	4.43e-03	1.18e-02	2.39e-03
0.02/0.01	7.17e-03	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

Абсолютные отклонения результатов МКЭ и НМБН при  $W = 0.01$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $r_0 = 0.1$ ,  $\hat{A} = 10$



# Анализ 1D течений с контролем погрешности. Сценарии потери устойчивости

# Течение между двумя **соосными** цилиндрами



Переходим в (5), (6) к полярным координатам  $y = r \cos \varphi$ ,  $z = r \sin \varphi$  и предполагаем осевую симметрию течения в канале

$$\Omega = \{(y, z) : r_0^2 < y^2 + z^2 < 1\}.$$

Если не учитывать диссипацию, то температура выражается в явном виде

$$Y(r) = 1 + \bar{\theta} \ln r / \ln r_0,$$

где  $\bar{\theta}$  – относительная разность температур на внутренней и внешней стенках. Уравнение для скорости течения на отрезке  $r \in [r_0, 1]$  имеет вид

$$r\gamma(u') \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \Gamma(u') \frac{\partial u}{\partial r} = -r\hat{G}K(u'), \quad (18)$$

где  $\gamma(u')$ ,  $\Gamma(u')$ ,  $K(u')$  – нелинейные функции от  $u' = \frac{\partial u}{\partial r}$ ;

$\hat{G} = \text{Re}(\hat{A} + \text{Ga} \frac{\ln r}{\ln r_0})$ , см. постановку в [Блохин, Круглова, Семисалов, 2017].



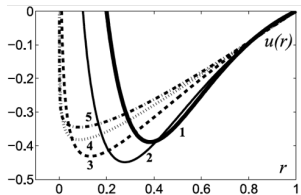
# Анализ погрешностей численных решений

[Блохин, Круглова, Семисалов, 2018]

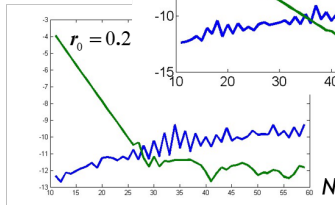
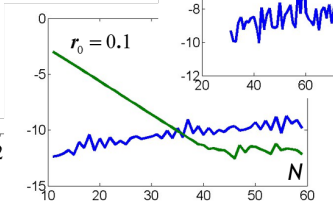
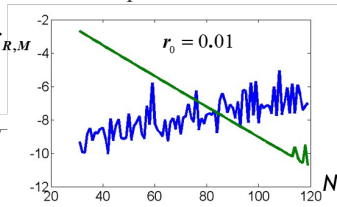
Погрешность численного решения:  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_R + \mathcal{E}_M$  :

$\mathcal{E}_M$  - оценка вычислительной погрешности, связанной с округлением действительных чисел в памяти ЭВМ;

$\mathcal{E}_R$  - оценка погрешность использования метода приближения.



Зависимости  $\log_{10} \mathcal{E}_{R,M}$   
от числа узлов  
интерполяции  $n$

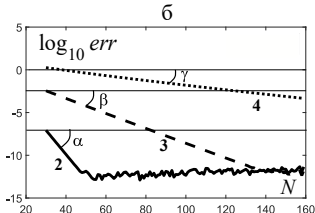
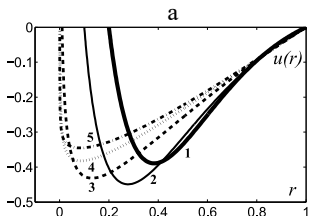


Режим:

$$\begin{aligned}\theta &= 9 & \beta &= 0.1 \\ E_A &= 9 & W &= 0.01 \\ D &= -1\end{aligned}$$

# Сходимость приближённых решений (18)

Для различных  $r_0$  рассчитаны профили скорости (рис. а). В расчётах на последовательности сеток получены графики логарифмов оценок погрешности метода приближения в зависимости от числа узлов  $N$  (рис. б).



**Режим:**  $\text{Re} \cdot \hat{A} = -1$ ,  
 $\beta = 0.1$ ,  $W = 0.01$ ,  
 $\bar{E}_A = 9$ ,  $\bar{\theta} = 9$ ,  
 $\text{Re} \cdot \text{Ga} = 1$

1 –  $r_0 = 0.2$ , 2 –  $r_0 = 0.1$ , 3 –  $r_0 = 0.01$ , 4 –  $r_0 = 0.001$ , 5 –  $r_0 = 0.0002$ .

