*Работа посвящена памяти академика
Владимира Евгеньевича Захарова
(1939–2023 гг.), внесшего
огромный вклад в развитие теории нелинейного
взаимодействия волн в системах гидродинамического типа.*

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЧЕТЫРЕХВОЛНОВОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ В ЗАДАЧАХ ВОЛНОВОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ¹⁾

© 2024 г. Б. В. Семисалов^{1,2,3,*}, С. Б. Медведев^{2,3},
С. В. Назаренко⁴, М. П. Федорук^{3,2}

¹630090 Новосибирск, пр-т Акад. Коптюга, 4,

Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Россия

²630090 Новосибирск, пр-т Акад. Лаврентьева, 6,

Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий,

³630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 1, Новосибирский государственный университет,

⁴Université Côte d'Azur, CNRS, Institut de Physique de Nice (INPHYNI),

17 rue Julien Lauprêtre 06200 Nice, France

*e-mail: vibis87@gmail.com

Поступила в редакцию 29.06.2023 г.

Переработанный вариант 15.09.2023 г.

Принята к публикации 20.10.2023 г.

Предложен метод численного решения четырехволновых кинетических уравнений, возникающих в задачах волновой (слабой) турбулентности при описании однородного изотропного взаимодействия волн. Для расчета интеграла столкновений разработаны быстросходящиеся кубатурные формулы, позволяющие адаптировать алгоритм к особенностям решений и ядер интегралов. Проведены эксперименты на сходимость в задачах интегрирования из реальных приложений. Для учета существенной разномасштабности задач турбулентности в алгоритме реализованы и протестированы дробно-рациональные приближения решений и новая схема итераций по времени. Эффективность разработанного алгоритма продемонстрирована при моделировании обратного каскада частиц бозе-газа при формировании конденсата Бозе–Эйнштейна. Библ. 51. Фиг. 10. Табл. 1.

Ключевые слова: волновая турбулентность, кинетическое уравнение, нелинейное взаимодействие волн, расчет интеграла столкновений, особая точка, кубатурная формула, экспоненциальная сходимость, дробно-рациональное приближение, адаптивный метод, метод коллокаций, метод установления, нелинейное уравнение Шрёдингера, конденсация Бозе–Эйнштейна, волны на глубокой воде.

DOI: 10.31857/S0044466924020136, EDN: YIZWIJ

1. ВВЕДЕНИЕ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Выявление механизмов возникновения и развития турбулентных течений в жидкостях, газах и плазме остается одной из открытых проблем современной физики. Важную роль в этой проблеме играют процессы передачи энергии и других инвариантов между разномасштабными возмущениями. Такие процессы, называемые каскадами, возникают во многих нелинейных физических системах и характеризуются стационарными потоками инвариантов между масштабами, на которых происходит накачка и диссипация этих инвариантов [1, 2, 3].

Дальнейшие исследования показали, 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, возникновение неустойчивых стационарных

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 22-11-00287).

спектров, автомодельные режимы первого и второго рода, взрывной рост значений спектра и многое другое. Попытки математического исследования этих эффектов в последние десятилетия привели к бурному развитию теории волновой турбулентности (ТВТ) [4, 5], центральным объектом которой является кинетическое уравнение (КУ) с интегралом столкновений в правой части, описывающее волновые взаимодействия в гамильтоновых нелинейных физических системах [6].

К настоящему времени для КУ получено немного строгих результатов. Наиболее известными из них являются спектры Колмогорова–Захарова, представляющие точные стационарные решения КУ и описывающие каскадные процессы. Основным инструментом исследования эволюции решения КУ остается численное моделирование. Однако и здесь возникают существенные сложности, связанные с нелинейностью КУ, свойствами ядер интегралов столкновения, неограниченностью областей интегрирования, и самое главное с тем, что частотные диапазоны, в которых ищутся решения КУ (отличия частот накачки и диссипации энергии), могут достигать десяти декад, то есть градиенты решений могут варьироваться в пределах десяти 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 нем осредненное (сглаженное) поведение спектра.

В данной работе предложен один подход к решению *четырёхволновых КУ*, которые описывают появление двух новых волн при взаимодействии двух других волн. Как правило, такие КУ возникают в физических системах с кубической нелинейностью (например, в системах, описываемых *нелинейным уравнением Шрёдингера, НУШ*, см. [7, 8]). Четырёхволновые КУ также могут быть получены для систем с квадратичной нелинейностью, в которых трехволновые резонансы невозможны (см. [9] и более простой способ исключения нерезонансных членов в приложении А.3 [5]). Кроме того, подобные КУ могут быть выведены из уравнения Больцмана при соответствующем виде функции распределения частиц, [10].

В [4] (см. гл. 6) сформулирован общий подход к выводу КУ в предположении слабой нелинейности волновых взаимодействий. В рамках этого подхода считается, что амплитуды и фазы волн являются независимыми случайными величинами, и, кроме того, фазы имеют равномерное распределение. На основе указанных предположений получен общий вид четырёхволновых КУ:

$$\begin{aligned} \frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} = & \int_{\mathbb{R}^{3d}} |W_{12}^{\mathbf{k}^3}|^2 \delta_{12}^{\mathbf{k}^3} \delta(\omega_{12}^{\mathbf{k}^3}) n_1 n_2 n_{\mathbf{k}} \times \\ & \times \left[\frac{1}{n_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{n_3} - \frac{1}{n_1} - \frac{1}{n_2} \right] d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3, \end{aligned} \tag{1.1}$$

где $d \in \{2, 3\}$ — размерность физической системы, $n_{\mathbf{k}} = n(\mathbf{k}, t)$ — спектр волнового действия, т.е. спектр инварианта физической системы, $\mathbf{k}$ — волновой вектор в d -мерном пространстве Фурье, $t > 0$ — время, $W_{12}^{\mathbf{k}^3} = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$ — коэффициент взаимодействия волн $\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$, возникающий при записи гамильтониана в пространстве Фурье (см. [4], п. 6.8); $n_i = n(\mathbf{k}_i, t)$, $i = 1, 2, 3$, $\delta_{12}^{\mathbf{k}^3} = \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ — дельта функция Дирака, $\delta(\omega_{12}^{\mathbf{k}^3}) = \delta(\omega + \omega_3 - \omega_1 - \omega_2)$, ω_i — частота волны $\mathbf{k}_i$.

Существенный интерес представляет *однородный изотропный случай*. В таком случае решение КУ зависит только от модуля волнового вектора $n_{\mathbf{k}} = n(k, t)$, $k = |\mathbf{k}|$, и уравнение (1.1) допускает осреднение по угловым координатам в пространстве Фурье. В результате в правой части возникают новые переменные интегрирования $k_i = |\mathbf{k}_i|$, $i = 1, 2, 3$. Далее на основе дисперсионного соотношения волновое число k выражается через частоту волны ω , и используется сдвиговое свойство дельта функции $\delta(\omega_{12}^{\mathbf{k}^3})$. В итоге получается уравнение

$$\begin{aligned} \frac{dn_{\omega}}{dt} = St_{\omega}(n) = & \int_{\Delta_{\omega}} \mathcal{P}(\omega, \omega_2, \omega_3) \times \\ & \times [n_{\delta} n_2 n_3 + n_{\omega} (n_2 n_3 - n_{\delta} n_3 - n_{\delta} n_2)] d\omega_2 d\omega_3, \end{aligned} \tag{1.2}$$

где $n_{\omega} = n(\omega, t)$ — спектр волнового действия, зависящий от частоты волны ω , $n_i = n(\omega_i, t)$, $i = 2, 3$, $n_{\delta} = n(\omega_{\delta}, t)$, $\omega_{\delta} = \omega_2 + \omega_3 - \omega$,

$$\Delta_{\omega} = \{(\omega_2, \omega_3) : \omega_2 \geq 0, \omega_3 \geq 0, \omega_2 + \omega_3 \geq \omega\}$$

есть двумерная область интегрирования (см. серую область на фиг. 1а). Ядро $\mathcal{P}(\omega, \omega_2, \omega_3)$ интеграла столкновений, как правило, является неограниченной функцией, содержащей существенные особенности.

Фиг. 1. Область интегрирования Δ_ω : неограниченная серая область при $\omega \in [0, \infty)$, ограниченная заштрихованная область при $\omega \in [0, \omega_{\max})$ (а); ядро интеграла столкновений, описывающее взаимодействия поверхностных волн на глубокой воде в однородном изотропном случае (б).

Приведем два примера приложений, где возникают уравнения вида (1.2) (другие приложения обсуждаются в [5], гл. 5).

Пример 1. Физические системы, описываемые уравнением Шредингера с кубической нелинейностью, возникающие в оптике, космологии, динамике сверхтекучих жидкостей и бозе-газа (см. [11, 12, 13]). В таких системах коэффициент взаимодействия $W_{12}^{k^3} \equiv 1$ и при отсутствии стабильных когерентных структур (в неакустическом режиме) дисперсионное соотношение есть $\omega = k^2$. Кроме того, в трехмерном случае удается вывести явное выражение для $\mathcal{P}(\omega, \omega_2, \omega_3)$ (см. приложение А из [8]):

$$\mathcal{P}(\omega, \omega_2, \omega_3) = \frac{4\pi^3}{\sqrt{\omega}} \min[\sqrt{\omega}, \sqrt{\omega_2}, \sqrt{\omega_3}, \sqrt{\omega_2 + \omega_3 - \omega}]. \tag{1.3}$$

Пример 2. Динамика волн на поверхности глубокой воды. В этом приложении $W_{12}^{k^3}$ имеет сложный вид [14] (см. также некоторые приближенные формулы из [15]), и явную формулу для $\mathcal{P}(\omega, \omega_2, \omega_3)$ в общем случае получить не удастся, имеется лишь интегральное выражение, представляющее осреднение по угловым координатам в пространстве Фурье. Из него с использованием квадратурных формул удается вычислить $\mathcal{P}$ при различных $\omega, \omega_2, \omega_3$, см. фиг. 1б. Здесь дисперсионное соотношение $\omega = \sqrt{gk}$, g — ускорение свободного падения.

Отметим, что в рассмотренных примерах ядро $\mathcal{P}$ содержит особенности (изломы и/или большие градиенты) в окрестности линий $\omega_2 = \omega, \omega_3 = \omega$ (штриховые линии на фиг. 1а) и в окрестности границы $\Delta_\omega: \omega_2 = 0, \omega_3 = 0$ и $\omega_2 + \omega_3 = \omega$. Это типичная ситуация для четырехволновых КУ.