На рис. б видим **прямые линии**, угол  $\alpha$  соответствует  $r_0 = 0.1$ ,  $\beta - r_0 = 0.01$ ,  $\gamma - r_0 = 0.001$ ,  $\boxed{\gamma < \beta < \alpha}$ .

В силу теоремы Бернштейна можно предположить, что рост градиента решения при уменьшении  $r_0$  связан с наличием у решения особой точки в комплексной плоскости. Чем меньше  $r_0$ , тем ближе особая точка к отрезку решения.

# Теоремы Бернштейна [Bernstein, 1912]

## Прямая теорема

— Пусть функция  $f \in [-1, 1]$  допускает аналитическое продолжение в эллипс Бернштейна  $\mathfrak{E}_\rho \in \mathbb{C}$  с фокусами в точках  $\pm 1$  и суммой полуосей  $\rho > 1$ ;

—  $|f(z)| < \tilde{M}$  для всех  $z$  на контуре эллипса,

тогда интерполяционный полином  $p_N(z)$  с узлами Чебышёва сходится к  $f$ , и

$$\|f - p_N\|_\infty \leq \frac{4\tilde{M}}{\rho^n(\rho - 1)}. \quad (19)$$

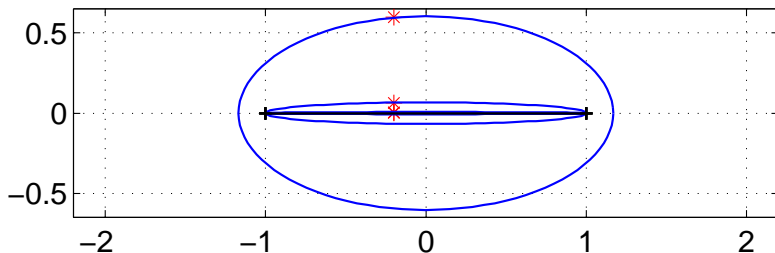
## Обратная теорема

Предположим, что для  $f(x)$ ,  $x \in [-1, 1]$  существует последовательность полиномов  $\mathcal{P}_N(x)$ , таких что для некоторых постоянных  $C > 0$ ,  $\rho > 1$

$$\|f - p_N\|_\infty \leq C\rho^{-N}. \quad (*)$$

Тогда функция  $f \in C^\infty[-1, 1]$  и она может быть аналитически продолжена в  $E_\rho \in \mathbb{C}$  (но ограниченность на контуре не гарантируется).

## Bernstein ellipses



# Алгоритм локализации особой точки

Применим приближения Чебышёва–Паде [Бейкер, Г.-Моррис, 1986, п. 1.6]:

$$u(x) \approx \frac{p(x)}{q(x)} = \frac{\sum_{k=0}^m b_k T_k(x)}{1 - \sum_{k=0}^n c_k T_k(x)}. \quad (20)$$

Для поиска  $b_k$ ,  $c_k$  используем условие  $u(x)q(x) - p(x) = O(T_{m+n+1}(x))$  и приблизим найденное решение выражением

$$u(x) \approx \sum_{k=0}^{n+m+1} a_k T_k(x).$$

Применяя  $T_n T_m = 0.5(T_{n+m} + T_{|n-m|})$ , получим систему линейных уравнений для определения  $b_k$ ,  $c_k$ .

Зная  $c_k$ , можем найти полюса (20) как собственные числа сопровождающей матрицы  $C$ .

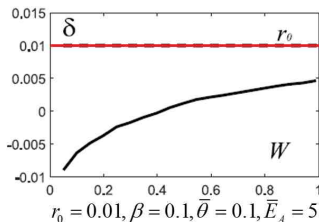
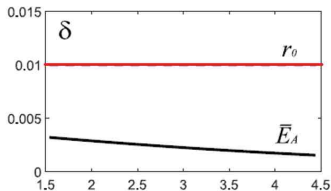
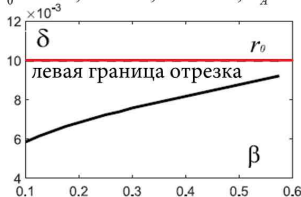
$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\ & & & \dots & \\ & & & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{c_0}{-2c_n} & \frac{c_1}{-2c_n} & \dots & \frac{c_{n-3}}{-2c_n} & \frac{c_{n-2}}{-2c_n} + \frac{1}{2} & \frac{c_{n-1}}{-2c_n} \end{pmatrix}.$$

# Анализ координат особой точки $\delta + i\varepsilon \in \mathbb{C}$

В вычислениях получено  $\varepsilon \approx 0$ .

В отличие от случая Ньютоновской жидкости\* координата  $\delta$  не фиксирована.

$$r_0 = 0.01, \bar{\theta} = 0.1, W = 0.01, \bar{E}_A = 5 \quad r_0 = 0.01, \beta = 0.1, \bar{\theta} = 0.5, W = 0.01$$



\* В этом случае скорость  $u(r) = \frac{\hat{\gamma}}{4} \left( r^2 + \frac{\ln r}{\ln r_0} (1 - r_0^2) - 1 \right)$ ,  $\hat{\gamma} = \frac{1}{\eta_s} \left( \frac{\hat{A}}{\rho} + g \right)$ .

# Список литературы

*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.

*Zheng Y., He Z., Gao Y., Liu J.* Direct desktop printed circuits-on-paper flexible electronics // Sci. Rep. 2013. Vol. 3. Art. ID 1786.

*Orrill M., LeBlanc S.* Printed thermoelectric materials and devices: Fabrication techniques, advantages and challenges// J. Appl. Polym. Sci. 2017. Vol. 134. No. 44256.

*Chhabra R. P. Richardson J. F.* Non-Newtonian Flow and Applied Rheology. 2nd ed. Oxford: Butterworth–Heinemann, 2008. 536 p.

*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.

*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.

*Bird R.B., Armstrong R.C., Hassager O.* Dynamics of polymeric liquids. New York: Wiley, 1987. Vol. 1: Fluid mechanics, 2nd ed.

*de Gennes P. G.* Reptation of a Polymer Chain in the Presence of Fixed Obstacles // J. Chem. Phys. 1971. Vol. 55. Is.2. P. 572–579.

# Список литературы

Алтухов Ю. А., Гусев А. С., Пышнограй Г. В. Введение в мезоскопическую теорию текучести полимерных систем. Барнаул: Изд-во АлтГПА, 2012.

*Pokrovskii V. N.* The Mesoscopic Theory of Polymer Dynamics. Berlin: Springer-Verl., 2010.

*Shibata Y.* On the  $r$ -boundness for the two phase problem with phase transitions: compressible-incompressible // Model Problem. Funkcialaj Ekvacioj. 2016. Vol. 59. P. 243–287.

Бабенко К. И. Основы численного анализа. Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002.

Белых В. Н. Особенности реализации ненасыщаемого численного метода для внешней осесимметричной задачи Неймана // Сиб. матем. журн. 2013. Т. 54, №6. С. 1237–1249.

Гавриков М. Б. Методы без насыщения в вычислительной математике // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2019. №075, 40 с.

*Lebesgue H.* Sur l'approximation des fonctions // Bull. Sci. Math., ser. 2. 1898. Vol. 22. P. 278–287.

*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.



# Список литературы

*Бернштейн С. Н.* О наилучшем приближении непрерывных функций посредством многочленов данной степени // Сообщ. Харьк. Мат. об-ва (2). 1912. №13. С.49–144.

*Jackson D.* On Approximation by Trigonometric Sums and Polynomials // Trans. Amer. Math. Soc. 1912. Vol.13. P. 491–515.

*Rump S.M.* Verification Methods: Rigorous Results Using Floating-Point Arithmetic // Acta Numer. 2010. Vol. 19. P. 287–449.

*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.

*Кузнецов А.Е.* Влияние реологических характеристик полимерного расплава на структуру вихревого течения в сходящемся канале с прямоугольным сечением. Дисс. на соискание степени канд. физ.-мат. наук. Барнаул, 2018. (науч. рук. Г. В. Пышнограй).

*Alnaes M. S., Blechta J., Hake J., et. al.* The FEniCS Project Version 1.5 // Archive of Numerical Software. 2015 vol. 3, no. 100. P. 9–23.

*Бейкер Дж., Грейвс-Моррис П.* Аппроксимации Паде. М.: Мир, 1986.

# Публикации основных результатов

*Семисалов Б.В.* Об одном подходе к численному решению задач Дирихле произвольной размерности // СибЖВМ. 2022. Т. 25. №1. С.77–95.