Характерное поведение решения (1.2) — степенная функция. В частности точные решения (1.2) с ядром (1.3), спектры Колмогорова–Захарова, есть

$$n_\omega \sim \omega^{-7/6}, \quad n_\omega \sim \omega^{-3/2} \ln^{-1/3} \frac{\omega}{\omega_f}, \quad \omega \gg \omega_f, \tag{1.4}$$

где ω_f — частота накачки. О выводе, верификации и валидации таких решений подробно написано в [16]. Как отмечено выше, подобные решения реализуются, когда в системе имеется накачка и диссипация инвариантов, действующие на существенно разных масштабах (дистанция между ними в спектральном пространстве может достигать десяти декад). Для моделирования накачки и диссипации к уравнению (1.2) нужно добавить соответствующие члены:

$$\begin{aligned} \frac{dn_\omega}{dt} = & \underbrace{St_\omega(n) + \frac{c_f}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\omega - \omega_f}{\sigma}\right)^2\right]}_{\text{накачка}} - \\ & \underbrace{\left[(\omega / \omega_L)^{-p} + (\omega / \omega_R)^q \right] n_\omega}_{\text{диссипация}}, \end{aligned} \tag{1.5}$$

где $c_f, \sigma, \omega_f, \omega_L, \omega_R, p, q$ — положительные параметры: ω_L, ω_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 производных диссипативных членов в уравнениях динамики рассматриваемой среды; c_f, σ характеризуют градиент спектра накачки. Отметим, что градиенты членов, описывающих накачку и диссипацию, могут отличаться на несколько порядков.

Численное решение уравнений (1.2) и (1.5) 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_ω при $\omega > \omega_{\max}$ пренебрежимо малы (см., например, приложение В из [8]), а область интегрирования Δ_ω 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 фиг. 1а. В заключении этого параграфа сформулируем две важные задачи, возникающие при разработке вычислительных алгоритмов решения уравнений (1.2) и (1.5) в указанной постановке.

Задача 1. Разработка быстросходящихся кубатурных формул в подобластях на фиг. 1а. Ключевой здесь является проблема расчета интегралов вида

$$I^g = I^g[f] = \int_{-1}^1 g(x)f(x)dx, \tag{1.6}$$

где $g(x)$ имеет точки ветвления или другие особенности на границах отрезка $[-1, 1]$, $f(x)$ — функция высокого порядка гладкости. Действительно, подстановка степенного решения из (1.4) в правую часть (1.2) и анализ задачи интегрирования вдоль переменной ω_2 в подобласти Π_2 на фиг. 1а (или вдоль переменной ω_3 в подобласти Π_1) приводит к выражению (1.6), в котором $g(x) = (1+x)^\beta$, $\beta > -1$. Причем, при поиске нестационарных решений (при эволюции спектра к стационарному режиму) β является априори неизвестной величиной и может изменяться со временем.

С другой стороны, при наличии особенностей у ядра $\mathcal{P}$ в окрестности линий $\omega_2 = \omega, \omega_3 = \omega$ при интегрировании вдоль переменной ω_2 в подобласти Π_2 (вдоль переменной ω_3 в подобласти Π_1 , а также при интегрировании по Δ_0) мы также можем прийти к выражению (1.6), где $g(x)$ имеет особые точки в малых окрестностях $x = -1$ или $x = 1$, тип которых (полюс, точка ветвления, существенно особая точка) неизвестен.

Задача 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 ω (градиентам функций, задающих накачку и диссипацию в (1.5), или градиентам спектра при взрывном росте его значений, по поводу последнего см. [19, 18, 17]) возникает проблема построения устойчивой схемы для итераций по времени с шагом, существенно превышающим минимальное расстояние между узлами сетки по переменной ω . По аналогии с условиями Куранта–Фридрихса–Леви явные схемы здесь не будут эффективными. Адаптивные схемы на основе методов Рунге–Кутты, апробированные авторами при получении решений из [16], также привели к неприемлемому уменьшению шага по t и большим временным затратам.

Целью настоящей работы является конструирование, обоснование и реализация алгоритмов решения задач 1, 2 и применение этих алгоритмов для численного моделирования волновой кинетики на основе уравнений (1.2), (1.5).

2. МЕТОДЫ РАСЧЕТА ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ

Прежде всего отметим, что для перехода к расчету интеграла вида (1.6) при интегрировании по треугольным подобластям $\Delta_0 - \Delta_4$ необходимо применить отображения стандартного квадрата $Sq = \{(x_1, x_2) : -1 \leq x_1, x_2 \leq 1\}$ на $\Delta_0 - \Delta_4$ [20]. К примеру, такое отображение для области Δ_0 и соответствующий Якобиан имеют вид:

$$\omega_2(x_1, x_2) = -\frac{\omega}{8}[3x_1 - x_2(x_1 + 1) - 1] + \frac{\omega}{2}, \tag{2.1}$$

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

$$J(x_1, x_2) = \left(\frac{\omega^2}{16}\right)(2 - x_1 - x_2).$$

Таким образом, если $\varphi(\omega_2, \omega_3)$ — подынтегральная функция (1.2), то интеграл по Δ_0 от $\varphi(\omega_2, \omega_3)$ сводится к интегралу по 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 Sq , поэтому особенности $\tilde{\varphi}(x_1, x_2)$ лежат на сторонах Sq , т.е. в точках $x_1 = \pm 1$ при $x_2 \in [-1, 1]$ и в точках $x_2 = \pm 1$ при $x_1 \in [-1, 1]$.

Интегралы по подобластям Π_1, Π_2 сводятся к интегралам по Sq с помощью линейных замен переменных. Задачу интегрирования по Sq с помощью теоремы Фубини легко свести к нахождению повторных интегралов вида (1.6) по стандартному отрезку $[-1, 1]$ с указанными особенностями в точках $x = \pm 1$. Для решения проблемы интегрирования используем фундаментальные результаты теории ортогональных функций (квадратурные формулы максимального алгебраического порядка точности), теории меры (обобщенное неравенство Маркова–Стилтьеса) и теории разностных аппроксимаций (формула Эйлера–Маклорена). Конкретно, нам потребуются нижеследующие теоретические результаты.

1. Квадратурные формулы Гаусса–Якоби. Пусть в формуле (1.6) $g(x) = \gamma(x) = (1 - x)^\alpha (1 + x)^\beta$, $\alpha > -1$, $\beta > -1$. 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 δ_{mn} — символ Кронекера. Пусть $\lambda_n > 0$ — коэффициент при старшей степени полинома p_n , а $x_1, \dots, x_n$ — корни p_n , которые являются попарно различными, принадлежащими отрезку $[-1, 1]$ числами (о свойствах ортогональных многочленов и их корней см. [21], гл. 1, 2). Тогда для расчета интеграла (1.6) имеет место квадратурная формула:

$$I^g[f] \approx I_n^\gamma = I_n^\gamma[f] = \sum_{k=1}^n w_k f(x_k), \tag{2.2}$$

$$w_k = -\frac{\lambda_{n+1}}{\lambda_n} \frac{1}{p_{n+1}(x_k) p_n'(x_k)}.$$

Числа x_k и w_k называются соответственно узлами и весами квадратурной формулы I_n^γ , $k = 1, \dots, n$.

Для весов имеет место более удобное представление: $w_j = [\sum_{k=0}^n (p_k(x_j))^2]^{-1}$, см. [22], с. 48. Имеются также алгоритмы быстрого вычисления узлов и весов с помощью построения матрицы Якоби (см. [23], п. 2.7.5 и [24], гл. 12, gauss.m).

Рассмотрим функционал погрешности формулы (2.2): $E_n^\gamma[f] = I^g - I_n^\gamma$. Для $E_n^\gamma[f]$ имеется классическая оценка через супремум норму $\|f^{(2n)}\|$, см. [23], стр. 98. Однако в случае ограниченной гладкости $f(x)$ или при наличии у ее аналитического продолжения особых точек в комплексной плоскости, величина $\|f^{(2n)}\|$ может не существовать, либо расти слишком быстро, чтобы гарантировать сходимость. В связи с этим целесообразно применять более общую оценку погрешности.

Теорема 1. Для функционала погрешности квадратуры (2.2) имеет место оценка (см. [25], гл. 5, § 3, п. 3)

$$|E_n^\gamma[f]| \leq 2E_{2n}^b[f] \int_{-1}^1 \gamma(x) dx, \tag{2.3}$$

где $E_n^b[f]$ — погрешность наилучшего приближения функции f полиномом степени не выше n . Скорость убывания величины $E_n^b[f]$ связана со свойствами гладкости f . Конкретно, имеют место следующие оценки (см. [26], гл. 7, 8):

1. Пусть $v \geq 1$, $f(x) \in C^{v-1}[-1,1]$, $f^{(v)} \in L[-1,1]$ имеет ограниченную вариацию: $\int_{-1}^1 |f^{(v)}(x)| dx \leq V$, тогда при любых $n > v$

$$|E_n^b[f]| \leq \frac{2V}{\pi v(n-v)^v}. \tag{2.4}$$

2. Пусть $f(x)$ — аналитична на отрезке $[-1,1]$ и имеет аналитическое продолжение $f(z)$ в эллипс Бернштейна E_ρ с суммой полюсов $\rho > 1$, $z \in E_\rho \subset \mathbb{C}$. Пусть на контуре эллипса $|f(z)| \leq M$. Тогда

$$|E_n^b[f]| \leq \frac{2M\rho^{-n}}{\rho-1}. \tag{2.5}$$

Отметим важный нюанс: оценки (2.4), (2.5) доказаны для приближений Фурье-Чебышёва. Однако, как показано в [27], такие приближения являются ненасыщаемыми, то есть при любой гладкости $f(x)$ порядок их сходимости совпадает с порядком сходимости наилучшего полиномиального приближения.

2. Формулы Гаусса для функций с разрывами второго рода. Квадратурная формула, описанная выше, при поиске интегралов (1.6) с функцией $f(x)$ высокой гладкости является оптимальной (имеет наивысшую алгебраическую степень точности), если известен вид функции $g(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$. Однако, как отмечено во введении, числа α, β могут меняться, а также возможны случаи, когда вид функции $g(x)$ неизвестен, но известно, что $g(x)$, либо ее производные терпят разрыв второго рода в окрестностях точек ± 1 . В таком случае полезным является следующий результат, полученный с применением обобщенного неравенства Маркова–Стилтьеса (см. лемму 6.1 в [28]). Здесь и далее будем использовать обозначение $\psi(x) = g(x)f(x)$.

Лемма 1. Пусть интегранд (1.6), $\psi(x)$, и все его производные до порядка $2n$ существуют и непрерывны на интервале $(-1,1)$, и $\psi^{(j)}(x) \geq 0$ при $x \in (-1,1)$, $j = 0,1,\dots,2n$ (далее множество таких функций будем обозначать $M_{2n}^+(-1,1)$). Построим классическую квадратурную формулу Гаусса (КФГ) I_n^1 (формулу (2.2) при $\gamma(x) \equiv 1$) для приближения интеграла (1.6) и обозначим $E_n^1[\psi] = I_n^g[f] - I_n^1[\psi]$. Тогда

$$\max \left\{ \int_{x_n}^1 \psi(x) dx - w_n \psi(x_n), 0 \right\} \leq E_n^1[\psi] \leq \int_{x_n}^1 \psi(x) dx. \tag{2.6}$$

Если же $\psi^{(j)}(x) \leq 0$ при $x \in (-1,1)$, $j = 0,1,\dots,2n$ (далее множество таких функций обозначено $M_{2n}^-(-1,1)$), то

$$\max \left\{ \int_{-1}^{x_1} \psi(x) dx - w_1 \psi(x_1), 0 \right\} \leq E_n^1[\psi] \leq \int_{-1}^{x_1} \psi(x) dx. \tag{2.7}$$

Из приведенного утверждения можно получить следующий результат.

Лемма 2. Если в (1.6) $f(x) \in C^{v-1}[-1,1]$, $v \geq 1$, $g(x) = (1-x)^\alpha$, α — нецелое число, $-1 < \alpha < v/2 - 1$, и $\psi \in M_{2n}^+(-1,1)$, то

$$|E_n^1[\psi]| \leq M \frac{j_1^{2(\alpha+1)}}{2^{\alpha+1}(1+\alpha)} n^{-2(1+\alpha)} \text{ при всех } n = 1,2,\dots, \tag{2.8}$$

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

$$\left| E_n^1[\Psi] \right| \sim C_{\alpha, M} n^{-2(1+\alpha)}, \text{ где } \frac{j_1^{2(\alpha+1)}}{2^{\alpha+1}} \left(\frac{M}{1+\alpha} - \pi \right) \leq C_{\alpha, M} \leq \frac{M j_1^{2(\alpha+1)}}{2^{\alpha+1}(1+\alpha)}. \quad (2.9)$$

Если в условиях леммы $\nu > \alpha/2 - 1$, то имеют место оценки вида (2.3), (2.4) при $\gamma(x) = 1$.

На практике достаточно требовать монотонность подинтегральной функции и ее 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 2 имеет место при $g(x) = (1+x)^\beta$, где $-1 < \beta$ — нецелое число.

В этой работе предложена и проверена численно идея об улучшении оценок (2.8), (2.9) за счет замены переменной интегрирования в (1.6) вида $x = h(y)$, где $h(y)$ конформно отображает отрезок $[-1, 1]$ в себя, $h(-1) = -1$, $h(1) = 1$. Такая замена приводит к интегралу

$$I^g[f] = \int_{-1}^1 g(h(y)) f(h(y)) h'(y) dy. \quad (2.10)$$

Далее для расчета (2.10) будем применять КФГ с узлами $y_1, \dots, y_n$ и рассмотрим три вида функций $h(y)$.

Теорема 2. Пусть $f(x) \in C^{\nu-1}[-1, 1]$, $\nu \geq 1$, интегранд (1.6) имеет особенность в одной из точек $x = \pm 1$, $g(x) = (1 \mp x)^\alpha$, α — нецелое число, $-1 < \alpha < \nu/2 - 1$, и $\psi \in \mathcal{M}_{2n}^\pm(-1, 1)$.

1. Зададим

$$h(y) = h_\pm(y) = \pm 1 + \varepsilon \sinh \left[\frac{y \mp 1}{2} \sinh^{-1} \frac{2}{\varepsilon} \right], \quad (2.11)$$

где $\varepsilon > 0$ — малое число, $\sinh^{-1}$ — обратная функция к $\sinh$. Тогда погрешность КФГ при вычислении (2.10) удовлетворяет оценке:

$$\left| E_n^1[\Psi] \right| \leq \frac{M \tilde{\varepsilon}}{2^{\alpha+1}} \frac{j_1^{2(\alpha+1)}}{2^{\alpha+1}(1+\alpha)} n^{-2(1+\alpha)}, \quad (2.12)$$

$$\tilde{\varepsilon} \sim \varepsilon \ln[1/\varepsilon] \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0.$$

2. Пусть

$$h(y) = \sin(\pi y / 2). \quad (2.13)$$

Тогда погрешность КФГ при вычислении (2.10) удовлетворяет оценке:

$$\left| E_n^1[\Psi] \right| \leq M \frac{(j_1^2 \pi)^{2(\alpha+1)}}{2^{5(\alpha+1)}(1+\alpha)} n^{-4(1+\alpha)}. \quad (2.14)$$

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

$$h(y) = \tan \left[A \sinh \frac{2By}{1-y^2} \right], \quad (2.15)$$

то скорость сходимости КФГ выше степенной и ниже экспоненциальной. Здесь A, B — положительные параметры, их рекомендуемые значения $A = \pi/2$, $B = \pi/4$ (см. [29] и [23], п. 2.9.2).

Замечание 1. Замены переменной (2.13), (2.15) приводят к симметричному сгущению узлов в окрестности точек ± 1 , поэтому могут быть использованы, когда интегранд имеет особенности в окрестностях обеих точек $x = -1$ и $x = 1$. Замену (2.11) можно обобщить для учета двух таких особенностей:

$$h(y) = \left[\left(h_+^{-1} + h_-^{-1} \right) / 2 \right]^{-1}, \tag{2.16}$$

где верхний индекс “−1” обозначает обратную функцию. Причем, за счет наличия параметра ϵ замена (2.16) обеспечивает более гибкую адаптацию к особенностям, чем (2.13), (2.15). Замена переменной (2.11), (2.16) являются частным случаем отображений (4.3), (4.4), которые обсуждаются в п. 4.1. Отметим также, что поскольку, как правило, $\psi = gf \notin \mathcal{M}_{2n}^+(-1,1) \cap \mathcal{M}_{2n}^-(-1,1)$, то применение леммы 1 для анализа сходимости при наличии двух указанных особенностей невозможно.

Замечание 2. Оценка погрешности для (2.13) основана на равенствах $h'(-1) = h'(1) = 0$. В качестве обобщения можно рассмотреть функцию $h(y)$, удовлетворяющую условиям $h^{(j)}(-1) = h^{(j)}(1) = 0$ при $j = 1, \dots, r - 1, r \geq 2$. При использовании такой замены получаем оценку погрешности

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

где $\tilde{C}_{\alpha, M}$ зависит только от M и α . Из этой оценки видно, что порядок сходимости увеличивается пропорционально r . Указанные обобщения можно получить, если например, возвести функцию (2.13) в степень r , или использовать в качестве $h(y)$ полиномиальную функцию определенного вида, см. [31].

Замечание 3. Тот факт, что при использовании (2.15) скорость сходимости становится выше степенной связан со свойством $h^{(j)}(-1) = h^{(j)}(1) = 0$, где $j \in \mathbb{N}$. Замена переменной $h(y)$, удовлетворяющая таким требованиям, была впервые предложена в [32]. Однако в этой работе мы воспользовались известным отображением из [29].

3. Формулы Мори для функций с особенностями в точках $x = \pm 1$. Применение замен переменной $h(y)$, таких что $h^{(j)}(\pm 1) = 0$ при $j = 1, \dots, r - 1$ и формулы трапеций с равномерным распределением на отрезке $[-1, 1]$ по переменной y дает высокоточную квадратурную формулу для расчета интегралов с особенностями в окрестностях точек ± 1 . Оценки погрешности таких приближений строятся на основе формулы Эйлера–Маклорена (общий подход описан, например, в [23], п. 2.9). В работе [29] на основе такой идеи и замены (2.15) предложена так называемая двуэкспоненциальная квадратурная формула “double exponential formula”:

$$I_n^{DE}[gf] = \frac{2}{n+1} \sum_{k=1}^n g(h(-1+ks)) \times \\ \times f(h(-1+ks)) h'(-1+ks), \quad s = \frac{2}{n+1}.$$

Фиг. 2. Сетки из 15×15 узлов в подобластях Δ_0 (а) и Π_1 (б) при $\omega = 1, \omega_{\max} = 2$. Координаты узлов — образы нулей полиномов Лежандра, НПЛ, под действием (2.1) и замены (2.11) по обоим координатам (а); координаты узлов — НПЛ $[-1, 1]$ на $[1, 2]$ по направлению ω_2 и образы НПЛ под действием (2.11) по направлению ω_3 (б). Здесь использована замена $h_1(y)$ из (2.11) при $\epsilon = 10^{-1}$.

Теорема 3 (см. [29,3]). При $g(x) = (1-x^2)^\alpha$ и $f(x) \equiv 1$. Асимптотика убывания погрешности I_n^{DE} носит экспоненциальный характер:

$$\begin{aligned} E_n^{DE}[\Psi] &= E_n^{DE}[gf] = I^s[f] - I_n^{DE}[\Psi] \sim \\ &\sim C_1 \exp\left(-C_2 \frac{n}{\log^2 n}\right), \text{ при } n \rightarrow \infty, \end{aligned}$$

где C_1 и C_2 — положительные постоянные.

В заключение раздела покажем для примера, как распределяются узлы описанных методов интегрирования в областях Δ_0 и Π_1 . На фиг. 2 показаны узлы кубатурной формулы, построенной с использованием (2.1), (2.11).

3. ТЕСТОВЫЕ РАСЧЕТЫ ИНТЕГРАЛОВ ИЗ ПРИЛОЖЕНИЙ

Для анализа эффективности предложенных методов расчета интегралов с особенностями проведем экспериментальное исследование сходимости формул, описанных в разд. 2. При этом будем исходить из того, что числа α и β или даже вид функции $g(x)$ нам неизвестен. Рассмотрим следующие тестовые задачи, имеющие непосредственное отношение к приложениям.

Тест 1. Интеграл для случая обратного каскада в НУШ при наличии накачки экспоненциального вида, см. уравнение (1.5), расположенной на высоких частотах $\omega_f \sim \omega_{\max}$:

$$I_1(\omega_f, \sigma) = \int_{-1}^1 (1-\omega^2)^{-2/3} \exp\left[-\frac{(\omega-\omega_f)^2}{2\sigma^2}\right] d\omega. \quad (3.1)$$

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

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

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

Здесь Γ и ${}_1F_1$ означают гамма-функцию Эйлера и гипергеометрическую функцию соответственно.