*Семисалов Б.В.* Нелокальный алгоритм поиска решений уравнения Пуассона и его приложения // Выч. мат. и мат. физ. 2014. Т 54. №7. С. 1110–1135.

*Semisalov B.V. et. al.* Verified simulation of the stationary polymer fluid flows in the channel with elliptical cross-section // Applied Mathematics and Computation. 2022. Vol. 430. Art. # 127294. Doi: 10.1016/j.amc.2022.127294.

*Блохин А.М., Семисалов Б.В.* Нахождение стационарных течений пуазейлевского типа для несжимаемой полимерной жидкости методом установления // ЖВМиМФ. 2022. Т.62. № 2. С. 65–79.

*Блохин А.М., Семисалов Б.В.* Расчёт стационарных неизотермических МГД течений полимерной жидкости в каналах с внутренними нагревательными элементами // СИБЖИМ. 2020. Т. 23, №2. С. 17–40.

*Блохин А.М., Семисалов Б.В., Шевченко А.С.* Стационарные решения уравнений, описывающих неизотермические течения несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости // Мат. мод. 2016. Т. 28, №10. С. 3–22.

*Блохин А. М., Семисалов Б. В.* Стационарное течение несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости в канале с эллиптическим сечением // СИБЖИМ. 2014. Т. XVII. №4 (60). С. 38–47.

*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.

*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.

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.*



Институт  
математики  
им. С.П.Соболева

# Спасибо за внимание!

Семисалов Б.В.    [vibis@ngs.ru](mailto:vibis@ngs.ru)

# Сколько стационарных решений допускает модель?

Величины  $\sigma$  и  $\mu$  связаны кубическим уравнением

$$a\sigma^3 + b\sigma^2 + c\sigma + d = 0, \quad \sigma \neq -1/W, \quad (21)$$

где  $a = \tilde{\beta}W$ ,  $b = \tilde{\beta} + 1$ ,  $c = W^{-1} + W\mu^2\tilde{\beta}$ ,  $d = \beta\mu^2$ ,  $\tilde{\beta} = 2\bar{k}/3 + \beta$ .

При использовании формул Кардано обнаружены следующие случаи:

1. Если для всех  $(y, z) \in \Omega$  существует **единственная действительная ветвь  $\sigma(\mu)$** , то коэффициенты (5) определяются однозначно.
2. Если для всех  $(y, z) \in \Omega$  существуют **три действительных ветви  $\sigma(\mu)$**  то имеется три гладких выражения для коэффициентов (5) и бесконечное множество разрывных выражений.
3. Если в некоторых точках  $(y, z) \in \Omega$  существуют **три действительных ветви  $\sigma(\mu)$** , а в других **одна ветвь**, то для коэффициентов (5) имеется единственное гладкое выражение и бесконечное множество разрывных.

Анализ (21) в [Blokhin, Semisalov, 2020] показал, что возможны только случаи 2,3. Если  $\hat{A} < A^*$ , то реализуется случай 2, иначе – случай 3.

Переключение между случаями 2 и 3 зависит также от параметров  $\beta$  и  $k$ .

# Научный задел. Основные этапы

- Разложение  $2\pi$ -периодических функций в ряд Фурье (1807 г.).  
Теоремы о сходимости (Дирихле, 1855; Дини, 1880; Лебег, 1909).
- Наилучшие равномерные приближения, многочлены Чебышёва (1854 г.), чебышёвские системы (Хаар, 1918, Колмогоров, 1948).
- Сходимость полиномиальных приближений в комплексной плоскости (Фабер, 1903; Бернштейн, 1912).
- Теорема Джексона о связи гладкости функции и порядка её наилучшего полиномиального приближения (1911).
- Обратные теоремы приближения (Бернштейн, 1912; Валле–Пуссен, 1919; Дзядык, 1956).

# Научный задел. Основные этапы

- Понятие класса и порядка насыщения метода приближения, алгоритмы без насыщения (Бабенко, 1975).
- Возникновение и развитие спектральных и псевдоспектральных методов на основе рядов Фурье и ортогональных многочленов за рубежом (D. Gottlieb, S. Orzag, 1977; L.N. Trefethen, 2000; J.P. Boyd, 2001; C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarteroni, T. A. Zang, 2006).