Тест 2. Интеграл для случая прямого каскада в НУШ (см. второй спектр в (1.4)), возникающий при расчете правой части (1.2) (в прямом каскаде, как правило, $0 \sim \omega_f \ll \omega_{\max}$, поэтому верхний предел по ω зададим в 1000 раз большим ω_f):

$$I_2 = \int_{\omega_f}^{1000\omega_f} \omega^{-1} \ln^{-1/3} \frac{\omega}{\omega_f} d\omega = \frac{3}{2} (\log 1000)^{2/3}. \quad (3.2)$$

Тест 3. Интеграл для случая волн на поверхности глубокой воды:

$$I_3(p) = \int_0^1 \omega^p \exp\left[\frac{1}{\log(1-\omega)}\right] d\omega. \quad (3.3)$$

Здесь для моделирования свойств ядра $\mathcal{P}$, использована функция $\exp\left[\frac{1}{\log(1-\omega)}\right]$ 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, расчет $I_3(0)$, — задача, возникающая при вычислении интеграла $St_\omega(n)$ на постоянном спектре, представляющем глобальное термодинамическое равновесие; вариант 2, расчет $I_3(-8)$. Этот интеграл возникает при вычислении

правой части КУ на спектре Колмогорова–Захарова в прямом каскаде энергии $n_{\omega} \sim 1 / \omega^8$ (такое решение было впервые опубликовано в [33], где символ ω использован для обозначения не частотной, а волновой переменной, см. также [14]):

$$I_3(0) = I_{3,1} = 2K_1(2) \approx 0.2797317636330448,$$

$$I_3(-8) = I_{3,2} \approx 1205.63842587396,$$

где $K_1(2)$ — модифицированная функция Бесселя II рода.

Для организации расчетов в тестах 1–3, там где необходимо, с помощью линейных замен переменной перейдем к стандартному отрезку интегрирования $[-1, 1]$ и используем методы, предложенные в разд. 2: формулы Гаусса–Якоби (для краткости обозначим их GJ), классические формулы Гаусса (G), формулы Гаусса с заменами переменных (2.11), (2.16) ($G_{\sinh}$), (2.13) ($G_{\sin}$), (2.15) ($G_{\tanh}$) и двухэкспоненциальные формулы (DE). Пусть $I_{n,a}$ — приближенное значение интеграла, a — номер теста. В экспериментах будем рассчитывать относительную погрешность

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

В расчетах замены (2.11), (2.16) и параметры ϵ и A, B варьировались для достижения максимальной скорости сходимости (максимального угла наклона графика $\log_{10} \bar{E}_n^a$).

На фиг. 3 показаны графики десятичных логарифмов погрешностей расчета $I_{1,1}$ (график а) и $I_{1,2}$ (график б). При вычислении $I_{1,1}$ в методе $G_{\sinh}$ задано $\epsilon = 10^{0.3}$ и использовано сгущение (2.16), в методах $G_{\tanh}$ и DE заданы параметры $A = 0.6\pi / 2, B = 0.6\pi / 4$. При расчете $I_{1,2}$ в методе $G_{\sinh}$ задано $\epsilon = 10^{-12}$ и использована замена $h_+(y)$ из (2.11), в методах $G_{\tanh}$ и DE заданы $A = 1.2\pi / 2, B = 1.2\pi / 4$.

Важное и неожиданное заключение, следующее из фиг. 3, состоит в том, что даже при известных значениях параметров α и β формула GJ, имеющая максимальную алгебраическую степень точности, не обеспечивает максимальную скорость убывания погрешности: на графике 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 фиг 3б 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 расчете $I_{1,2}$ демонстрирует $G_{\sinh}$, позволяя получить максимальную точность уже на 200 узлах. В целом, тест $I_{1,2}$ показывает, насколько ресурсоемкой является задача расчета интеграла столкновений на практике — видно, что в подобластях $\Delta_0 - \Delta_4, \Pi_1, \Pi_2$ требуется задавать сетки не менее, чем из 200×200 узлов и адаптировать дополнительно параметры методов интегрирования. Если же адаптировать параметры не удастся, могут потребоваться сетки из 500×500 узлов и более.

На фиг. 4 приведены значения погрешностей, полученные при расчете I_2 . В методе $G_{\sinh}$ использована замена переменной $h_-(y)$ из (2.11) и задано $\epsilon = 10^{-15}$; в методах $G_{\tanh}$ и DE заданы $A = 1.5\pi / 2,$

Фиг. 3. Логарифмы относительных погрешностей при расчете $I_{1,1}$ (а), $I_{1,2}$ (б).

Фиг. 4. Логарифм относительной погрешности при расчете интеграла I_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 расчетах методы DE и $G_{\tanh}$, основанные на применении одной и той же замены переменной (2.15), имеют близкую скорость сходимости. Однако DE, как правило, дает погрешность на 2–4 порядка меньше, чем $G_{\tanh}$. Это связано с тем, что сетка $G_{\tanh}$ сильно разрежена в центре отрезка интегрирования, что приводит к снижению точности аппроксимации при наличии минимальных градиентов интегранта внутри отрезка.

На фиг. 5 показаны графики десятичных логарифмов погрешностей расчета $I_{3,1}$ (график а) и $I_{3,2}$ (график б). В обоих экспериментах при реализации метода $G_{\sinh}$ использована замена переменной (2.16). При этом в расчете $I_{3,1}$ задано $\varepsilon = 10^{-8}$, в расчете $I_{3,2}$ — $\varepsilon = 10^{-1}$. В обоих экспериментах при реализации $G_{\tanh}$ и DE заданы $A = 1.2\pi / 2$, $B = 1.2\pi / 4$.

Результаты на фиг. 5 наглядно показывают, что при изменении параметра подынтегральной функции скорость сходимости любого метода в сравнении с другими может сильно измениться. Действительно, при расчете $I_3(0)$ методы DE и $G_{\tanh}$ сходятся существенно быстрее других, а метод $G_{\sinh}$ существенно отстает от них. При расчете $I_3(-8)$ максимальную скорость сходимости при малых n демонстрирует $G_{\sinh}$; методы G и $G_{\sin}$ близки по скорости сходимости к $G_{\sinh}$. При этом $G_{\sin}$ дает 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 расчетов на сходимость для выбора подходящего метода интегрирования и настройки его параметров.

Фиг. 5. Логарифмы относительных погрешностей при расчете интегралов $I_{3,1}$ (а), $I_{3,2}$ (б).

Фиг. 6. Логарифмы относительных погрешностей (а) при вариации параметра ϵ метода $G_{\sinh}$ при вычислении $I_{3,2}$, сплошные линии по направлению стрелки соответствуют $\epsilon = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-7}$, штриховая линия — $\epsilon = 10^1$; (б) при вариации коэффициента C в значениях параметров $A = C\pi/2, B = C\pi/4$ метода DE при вычислении $I_{1,2}$, сплошные линии по направлению стрелки соответствуют $C = 0.6, 0.8, 1, 1.2, 1.4$, штриховая линия — $C = 3$.

Следует заметить, что наблюдаемый характер убывания погрешностей предложенных методов соответствует теоретическим оценкам, представленным в предыдущем разделе. Методы $G, G_{\sinh}$ при больших n демонстрируют степенной характер убывания погрешности (см. фиг. 4, 5), причем порядок сходимости $G_{\sinh}$ примерно в два раза выше G . Эти результаты соответствуют оценкам (2.8), (2.14). На фиг. 3б, 4, 5б погрешность метода $G_{\sinh}$ быстро убывает при увеличении n от единицы (такое почти скачкообразное падение погрешности возникает из-за малого значения множителя $\tilde{\epsilon}$ в оценке (2.12)), затем характер убывания меняется на степенной, и асимптотика сходимости $G_{\sinh}$ совпадает с асимптотикой G , что соответствует оценкам (2.8), (2.12).

Отметим, что при использовании $G_{\sinh}$ уменьшение ϵ ниже некоторого порогового значения приводит к тому, что скорость сходимости замедляется, однако при этом возрастает максимальная точность, которую позволяет достичь метод. Эта ситуация продемонстрирована на фиг. 6, а. Здесь изображен график логарифма погрешности метода $G_{\sinh}$ при вычислении $I_{3,2}$. Видно, что при уменьшении ϵ от 10^1 сначала угол наклона графика увеличивается, затем, достигая максимальных значений в районе $\epsilon^* = \epsilon = 10^{-1}$, начинает уменьшаться. Оптимальные значения ϵ^* зависят от свойств подынтегральной функции.

Из рисунка видно, что применение метода $G_{\sinh}$ ведет к альтернативе: либо мы получаем предельную точность 10^{-8} на малом числе узлов ($n \sim 50$) и далее с ростом n погрешность убывает медленно (это реализуется при относительно больших ϵ , см. линию, соответствующую $\epsilon \sim 10^{-1}$), либо получаем точность машинной арифметики 10^{-15} на значительно большем числе узлов ($n \sim 200$) при $\epsilon < 10^{-5}$. По нашему мнению эффект замедления скорости сходимости при $\epsilon \rightarrow 0$ связан с тем, что сетка узлов квадратурной формулы становится более разреженной в центре отрезка интегрирования.

Характерное изменение скорости сходимости метода DE при изменении параметров A, B изображено на фиг. 6б. Здесь мы ввели дополнительный коэффициент $C: A = C\pi/2, B = C\pi/4$ и привели логарифм погрешности метода DE при вычислении $I_1(0.9998, 10^{-4})$. На графике видно, что увеличение C от значений $C = 0.6$ сначала приводит к увеличению скорости сходимости, но после достижения некоторого оптимального значения C^* (в этом эксперименте $C^* \approx 1.5$) скорость сходимости с ростом C начинает уменьшаться. Как и в случае метода $G_{\sinh}$, оптимальные значения C^* зависят от свойств подынтегральной функции. Отметим однако, что во всех проведенных экспериментах эти значения отличаются от $C = 1$ не более, чем в 2 раза.

Подводя итог этого раздела, сформулируем следующие основные выводы: 1) формулы GJ в рассмотренных задачах не являются оптимальными даже при известных α и β ; 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.

4. НОВЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЭВОЛЮЦИОННОЙ ЗАДАЧИ

Далее для уравнения (1.5) будем рассматривать задачу Коши

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_\omega}{\partial t} &= \mathcal{S}t_\omega(n) + \mathfrak{F}(\omega) - \mathfrak{D}(\omega)n_\omega, \\ n_\omega(0) &= n_I(\omega), \end{aligned} \quad (4.1)$$

где

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

суть члены, задающие накачку и диссипацию соответственно. Поскольку модуль правой части (4.1) и сама неизвестная функция могут обращаться в бесконечность в точке $\omega = 0$, при разработке численного метода целесообразно ввести малое число $\omega_{\min}$, $0 < \omega_{\min} \leq \omega_L$, и искать решение (4.1) на отрезке $\omega \in \omega = [\omega_{\min}, \omega_{\max}]$, а для расчета интеграла $\mathcal{S}t_\omega(n)$ использовать аналитическое или непрерывное продолжение решения в область $[0, \omega_{\min}]$ (о таком алгоритме подробнее см. в [17]). Кроме того, зачастую полагается, что при $\omega > \omega_{\max}$ решение пренебрежимо мало [8].

Далее зададим в качестве начального данного $n_I(\omega) \equiv 0$ и опишем метод поиска решения задачи (4.1) — функции $n_\omega(t)$ при $\omega \in \omega$, $t \geq 0$.

4.1. Приближение решения по переменной ω

Как отмечено во введении, при наличии накачки и диссипации, действующих на разных частотных масштабах, градиенты решения КУ по переменной ω могут отличаться на несколько (вплоть до десяти) порядков. Для аппроксимации функции с такими сильными особенностями будем использовать дробно-рациональную барицентрическую интерполяционную формулу [35]:

$$\begin{aligned} n(\omega, t) \approx r_M[n](\omega, t) &= \sum_{m=1}^M \frac{\xi_m n(\tilde{\omega}_m, t)}{\mathcal{L}(\omega) - \tilde{y}_m} \bigg/ \sum_{m=1}^M \frac{\xi_m}{\mathcal{L}(\omega) - \tilde{y}_m}, \\ \forall t &\geq 0, \end{aligned} \quad (4.2)$$

где $\xi_m = M / T'_M(y_m) = (-1)^{m-1} \sin(\frac{2m-1}{2M}\pi)$ — веса интерполяции; $T_M(y)$ — полином Чебышёва степени M ; $\tilde{y}_m = \chi(y_m)$, y_m — нули $T_M(y)$, $m = 1, \dots, M$; $\mathcal{L}(\omega)$ — линейное отображение отрезка $\bar{\omega}$ на $[-1, 1]$; $\tilde{\omega}_m = \mathcal{L}^{-1}(\tilde{y}_m)$ — узлы интерполяции.

Функция $\chi(y)$ — конформное отображение отрезка $[-1, 1]$ в себя с условиями $\chi(-1) = -1$, $\chi(1) = 1$. Если $\chi = \text{id}$ — тождественное отображение, то приближение (4.2) совпадает с интерполяционным полиномом с узлами Чебышёва [34]. В [35] заложена идея построения функции $\chi(y)$, позволяющая существенно повысить точность интерполяции (4.2) при наличии у функции n_ω изолированных особых точек в комплексной плоскости $\mathbb{C}$, лежащих близко к отрезку $\bar{\omega}$: отображение $\chi(y)$ должно “уносить” ближайшую к отрезку особую точку на большое расстояние в $\mathbb{C}$. Таким образом, в силу теоремы Бернштейна, скорость сходимости (4.2) существенно возрастет по сравнению с классическим случаем $\chi(y) = \text{id}$.

В [30] показано, что в качестве $\chi(y)$ можно выбрать функцию

$$\chi(y) = \delta + \varepsilon \sinh \left\{ \left(\sinh^{-1} \frac{1-\delta}{\varepsilon} + \sinh^{-1} \frac{1+\delta}{\varepsilon} \right) \frac{y-1}{2} + \sinh^{-1} \frac{1-\delta}{\varepsilon} \right\}, \quad (4.3)$$

в которой (δ, ε) — координата особой точки аналитического продолжения n_ω , как функции ω , в $\mathbb{C}$. Отметим, что замены (2.11) являются частным случаем (4.3) при $\delta = \pm 1$.

Важная проблема, касающаяся обобщения (4.2) на случай, когда у аналитического продолжения $n(\mathcal{L}^{-1}(y), t)$ имеется несколько особых точек: $y_1^*, \dots, y_S^* \in \mathbb{C}$, обсуждалась в [36]–[38]. Было показано, что для построения отображения $\chi(y)$ в таком случае можно применять формулу:

Фиг. 7. Функция $F(\omega)$ в логарифмическом масштабе и в линейном масштабе на внутреннем графике (а); логарифмы относительных погрешностей $\overline{E}_M^r$ при различных значениях ε_1 (б); график отклонения $r_M[F](\omega)$ от $F(\omega)$ при $M = 100$, $\varepsilon_1 = 10^{-7}$ в логарифмическом масштабе (в).

$$\chi = \left(\frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \chi_s^{-1} \right)^{-1}, \tag{4.4}$$

где индекс “ -1 ” означает обратную функцию; $\chi_1, \dots, \chi_S$ имеют вид (4.3), где $\delta = \delta_1, \dots, \delta_S$, $\varepsilon = \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_S$ являются действительной и мнимой координатами особых точек $y_1^*, \dots, y_S^*$ соответственно.

Более того, эксперименты показывают, что отображения вида (4.3), (4.4) можно использовать при построении приближений (4.2) как для целых функций с экспоненциальными пиками (моделирование накачки), так и для функций со степенными погранслоями на отрезке $\overline{\omega}$ (моделирование диссипации). При этом в качестве δ выбирается $\omega = \omega_f$ (для накачки) и $\omega = 0$, $\omega = \omega_{\max}$ (для диссипации), а в качестве ε — малое число, значение которого можно связать с градиентами членов накачки и диссипации.

Для демонстрации высокой точности (4.2)–(4.4) 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 (1.6)), $\omega_L = 10^{-8}$, $\omega_R = 1$, $\omega_f = 10^{-4}$, $\sigma = 10^{-5}$, $c_f = 10^4$, $p = q = 2$ на отрезке $\overline{\omega} = [10^{-8}, 1]$.

Для приближения $F(\omega)$ используем формулу (4.2), в которой зависимость от t отсутствует: $r_M[F](\omega)$. Для построения отображения $\chi(y)$ используем (4.4) и учтем, что $F(\omega)$ имеет особенности в окрестности точек $\omega = \omega_{\min}, \omega_f, \omega_{\max}$ (см. фиг. 7а), 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 (4.2) с ростом M , были подобраны экспериментально. Наибольшее влияние на убывание погрешности имеет параметр ε_1 , см. фиг. 7б.

Относительная погрешность в этом эксперименте определялась по формуле:

$$\overline{E}_M^r = \max_{\omega \in \Omega_M} E_M^r[F](\omega),$$

$$E_M^r[F](\omega) = |F(\omega) - r_M[F](\omega)| / \mu, \mu = \max_{\omega \in \overline{\omega}} |F(\omega)|.$$

Здесь множество точек $\Omega_M = \bigcup_{m=1}^{M-1} \{\tilde{\omega}_m + k(\tilde{\omega}_{m+1} - \tilde{\omega}_m) / K, k = 1, \dots, K\}$, $K = 50$, т.е. Ω_M есть объединение равномерных подсеток на интервалах $[\tilde{\omega}_m, \tilde{\omega}_{m+1}]$, $m = 1, \dots, M - 1$.

Из фиг. 7а 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 (4.2)–(4.4) дают высокую точность на достаточно малом количестве узлов, см. фиг. 7 б, в.

4.2. Приближение решения по времени

Для приближения решения по времени создадим новый алгоритм. Пусть требуется вычислить эволюцию решения $n(\omega, t)$ на отрезке $t \in [0, T]$ с начальными данными $n(\omega, 0) = n_I(\omega)$. Используем модификацию интерполяционного полинома с узлами Чебышева при фиксированном ω и $t \in [0, T]$:

$$n(\omega, t) \approx P_K[n](\omega, t) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \zeta_k(t) \frac{\xi_k T_K(\Lambda(t))}{\Lambda(t) - \theta_k} \times n(\omega, t_k) + n_I(\omega), \quad \zeta_k(t) = \frac{1 + \Lambda(t)}{1 + \theta_k}, \tag{4.5}$$

где $\Lambda(t)$ — линейное отображение отрезка $[0, T]$ на отрезок $[-1, 1]$; $t_k = \Lambda^{-1}(\theta_k)$ — узлы интерполяции, $k = 1, \dots, K$; θ_k — нули T_K , ξ_k — веса интерполяционной формулы. Множитель $\zeta_k(t)$ позволяет автоматически учесть начальное условие (условие на левой границе временного отрезка). Подобные приближения для решения краевых задач были предложены независимо в [25] и [39], их свойства обсуждались в [40]. Здесь мы обобщаем эту технику для решения задачи Коши.

Задачу Коши (4.1) будем решать с помощью метода коллокаций с узлами $(\tilde{\omega}_m, t_k)$, расположенными в прямоугольнике $\Omega = [\omega_{\min}, \omega_{\max}] \times [0, T]$. Для приближения решения в Ω используем прямое (тензорное) произведение интерполяций (4.2), (4.5):

$$n(\omega, t) \approx r_M \times P_K = \frac{1}{K} \sum_{m=1}^M \sum_{k=1}^K \zeta_k(t) \frac{\xi_m \xi_k T_K(\Lambda(t)) n(\tilde{\omega}_m, t_k)}{(\mathcal{L}(\omega) - \tilde{y}_m)(\Lambda(t) - \theta_k)} \Big/ \sum_{m=1}^M \frac{\xi_m}{\mathcal{L}(\omega) - \tilde{y}_m} + n_I(\omega). \tag{4.6}$$

Для приближения производной по времени в (4.1) найдем производную по t от (4.6) и запишем ее в узлах $(\tilde{\omega}_m, t_k)$. Используя основное свойство интерполяции, $r_M[n](\tilde{\omega}_i, t) = n(\tilde{\omega}_i, t)$, и обозначая $n_{ij} = n(\tilde{\omega}_i, t_j)$, $(n_t)_{ij} = \lim_{\omega \rightarrow \tilde{\omega}_i, t \rightarrow t_j} \partial n / \partial t$, получаем

$$(n_t)_{ij} \approx \sum_{k=1, k \neq j}^K a_{jk} n_{ik} + v_j n_{ij},$$

$$a_{jk} = \frac{2}{T} \left(\frac{(-1)^{j+k} (1 + \theta_j) s_k}{s_j (1 + \theta_k) (\theta_j - \theta_k)} \right), \tag{4.7}$$

$$v_j = \frac{2}{T} \left(\frac{1}{1 + \theta_j} + \frac{\theta_j}{2s_j^2} \right),$$

где $s_j = \sqrt{1 - \theta_j^2}$, $j = 1, \dots, K$. В рамках п. 4.2 полагаем $T=2$.