Развитие методов без насыщения для численного дифференцирования, интегрирования, решения спектральных и краевых задач для дифференциальных уравнений в настоящее время активно проводится в работах **В. Н. Белых, С. Д. Алгазина.**

# Важные этапы доказательства

Строится вспомогательный полином степени  $N + 3$ :

$$Q_{N+3}(x) = P_N^b(x) - T_N(x)[\tilde{a}x^3 + \tilde{b}x^2 + \tilde{c}x + \tilde{d}]/4,$$

где  $\tilde{a} - \tilde{d}$  содержат значения  $(P_N^b - u)'(\pm 1)$  и выбираются так, чтобы

$$Q_{N+3}(\pm 1) = u(\pm 1), \quad Q'_{N+3}(\pm 1) = u'(\pm 1), \quad Q_{N+3}(x_j^{ch}) = P_N^b(x_j^{ch}), \quad j = 1, \dots, N.$$

В итоге имеем

$$\|P_N^b(u) - Q_{N+3}\| \leq \frac{8}{27}(\Delta_N^b(1) + \Delta_N^b(-1)) + \left(\frac{3}{2} + N^2\right)E_N^b(u), \quad (22)$$

где

$$\Delta_N^b(\pm 1) = |u'(\pm 1) - (P_N^b)'(u, \pm 1)| \leq \sum_{k=N}^{\infty} |a_k| k^2 + \frac{2}{3\pi} N(N-1)(2N-1)E_N^b(u),$$

$$a_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{u(x) T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx.$$



# Оценка константы Лебега

Замена  $x = \cos t$  при  $t_j = \frac{(2j-1)\pi}{2N}$  даёт  $\Lambda_N^{H1} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{1}{\sin^3 t_j \cos t_j}$ .

Положим  $N = 2K$ . Используя идею из [Dzjadyk, Ivanov, 1983], запишем

$$\Lambda_K^{H1} = 2\bar{\lambda}_{2K} - \bar{\lambda}_K, \quad \bar{\lambda}_K = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^{K-1} \frac{1}{\sin^3 \vartheta_j \cos \vartheta_j}, \quad \vartheta_j = \frac{j\pi}{2K}. \quad (23)$$

Используем формулу Эйлера–Маклорена для функции

$$\varphi(z) = \frac{1}{\tilde{z}^3 - \tilde{z}^5 + (2/5)\tilde{z}^7} + \frac{1}{\pi/2 - \tilde{z}} - \frac{1}{\sin^3 \tilde{z} \cos \tilde{z}}, \quad \tilde{z} = \frac{z\pi}{2K}, \quad z \in [1, K]:$$

$$\sum_{j=0}^{K-1} \varphi(j) = \int_0^K \varphi(z) dz - \frac{1}{2} [\varphi(K) - \varphi(0)] + \frac{1}{12} \sum_{j=0}^{K-1} \varphi''(j+q), \quad 0 < q < 1. \quad (24)$$

Тогда 
$$\bar{\lambda}_K = \frac{1}{K} (B_K + C_K) + G + \frac{1}{2K} \lim_{z \rightarrow K} \varphi(z) - \frac{1}{12K} \sum_{j=0}^{K-1} \varphi''(j+q),$$

где  $G = -\frac{1}{K} \int_0^K \varphi(z) dz$ ,  $B_K = \left(\frac{2K}{\pi}\right)^3 \sum_{j=1}^{K-1} \frac{1}{j^3} \frac{1}{1 - \vartheta_j^2 + (2/5)\vartheta_j^4}$ ,  $C_K = \sum_{j=1}^{K-1} \frac{1}{\pi/2 - \vartheta_j}$ .

# Основная идея доказательства

Следуя идее [Baltensperger et.al, 1999], определим вспомогательную функцию

$$\mathfrak{x}(z, x) = \frac{z - x}{g(z) - g(x)}, \text{ такую что } \lim_{z \rightarrow x} \mathfrak{x}(z, x) = \frac{1}{g'(x)}. \quad (25)$$

Тогда

$$u(g(x)) = \frac{u(g(x))\mathfrak{x}(z, x)}{\mathfrak{x}(z, x)} \approx \lim_{z \rightarrow x} \frac{\tilde{\mathcal{P}}_N((u \circ g)\mathfrak{x}, x)}{p_N(\mathfrak{x}, x)} = \tilde{r}_N(u, g(x)). \quad (26)$$