Пусть $\mathcal{N}$, $\mathcal{N}_t$ — $M \times K$ матрицы, составленные из значений n_{ij} и $(n_t)_{ij}$ соответственно; A — $K \times K$ матрица, содержащая v_j на диагонали и a_{jk} вне диагонали, $j \neq k$. Тогда приближение (4.7) можно записать в матричном виде:

$$\mathcal{N}_t \approx \mathcal{N} A^T. \tag{4.8}$$

Для построения алгоритма нам понадобится спектральное разложение матрицы A :

$$A = R_A D_A R_A^{-1}, \tag{4.9}$$

Фиг. 8. Зависимости обусловленностей (сплошная линия) и радиусов интервалов, в которых гарантированно лежат значения обусловленностей (штриховая линия), от числа узлов K для матриц A (а) и R_A (б).

где R_A — матрица собственных векторов A , $D_A = \text{diag}(d_1, \dots, d_K)$ — матрица собственных значений.

Проведем анализ собственных чисел матрицы A и чисел обусловленности матрицы R_A с помощью интервальных методов [41, 42].

Пакет INTLAB позволяет проводить расчеты с гарантией точности, иными словами вычислять радиусы интервалов, в которые гарантированно попадает искомое значение собственного числа или значения числа обусловленности матрицы. В табл. 1 приведены значения центров и радиусов интервалов, в которые гарантированно попадают значения собственных чисел матрицы A при $K = 10$.

Таблица 1. Значения собственных чисел d_k матрицы A при $K = 10$, и радиусы интервалов rad_k , гарантированно содержащих собственные числа d_k

k	d_k	rad_k
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_k символом “ i ” обозначена мнимая единица. На фиг. 8 в логарифмической шкале приведены значения верхних границ обусловленностей cond_A и cond_{R_A} матриц A и R_A , посчитанных во второй норме, и радиусы интервалов rad_A и rad_{R_A} , в которых гарантированно лежат значения обусловленностей.

Благодаря проведенному анализу удастся сделать следующие выводы:

- Все собственные числа матрицы A достаточно далеко отстоят друг от друга и от нуля и лежат в комплексной плоскости.
- Обусловленность матрицы A с ростом числа узлов растет достаточно медленно, что обеспечивает численную устойчивость алгоритмов, основанных на обращении матрицы A .
- Обусловленность матрицы R_A с ростом числа узлов растет быстро и при $K = 25$ превышает 10^{10} . Таким образом, алгоритм, основанный на спектральном разложении (4.9), будет численно устойчивым только при небольших K .

Дальнейший анализ (4.9), основанный на методах дихотомии матричного спектра [43] показал, что при больших K используемой шестнадцатизначной арифметики `double` недостаточно, чтобы локализовать с высокой точностью собственные числа матрицы A . Это связано с наличием собственных

подпространств очень близких к вырожденным. Эксперименты показали, что в расчетах указанный эффект начинает проявляться при $K > 20$.

4.3. Аппроксимация и решение задачи (4.1)

Для решения нелинейной задачи (4.1) используем метод установления. Введем дополнительную переменную ϑ , положим $n = n(\omega, t, \vartheta)$, и будем искать решение (4.1) в области Ω как предел решений задачи

$$\begin{aligned} B_{\vartheta} n &= \frac{\partial n}{\partial t} - (St_{\omega}(n) + \mathfrak{F}(\omega) - \mathfrak{D}(\omega)n), \\ n(t, \omega, 0) &= n_I(\omega), (t, \omega) \in \Omega \end{aligned} \quad (4.10)$$

при $\vartheta \rightarrow \infty$, где B_{ϑ} — специальный оператор, содержащий производную по ϑ . Далее используем простой оператор $B_{\vartheta}^1 = \frac{\partial}{\partial \vartheta}$ и более сложный оператор $B_{\vartheta}^2 = (k_1 - k_2 \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial \vartheta}$, где k_1, k_2 — положительные параметры.

Для реализации итерационного процесса введем по переменной ϑ равномерную сетку с шагом Δ и узлами $\vartheta_s = s\Delta$, $s = 1, 2, \dots$; аппроксимируем производную по ϑ разностным отношением: $\partial n / \partial \vartheta \approx (n^{s+1} - n^s) / \Delta$, где $n^s = n(\omega, t, \vartheta_s)$; и получим схемы:

$$\begin{aligned} &\left(1 - \Delta \mathfrak{D}(\omega) - \Delta \frac{\partial}{\partial t}\right) n^{s+1} = \\ &= n^s - \Delta (St_{\omega}(n^s) + \mathfrak{F}(\omega)) = f_1(n^s, \omega), \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} &\left(k_1 - \Delta \mathfrak{D}(\omega) - (k_2 + \Delta) \frac{\partial}{\partial t}\right) n^{s+1} = \\ &= \left(k_1 - k_2 \frac{\partial}{\partial t}\right) n^s - \Delta (St_{\omega}(n^s) + \mathfrak{F}(\omega)) = f_2(n^s, \omega), \end{aligned} \quad (4.12)$$

соответствующие применению операторов $B_{\vartheta}^1, B_{\vartheta}^2$.

Для сведения (4.11), (4.12) к задачам линейной алгебры используем приближения, описанные в пун. 4.2. Пусть $\mathcal{N}^s$ — матрица значений решения $n(\omega, t, \vartheta_s)$ в узлах $(\tilde{\omega}_m, t_k)$; $F_{1,2}(\mathcal{N}^s)$ — матрицы значений $f_{1,2}(n^s, \omega)$ в тех же узлах; D_{ω} — диагональная матрица со значениями $\mathfrak{D}(\tilde{\omega}_1), \dots, \mathfrak{D}(\tilde{\omega}_M)$ на диагонали. Подставляя в (4.11), (4.12) приближение (4.6) и используя метод коллокаций с учетом формулы (4.8), получаем соответствующие задачи линейной алгебры для перехода с предыдущего, s -го, на следующий, $(s+1)$ -й, шаг метода установления

$$\mathcal{N}^{s+1} - \Delta (D_{\omega} \mathcal{N}^{s+1} + \mathcal{N}^{s+1} A^T) = F_1(\mathcal{N}^s), \quad (4.13)$$

$$k_1 \mathcal{N}^{s+1} - \Delta D_{\omega} \mathcal{N}^{s+1} - (k_2 + \Delta) \mathcal{N}^{s+1} A^T = F_2(\mathcal{N}^s). \quad (4.14)$$

Используем теперь спектральное разложение (4.9), умножим (4.13), (4.14) на матрицу R_A^{-1} справа и введем обозначения: $V^{s+1} = \mathcal{N}^{s+1} R_A^{-1}$, $G_{1,2}^s = F_{1,2}(\mathcal{N}^s) R_A^{-1}$. В итоге получаем системы с диагональными матрицами

$$V^{s+1} - \Delta (D_{\omega} V^{s+1} + V^{s+1} D_A) = G_1^s, \quad (4.15)$$

$$k_1 V^{s+1} - \Delta D_{\omega} V^{s+1} - (k_2 + \Delta) V^{s+1} D_A = G_2^s, \quad (4.16)$$

решения которых даются элементарными формулами:

$$v_{ij} = \frac{g_{1ij}}{1 - \Delta [\mathfrak{D}(\tilde{\omega}_i) + d_j]},$$

$$v_{ij} = \frac{g_{2ij}}{k_1 - \Delta \mathfrak{D}(\tilde{\omega}_i) - (k_2 + \Delta)d_j},$$

соответственно. Здесь v_{ij} — элементы матрицы V^{s+1} ; g_{1ij} , g_{2ij} — элементы матриц G_1^s , G_2^s . Параметры метода установления Δ , k_1 , k_2 следует выбирать таким образом, чтобы для всех i и j имели место соотношения:

$$\mathfrak{D}(\tilde{\omega}_i) + d_j \neq 1 / \Delta, \quad \Delta \mathfrak{D}(\tilde{\omega}_i) + (k_2 + \Delta)d_j \neq k_1.$$

Решение на $(s + 1)$ -м шаге метода установления дается формулой $\mathcal{N}^{s+1} = V^{s+1}R_A$. Затем, используя те же формулы, по значениям $\mathcal{N}^{s+1}$ находим решение $\mathcal{N}^{s+2}$, и т.д. до тех пор, пока решение не установится. Критерий останова итерационного процесса:

$$\|\mathcal{N}^{s+1} - \mathcal{N}^s\| / \Delta \leq \epsilon_R,$$

где $\|\cdot\|$ — максимальный элемент матрицы, ϵ_R — малое число.

Анализ сходимости метода установления в одной прикладной задаче дан в [44]. Исследование сходимости алгоритма, схожего с описанным выше, проведено для линейной задачи в [40]. Отметим также, что при вычислении v_{ij} в знаменателе стоит комбинация, включающая собственные числа нестационарного оператора d_j , значения диссипативной функции $\mathfrak{D}(\tilde{\omega}_j)$, задающей большой градиент в спектральном пространстве, и параметры метода установления Δ , k_1 , k_2 . Балансируя эти параметры, удается снизить влияние больших градиентов на точность схемы по времени и получить решение в тех задачах, где методы Рунге–Кутты и многоточечные методы решения жестких систем уравнений не сработали.

Ограничения на K , описанные в конце п. 4.2, приводили к тому, что разрешение (4.5) было недостаточным для аппроксимации решения на большом временном интервале. В связи с этим, значения T следует выбирать исходя из значений градиентов и частоты осцилляций решения как функции переменной t . Эти значения следует подбирать экспериментально так, чтобы метод установления сходился. Значения решения при $t = T$ можно использовать в качестве начальных данных для расчета решения в области $[\omega_{\min}, \omega_{\max}] \times [T, 2T]$. Таким образом, повторяя описанные операции, можно найти решение $n(\omega, t)$ при $(\omega, t) \in [\omega_{\min}, \omega_{\max}] \times [0, lT]$, где l — сколь угодно большое натуральное число.

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНДЕНСАЦИИ БОЗЕ–ЭЙНШТЕЙНА

В [16] проведен анализ КУ вида (1.2) с ядром (1.3), описывающего случайное нелинейное взаимодействие волн в бозе-газе, приводящее к формированию конденсата Бозе–Эйнштейна. Динамика бозе-газа моделируется на основе уравнения Гросса–Питаевского, которое представляет собой уравнение Шредингера с кубической нелинейностью.

В рамках теории волновой турбулентности конденсация Бозе–Эйнштейна объясняется возникновением обратного каскада частиц бозе-газа, который описывается точным стационарным решением КУ (1.2), (1.3) — спектром Колмогорова–Захарова. Это решение, найденное в [16] с точностью до постоянного множителя, имеет вид

$$n_\omega = C_i |Q_0|^{1/3} \omega^{-7/6}, \quad C_i \approx 7.5774045 \times 10^{-2}. \tag{5.1}$$

Здесь Q_0 — постоянный поток частиц в инерционном частотном диапазоне, расположенном между частотами накачки и диссипации. Точное выражение для C_i , включающее гипергеометрические функции и являющееся достаточно громоздким, дано в [16].

Важное свойство решения (5.1) в том, что оно реализуется, когда в системе присутствует накачка и диссипация, действующие на существенно разных частотных масштабах: накачка — на высоких частотах, диссипация — на низких. Таким образом, для получения (5.1) в численных экспериментах нужно решать уравнение (1.5). При этом в области между накачкой и диссипацией (в инерционном диапазоне) возникает постоянный поток числа частиц, который задается формулой:

$$Q(\omega) = -2\pi \int_0^\omega \sqrt{\tilde{\omega}} St_{\tilde{\omega}} d\tilde{\omega}. \tag{5.2}$$

Фиг. 9. Установление решения КУ (1.5), (1.3) к стационарному спектру Колмогорова–Захарова (штриховая линия) (а), установление потока частиц в инерционном диапазоне (б).

Нужно отметить, что существенное значение, как для теории, так и для практики представляет сам процесс установления спектра к решению (5.1). Важные вопросы, связанные с этим: является ли решение (5.1) устойчивым, как быстро устанавливается спектр для различных начальных данных, какие формы он может принимать?

Алгоритм, описанный в этой работе, реализован в среде MATLAB и использован для решения уравнения (1.5) с ядром интеграла столкновений (1.3) и нулевым значением спектра в начальный момент времени. Численное решение строилось на отрезке $[\omega_{\min}, \omega_{\max}] = [10^{-1}, 10^5]$. Параметры накачки и диссипации 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 параметры подобраны так, чтобы установление спектра происходило в широком инерционном диапазоне.

Результаты, приведенные ниже, получены с применением аппроксимации (4.2) со сгущением узлов (4.4) в окрестностях двух точек: $\delta_1 = \mathcal{L}(0)$, $\epsilon_1 = 10^{-9.5}$, $\delta_2 = \mathcal{L}(\omega_f)$, $\epsilon_2 = 10^{-1}$. Для построения кубатурных формул в областях $\Delta_0 - \Delta_4$, Π_1 , Π_2 (см. фиг. 1 а) использован метод Гаусса G. Параметры численного метода: $n = 181$, $M = 256$. В процессе установления использовано переключение между операторами B_{ϑ}^1 , B_{ϑ}^2 при $k_1 = k_2 = 1$. Для обеспечения сходимости метода установления с невязкой $\epsilon_R = 10^{-6}$ длина отрезка по времени T и шаг метода установления Δ менялись в диапазонах $T \in [10^{-4}, 10^{-2}]$, $\Delta \in [10^{-2}, 1]$.

На фиг. 9 показан процесс установления спектра в обратном каскаде и соответствующие значения потока $Q(\omega)$. Видно, что в инерционном диапазоне $\omega \in [10, 10^4]$ поток устанавливается к константе $Q(\omega) = Q_0 \approx -27202$.

Из фиг. 9 видно, что процесс установления носит нетривиальный характер: сначала в области низких частот наблюдается резкий рост спектра, при этом спектр поднимается выше стационарного степенного решения (5.1) (оно изображено пунктиром на фиг. 9, а). Затем спектр плавно спускается и стабилизируется. Нетривиальная динамика потока частиц (5.2) в этом эксперименте видна на фиг. 9, б. Заметим, что при достаточно больших t ($t > 0.15$) решение устанавливается к спектру (5.1) с высокой точностью (относительная разность решений на предыдущем и следующем шагах по времени меньше 0.1%) и с высокой точностью совпадает со спектром Колмогорова–Захарова (максимальное отклонение при $\omega = 10$ приблизительно равно 0.0668).

Отметим, что в проведенном эксперименте на ранних этапах эволюции формируется неклассический спектр $n_{\omega} \sim \omega^{-x^*}$, $x^* \approx 1.24$ — линия на фиг. 9а, соответствующая $t = 0.0665$. Угол наклона этой линии больше, чем у спектра Колмогорова–Захарова: $x^* > 7/6$. Аналогичные спектры обсуждались в [10, 18, 19] при решении задач Коши для уравнения (1.2) с ядром (1.3) без членов, задающих накачку и диссипацию. Известно, что при определенных условиях на начальные данные в таких задачах возможен неограниченный рост значений спектра в окрестности нулевой моды [45], приводящий к разрушению решения в конечный момент времени $t = t^*$. Кроме того, в малой окрестности t^* при $t < t^*$ имеет место автомодельная эволюция второго рода со степенным убыванием решения $n_{\omega} \sim \omega^{-x}$ при достаточно больших ω [17].

Фиг. 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).

В рассмотренной нами задаче после выхода на автомодельное степенное решение $n_\omega \sim \omega^{-x^*}$ спектр под действием низкочастотной диссипации плавно изменяет свой наклон, и решение сходится к стационарному спектру Колмогорова–Захарова. Переход между указанными решениями происходит на временном интервале $t \in [0.065, 0.188]$, его удобно также наблюдать на графике модуля логарифмической производной $\mathcal{L}(\omega, t) = \left| \frac{\partial \ln n(\omega, t)}{\partial \omega} \right|$, фиг. 10а. Отметим также, что процесс перехода от автомодельного к стационарному спектру при отсутствии диссипации описан в [10, 19]. Однако он существенно отличается от наблюдаемого нами перехода: при отсутствии диссипации решение КУ неограниченно растет в малых ω (формируется конденсат). Эволюция конденсата описывается отдельным уравнением. После формирования конденсата при $t > t^*$ переход от автомодельного к стационарному спектру происходит вдоль волны, распространяющейся обратно из области низких в область высоких частот. Похожий сценарий перехода между спектрами возникает и в других моделях [46, 47]. Поскольку он выходит за рамки известной классификации Зельдовича, в указанных работах введен термин “автомодельное решение III рода”.

Существенной сложностью для численного анализа эволюции спектра в обратном каскаде является возникновение крутого фронта у левой границы частотного диапазона (в работе [16] он назван “bottleneck”). Этот фронт более отчетливо виден при построении так называемых компенсированных спектров, то есть 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, фиг. 10б. За счет вариации параметров накачки и диссипации 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. Отметим 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. Приведенные результаты получены на персональной ЭВМ AMD Ryzen 5950X, DDR4 32Gb 3200MHz. Расчеты проводились в системе MATLAB на 16 ядрах с распараллеливанием. Расчет до установления с относительной разностью решений на предыдущем и следующем шагах по времени порядка 10^{-4} длился порядка суток. Отметим, что здесь для расчета интеграла столкновений использован самый простой вариант — формулы Гаусса, G, без адаптации к особенностям. Результаты разд. 2, 3 позволяют утверждать, что при использовании других методов временные показатели, названные выше, могут быть существенно улучшены. Подчеркнем также, что расчет интеграла столкновения для каждого $\omega = \omega_m, m = 1, \dots, M$, происходит независимо, поэтому метод допускает эффективное распараллеливание. Распараллеливание на 16 ядер показало практически кратное уменьшение времени вычислений.

Полученные результаты служат верификацией теории волновой турбулентности для нелинейного уравнения Шредингера (НУШ). Они также свидетельствуют о корректности и высокой точности проведенных расчетов. Отметим, что похожие результаты (только менее точные и на более коротких частотных диапазонах) обнаруживаются как в физических экспериментах, так и при прямом численном моделировании трехмерного НУШ. Подробнее по поводу последнего обстоятельства см. [16].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой работе создан алгоритм поиска турбулентных спектров, являющихся решениями четырехволновых КУ, в случаях изотропного и однородного взаимодействия волн в нелинейных физических системах. Принципиальная сложность, возникающая при решении таких задач, состоит в существенной разномасштабности исследуемых процессов (масштабы частот накачки и диссипации, как правило, отличаются на несколько порядков) и в наличии особенностей, как у решений КУ, так и у ядер интегралов столкновения. Разработка вычислительных алгоритмов для решения задачи потребовала 1) построения высокоточных кубатурных формул с возможностью адаптации к указанным особенностям и 2) создания специальных аппроксимаций по частотной и временной переменным. Отметим в заключении важные нюансы, оставшиеся за рамками описанных работ.

В теории волновой турбулентности вывод КУ основывается на нескольких существенных предположениях (см. [4], гл. 6), и доказать, что они будут выполняться при долговременной эволюции спектра, до сих пор не удалось. Строгие оценки отклонения решения КУ от спектра исходного уравнения, описывающего динамику гамильтоновой системы, получены только на временных интервалах порядка ϵ -малое от характерного времени эволюции спектра. Такие оценки, использующие идею теоремы Ланфорда для кинетического уравнения Больцмана [50], представлены, например, в [51]. Для выполнения базовых предположений теории волновой турбулентности на больших временных интервалах в ходе вычислений требуется тонкая настройка начальных данных и членов, описывающих накачку и диссипацию. Кроме того, необходима верификация полученных численных решений КУ при сравнении с решениями исходных динамических уравнений. Сложности, которые возникают при таком сравнении, и его результаты для случая НУШ обсуждаются в [8]. Отметим, что в той работе показано высокоточное совпадение спектров решений динамического и кинетического уравнений на временных интервалах, где значения спектров изменяются приблизительно в четыре раза, и качественное соответствие спектров в существенно больших временных диапазонах.

Важным является вопрос о существовании и единственности решений четырехволновых КУ, который подробно изучался в ряде работ. Одна из основных, статья [48], посвящена исследованию обобщенных (в смысле распределений Шварца) решений задачи Коши для КУ, удовлетворяющих определенным условиям (см. п. 2.1 в [48]). В зависимости от начальных данных формулируются теоремы о локальных и глобальных существовании и единственности таких решений (см. теоремы 2.16, 2.18 в [48]). Для других типов КУ получено меньше строгих математических результатов. Доказаны, например, теоремы существования и единственности решений трехволновых КУ с ограниченным ядром интеграла столкновений в классе достаточно быстро убывающих на бесконечности функций [49].