Для доказательства последнего равенства используем формулы:

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow x} p_N(\mathfrak{x}, x) &= \lim_{z \rightarrow x} \frac{T_N(x)}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{x - x_j^{ch}} \frac{z - x_j^{ch}}{g(z) - g(x_j^{ch})} = \frac{T_N(x)}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{\tilde{x} - x_j}, \\ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{1 - g(x_j^{ch})} &= \frac{1}{g'(1)} - \epsilon_N^1, \quad \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{(1 - g(x_j^{ch}))^2} = \frac{N^2}{g'(1)} + \frac{g''(1)}{(g'(1))^2} + \tilde{\epsilon}_N^1, \end{aligned}$$

где  $\epsilon_N^1$ ,  $\tilde{\epsilon}_N^1$  содержат погрешности приближения функции  $1/g'(x)$  и  $(1/g'(x))'$  полиномами  $p_N$  и  $p'_N$  (полагается, что  $g' \neq 0$  и  $1/g'(x)$  Липшицева).

# Анализ течения между двумя цилиндрами

Стационарные профили скорости и температуры для различных значений градиента давления в дюзе с круглым сечением и внутренним нагревательным элементом при

$$\overline{E}_A = 0.614, \beta = 0.05, k = 1.2\beta, A = 0.2, l = 0.1\text{mm},$$

# Интегрирование по бесконечной области.

## Формулы с экспоненциальной сходимостью Такахаши–Мори

В интеграле  $I = \int_0^{\infty} f(y) dy$  делаем замену  $y(u) = \exp(\frac{\pi}{2} \sinh u)$ ,  $u \in \mathbb{R}$ !

и строим квадратуру  $I(h, N) = \frac{\pi}{2} h \sum_{n=-N}^N f(y(nh)) (\cosh(nh)) y(nh)$ , здесь  $h$  – шаг сетки квадратуры,  $nh$  – узлы сетки.

### Теорема [Takahasi, Mori, 1974]

$I \approx I(h, \infty) \approx I(h, N)$ , причём при  $h \approx \frac{1}{N} \log(4\theta N)$  имеем

$$|I - I(h, \infty)| \approx |I(h, \infty) - I(h, N)| \sim \exp \left\{ -\frac{2\pi\theta}{\log(4\theta N)} N \right\} \quad (27)$$

Здесь  $\theta > 0$  – характеристика расстояния от  $\mathbb{R}$  до ближайшей особенности  $f$  в  $\mathbb{C}$ .

Доказательство теоремы использует формулу Эйлера–Маклорена.

# Численные эксперименты и исследование насыщенности метода

# Сравнение с конечно-разностными схемами

Рассмотрим 1D задачу с решением  $e^x$ :

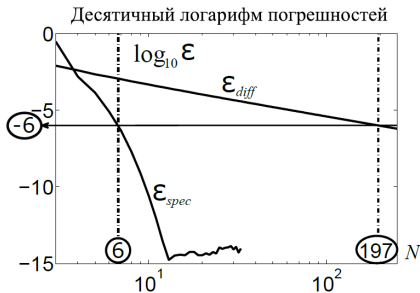
$$u_{xx} = u^2 e^{-x}, u(\pm 1) = e^{\pm 1} \quad (28)$$

и найдём её решение, используя  
– конечно-разностный метод с 3-х точечной аппроксимацией производной (*diff*),

– предложенный метод (*spec*).

Зафиксируем порядок точности  $10^{-6}$  и

положим  $u_{ex,j} = u_{ex}(x_j)$ ,  $M = \max_{j=1,\dots,N} u_{ex,j}$ ,  $\varepsilon_{spec,diff} = M^{-1} \max_{j=1,\dots,N} |u_{ex,j} - u_j|$ .