Для КУ имеют место аналоги законов сохранения исходных дифференциальных моделей (например, для КУ (1.2), (1.3) — сохранение частиц и энергии, см. [8]). Эти инварианты представляются интегралами от спектра с множителем ω в определенных степенях по интервалу $\omega \in [0, \infty)$. Таким образом, важным является вопрос о консервативности предложенных вычислительных схем. В расчетах с применением описанного алгоритма показано, что указанные величины сохраняются с высокой точностью для спектров, локализованных внутри расчетного отрезка $[0, \omega_{\max}]$. Если в точке $\omega = \omega_{\max}$ спектр становится ненулевым, то возникает “утечка” сохраняющихся величин за границу $\omega_{\max}$, обусловленная взаимодействием волн из областей $\omega < \omega_{\max}$ и $\omega > \omega_{\max}$. Эти взаимодействия задаются интегралами по подобластям Δ_1 , Δ_2 , Δ_4 на иг. 1а, поэтому исключение этих подобластей из области Δ_ω при расчете интеграла столкновений приводит к запрету таких взаимодействий. Применение этого искусственного приема обеспечивает консервативность расчетов, однако является спорным с точки зрения физики. С одной стороны, запрет расширения спектра в область высоких частот позволяет избежать так называемой ультрафиолетовой катастрофы, с другой стороны, свободная эволюция спектра является важным аспектом адекватного учета свойств исходных динамических моделей. Здесь еще более проявляется актуальность численного анализа разномасштабных задач, поскольку для разрешения указанной проблемы необходимо существенно увеличивать $\omega_{\max}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Richardson L. F.* Weather Prediction by Numerical Processes. Boston: Cambridge University Press. 1922.
2. *Kolmogorov A. N.* The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers // Dokl. Akad. Nauk. SSSR. 1941. V. 30. N 9. P. 301–304.
3. *Obukhov A. M.* On the distribution of energy in the spectrum of turbulent flow // Bull. Acad. Sci. USSR, Geog. Geophys. 1941. V. 5. N 4. P. 453–466.

4. *Nazarenko S.* Wave Turbulence. Heidelberg, Germany: Springer, 2012.
5. *Zakharov V. E., L'vov V.S., Falkovich G.* Kolmogorov Spectra of Turbulence I: Wave Turbulence. Germany: Springer, 1992.
6. *Zakharov V. E., Musher S. L., Rubenchik A. M.* Hamiltonian approach to the description of non-linear plasma phenomena // *Physics Reports*. 1985. V. 129. N 5. P. 285–366.
7. *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. V. 57. N 1–2. P. 96–160.
8. *Zhu Y., Semisalov B. V., Krstulovic G., Nazarenko S. V.* Testing wave turbulence theory for the Gross-Pitaevskii system // *Phys. Rev. E* 2022. V. 106. Art #014205.
9. *Krasitskii V. P.* On the canonical transformation of the theory of weakly nonlinear waves with nondecay dispersion law // *Sov. Phys. JETP*. 1990. V. 98. P. 1644–1655.
10. *Semikoz D. V., Tkachev I. I.* Kinetics of Bose Condensation // *Phys. Rev. Lett.* 1995. V. 74. N 16. P. 3093–3097.
11. *Pitaevskii L. P., Stringari S.* Bose–Einstein Condensation and Superfluidity. Oxford University Press, 2016. 554 p.
12. *Maloney J. V., Newell A. C.* Nonlinear Optics. 1st Ed. Boca Raton: CRC Press. 2019.
13. *Zurek W. H.* Cosmological experiments in superfluid helium? // *Nature*. 1985. V. 317. P. 505–508.
14. *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. V. 18. N 3. P. 327–344.
15. *Pushkarev A., Resio D., Zakharov V.* Weak turbulent approach to the wind-generated gravity sea waves // *Physica D*. 2003. V. 184. P. 29–63.
16. *Zhu Y., Semisalov B. V., Krstulovic G., Nazarenko S. V.* Direct and Inverse Cascades in Turbulent Bose-Einstein Condensates // *Phys. Rev. Lett.* 2023. V. 130. N 13. Art # 133001.
17. *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. V. 102. Art. #105903.
18. *Lacaze R., Lallemand P., Pomeau Y., Rica S.* Dynamical formation of a Bose–Einstein condensate // *Physica D. Nonlinear Phenomena*. 2001. V. 152. P. 779–786.
19. *Connaughton C., Pomeau Y.* Kinetic theory and Bose–Einstein condensation // *Comptes Rendus Physique*. 2004. V. 5. N. 1. P. 91–106.
20. *Hossain M. A., Islam Md. S.* Generalized Composite Numerical Integration Rule Over a Polygon Using Gaussian Quadrature // *Dhaka Univ. J. Sci.* 2014. V. 62. N 1. P. 25–29.
21. *Суетин П. К.* Классические ортогональные многочлены. 3-е изд., перераб. и доп. М.: Физматлит, 2005. 480 с.
22. *Szegö G.* Orthogonal polynomials. N.Y.: Amer. Math. Soc., 1959.
23. *Davis P. J., Rabinowitz P.* Methods of Numerical Integration. 2nd Ed. California: Academic Press, INC, 1984. 626 p.
24. *Trefethen L. N.* Spectral methods in MATLAB. Philadelphia: SIAM, 2000, 165 p.
25. *Бабенко К. И.* Основы численного анализа. М.: Физматлит, 1986. 744 с.
26. *Trefethen L. N.* Approximation Theory and Approximation Practice. Philadelphia: SIAM, 2018. 371 p.
27. *Гавриков М. Б.* Методы без насыщения в вычислительной математике // *Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша*. 2019. № 075. 40 с.
28. *Lubinsky D. S., Rabinowitz P.* Rates of Convergence of Gaussian Quadrature for Singular Integrands // *Mathematics of Computation*. 1984. V. 43, N 167. P. 219–242.
29. *Mori M.* An IMT-Type Double Exponential Formula for Numerical Integration // *Publ. RIMS, Kyoto Univ.* 1978. V. 14. P. 713–729.
30. *Tee T. W., Trefethen L. N.* A rational spectral collocation method with adaptively transformed Chebyshev grid points // *SIAM J. Sci. Comput.* 2006. V. 28. N 5. P. 1798–1811.
31. *Семисалов Б. В., Кузьмин Г. А.* К вопросу о приближении гладких функций с погранслойными составляющими // *Труды УрО РАН*. 2021. Т. 27. С. 111–124.
32. *Iri M., Moriguti S., Takasawa Y.* On a certain quadrature formula // *RIMS Kokyuroku Kyoto Univ.* 1970. V. 91. P. 82–118 (in Japanese).
33. *Zakharov V. E., Filonenko N.* The energy spectrum for stochastic oscillation of a fluid's surface // *Dokl. Akad. Nauk*. 1966. V. 170. P. 1292–1295.

34. *Salzer H. E.* Lagrangian interpolation at the Chebyshev points $x_{n,v} = \cos(v\pi / n)$, $v = O(1)n$; some unnoted advantages // *Computer J.* 1972. V. 15. P. 156–159.
35. *Baltensperger R., Berrut J.-P., Nl B.* Exponential convergence of a linear rational interpolant between transformed Chebyshev points // *Math. Comp.* 1999. V. 68. P. 1109–1120.
36. *Berrut J.-P., Mittelmann H. D.* Adaptive point shifts in rational approximation with optimized denominator // *J. of comp. and appl. math.* 2004. V. 164–165. P. 81–92.
37. *Jafari-Varzaneh H.A., Hosseini S. M.* A new map for the Chebyshev pseudospectral solution of differential equations with large gradients // *Numerical Algorithms.* 2015. V. 69. P. 95–108.
38. *Идимешев С. В.* Дробно-рациональная аппроксимация в начально-краевых задачах с фронтами // *Вычислительные технологии.* 2020. Т. 25. № 2. С. 63–79.
39. *Huang W., Sloan D. M.* The Pseudospectral Method for Solving Differential Eigenvalue Problems // *J. Comp. Phys.* 1994. V. 111. N 2. P. 399–409.
40. *Семисалов Б. В.* Об одном подходе к численному решению задач Дирихле произвольной размерности // *СибЖВМ.* 2022. Т. 25. № 1. С. 77–95.
41. *Rump S. M.* Verification Methods: Rigorous Results using Floating-point Arithmetic // *Acta Numerica.* 2010. V. 19. P. 287–449. Rump S. M. INTLAB
42. INTerval LABoratory. In *Developments in Reliable Computing.* Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1999. P. 77–104.
43. *Бибердорф Э. А., Блинова М. А., Попова Н. И.* Модификации метода дихотомии матричного спектра и их применение к задачам устойчивости // *СибЖВМ.* 2022. Т. 21. № 2. С. 139–154.
44. *A. M. Blokhin, A. S. Ibragimova* Numerical Method for 2D Simulation of a Silicon MESFET with a Hydrodynamical Model Based on the Maximum Entropy Principle // *SIAM Journal on Scientific Computing.* 2009. V. 31. P. 2015–2046.
45. *Connaughton C., Josserand C., Picozzi A., Pomeau Y., Rica S.* Condensation of Classical N linear Waves // *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 95. Art. #263901.
46. *Bell N. K., Nazarenko S. V.* Reflected wave solution of Alfvén wave turbulence // *J. of Physics A: Mathematical and Theoretical.* 2018. V. 51. N 40. Art. # 405501.
47. *Nazarenko S. V., Grebenev V. N., Medvedev S. B., Galtier S.* The focusing problem for the Leith model of turbulence: a self-similar solution of the third kind // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical.* 2019. V. 52. N 15. Art. # 155501.
48. *Escobedo M., Velázquez J. J. L.* On the theory of Weak Turbulence for the N linear Schrödinger Equation // *Memoirs of the American Mathematical Society.* 2015. V. 238. N 1124.
49. *Васкевич В. Л., Щербаков А. И.* Сходимость последовательных приближений в задаче Коши для интегродифференциального уравнения с квадратичной нелинейностью // *Матем. труды.* 2018. Т. 21. № 2. С. 136–149.
50. *Lanford O. E.* Time evolution of large classical systems. Chapter in book: Moser J. (eds) *Dynamical Systems, Theory and Applications.* Lecture Notes in Physics, vol 38. Berlin, Heidelberg: Springer. 1975.
51. *Deng Y., Hani Z.* Full derivation of the wave kinetic equation // *Inventiones mathematicae.* 2023. <https://doi.org/10.1007/s00222-023-01189-2>