Число узлов, необходимое для достижения точности  $10^{-6}$

197 для конечных разностей и 6 для предложенного метода

Рассмотрим ещё 2D и 3D задачи для уравнений с решениями-экспонентами:

$$u_{xx} + u_{yy} = 2u^2 e^{-x-y}, \quad u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} = 3u^2 e^{-x-y-z}. \quad (29)$$

## Оценки числа операций и затрат памяти на каждой итерации

Размерность задачи	Оценка числа операций		Число операций		Выигрыш спец
	diff	спец	diff	спец	
$d = 1$	$8N$	$6N^2$	1576	216	в 7 раз
$d = 2$	$16N^2$	$10N^3$	620944	2160	в 287 раз
$d = 3$	$24N^3$	$14N^4$	$1.835 \times 10^8$	18144	в 10 112 раз

Размерность задачи	Оценка затрат памяти	Память, необходимая для		Выигрыш спец
		diff	спец	
$d = 1$	$Ns$	$3 \times 197s$	$(3 \times 36 + 10 \times 6)s$	в 3 раза
$d = 2$	$N^2s$	$4 \times 197^2s$	$(14 \times 36 + 6)s$	в 304 раза
$d = 3$	$N^3s$	$5 \times 197^3s$	$(3 \times 36 + 6 + 13 \times 216)s$	в 13 082 раза

## Результаты численных экспериментов с погрешностью не выше $10^{-6}$

$d$	Метод	$\tau$	$N$	Число шагов	время (мс)	память (Мб)
1	diff	1.0	197	5	10	0.01
	спец	0.5	6	5	4	0.00137
	Выигрыш спец			—	в 2.5 раза	в 7.3 раза
2	diff	0.006	149	310	1914	0.179
	спец	0.24	6	8	13	0.00179
	Выигрыш спец			в 39 раз	в 147 раз	в 100 раз
3	diff	0.00013	119	3913	3009965	141.4
	спец	0.172	6	14	37	0.019
	Выигрыш спец			в 280 раз	в 81 350 раз	в 7 442 раза

# Численное исследование насыщенности

Рассмотрим одномерные нелинейные задачи:

$$\begin{cases} u'' = \frac{2}{x^6} u^3, & \begin{cases} v'' = 6\sqrt[3]{|u|}, \\ v(\pm 1) = 1, \end{cases} & \begin{cases} w'' = 12x\sqrt[4]{|u|}, \\ w(\pm 1) = \pm 1, \end{cases} \end{cases} \quad (30)$$

с решениями

$$u(x) = \begin{cases} -x^2, & x \in I_1, \\ x^2, & x \in I_2, \end{cases} \quad v(x) = \begin{cases} -x^3, & x \in I_1, \\ x^3, & x \in I_2, \end{cases} \quad w(x) = \begin{cases} -x^4, & x \in I_1, \\ x^4, & x \in I_2, \end{cases}$$

где  $I_1 = [-1, 0]$ ,  $I_2 = (0, 1]$ .

Функции  $u, v, w$  являются 1, 2 и 3 раза непрерывно дифференцируемыми;

$u'/2 = v''/6 = w'''/24 = |x| \Rightarrow$  первые модули непрерывности  $u', v'', w'''$  есть  $\omega(|x|; q) = q$ . Значит, вследствие теоремы Джексона,  $E_N^b(u) = O(N^{-2})$ ,  $E_N^b(v) = O(N^{-3})$ ,  $E_N^b(w) = O(N^{-4})$  при  $N \rightarrow \infty$ , [Дзядык, 1977, гл. VI].

По теореме 1 порядок сходимости приближения  $\tilde{p}_N$  определяются величиной  $E_N^b$ , то есть, для функций  $u, v, w$  порядки равны 2, 3, 4 соответственно.



# Численное исследование насыщаемости

Рассмотрим также 2D и 3D задачи:

$$\begin{cases} \Delta U = 12xy(x^2 + y^2)\sqrt[4]{|U|}, \\ U(\pm 1, y) = \pm \operatorname{sgn}(x)y^4, \\ U(x, \pm 1) = \pm \operatorname{sgn}(y)x^4, \end{cases} \begin{cases} \Delta V = 12z \operatorname{sgn}(xy)(x^2 + y^2)\sqrt[3]{|V|} + \frac{2V}{z^2}, \\ V(\pm 1, y, z) = \pm \operatorname{sgn}(yz)y^4z^2, \\ V(x, \pm 1, z) = \pm \operatorname{sgn}(xz)x^4z^2, \\ V(x, y, \pm 1) = \pm \operatorname{sgn}(xy)x^4y^4 \end{cases} \quad (31)$$

с решениями  $U(x, y)$  и  $V(x, y, z)$ , имеющими три и одну непрерывные производные:

$$U(x, y) = \begin{cases} -x^4, & x \in I_1, \\ x^4, & x \in I_2, \end{cases} \times \begin{cases} -y^4, & y \in I_1, \\ y^4, & y \in I_2, \end{cases} \quad V(x, y, z) = U(x, y) \times \begin{cases} -z^2, & z \in I_1, \\ z^2, & z \in I_2. \end{cases}$$

В численных экспериментах получена сходимость и рассчитан её порядок

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

$N$	$\varepsilon_{spec}(u)$	$R_N(u)$	$\varepsilon_{spec}(v)$	$R_N(v)$	$\varepsilon_{spec}(w)$	$R_N(w)$	$R_N(U)$	$R_N(V)$
4	6.7E-03	—	1.7E-02	—	4.7E-03	—	—	—
8	2.5E-03	1.4	1.9E-03	3.2	3.3E-04	3.8	4.2	1.1
16	5.4E-04	2.2	2.3E-04	3.0	1.9E-05	4.1	4.1	1.2
32	1.3E-04	2.1	2.9E-05	3.0	1.2E-06	4.0	3.6	1.0
64	3.2E-05	2.0	3.6E-06	3.0	7.4E-08	4.0	3.8	1.3
128	7.9E-06	2.0	4.5E-07	3.0	4.6E-09	4.0	3.8	—
Среднее $R_N$		1.95	—	3.05	—	3.995	3.9	1.14

# Численное исследование насыщаемости

Рассмотрим также 2D и 3D задачи:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta U = 12xy(x^2 + y^2) \sqrt[4]{|U|}, \\ U(\pm 1, y) = \pm \operatorname{sgn}(x)y^4, \\ U(x, \pm 1) = \pm \operatorname{sgn}(y)x^4, \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} \Delta V = 12z \operatorname{sgn}(xy)(x^2 + y^2) \sqrt[3]{|V|} + \frac{2V}{z^2}, \\ V(\pm 1, y, z) = \pm \operatorname{sgn}(yz)y^4 z^2, \\ V(x, \pm 1, z) = \pm \operatorname{sgn}(xz)x^4 z^2, \\ V(x, y, \pm 1) = \pm \operatorname{sgn}(xy)x^4 y^4. \end{array} \right. \quad (32)$$

Асимптотика погрешности предложенного метода строго соответствует оценкам погрешности наилучших полиномиальных приближений. Использование метода коллокаций и метода установления не снижает порядок сходимости.

$N$	$\varepsilon_{\text{spec}}(u)$	$R_N(u)$	$\varepsilon_{\text{spec}}(u)$	$R_N(v)$	$\varepsilon_{\text{spec}}(u)$	$R_N(w)$	$R_N(U)$	$R_N(V)$
4	6.7E-03	—	1.7E-02	—	4.7E-03	—	—	—
8	2.5E-03	1.4	1.9E-03	3.2	3.3E-04	3.8	4.2	1.1
16	5.4E-04	2.2	2.3E-04	3.0	1.9E-05	4.1	4.1	1.2
32	1.3E-04	2.1	2.9E-05	3.0	1.2E-06	4.0	3.6	1.0
64	3.2E-05	2.0	3.6E-06	3.0	7.4E-08	4.0	3.8	1.3
128	7.9E-06	2.0	4.5E-07	3.0	4.6E-09	4.0	3.8	—
Среднее $R_N$		1.95	—	3.05	—	3.995	3.9	1.14

# Приложения разработанного метода

- Рассчитаны установившиеся неизотермические течения несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости в каналах с сечениями круглой, прямоугольной и эллиптической форм с внутренними включениями. Произведена верификация расчётов при сравнении с результатами методов конечных разностей и конечных элементов.
- Произведён многопараметрический численный анализ реализуемости устойчивых течений в приложениях, связанных с 3D печатью; сформулирован сценарий потери устойчивости за счёт появления у решения особой точки в комплексной плоскости с последующим выходом этой точки в область решения.
- Решены задачи о переносе заряда в кремниевых транзисторах MESFET и DG-MOSFET. Проведены расчёты для предельно малых значений безразмерной плотности легирования и диэлектрической постоянной полупроводникового канала. Получены вольт-амперные характеристики.
- Разработанные приближения использованы также для создания новой кубатурной формулы. При её использовании найдено численное решение кинетического уравнения с интегралом столкновений в правой части, описывающего турбулентные режимы течения бозе-газа.