Отзыв официального оппонента

на диссертацию Белова Александра Александровича
«*Обобщение метода конечных разностей на задачи с особенностями в решении*», представленную к защите ПДС 0200.006 при федеральном государственном автономном образовательном учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы» на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Актуальность темы диссертационной работы. В физике и технике возникают и будут возникать все более сложные новые задачи, предъявляющие высокие требования к точности и надежности расчетов. Это приводит к бурному развитию приближенных методов расчета, из которых наиболее универсальными являются метод конечных разностей (МКР) и метод конечных элементов (МКЭ). В рамках этих подходов разработано большое количество алгоритмов как общего назначения, так и ориентированных на конкретные прикладные задачи, некоторые из алгоритмов реализованы в известных пакетах программ.

Применение известных алгоритмов МКР к новым задачам сопряжено со значительными трудностями: потеря точности, замедление или отсутствие сходимости, потеря устойчивости и т.д. Поэтому обобщение МКР на новые классы задач требует разработки новых алгоритмов, повышающих точность и надежность этого метода.

Большой вклад в развитие МКР был сделан Н.Н. Калиткиным и его учениками: предложенные ими алгоритмы позволили значительно расширить круг задач, которые удается успешно решать с помощью МКР.

Алгоритмы, развиваемые школой Н.Н. Калиткина, имеют следующие особенности. Во-первых, они включают многосеточный расчет с апостериорным контролем фактической погрешности и рекуррентным повышением точности. Основы этого подхода были заложены в работах Ричардсона. Во-вторых, для краевых задач используются консервативные схемы. Также Н.Н. Калиткиным были впервые введены бикомпактные схемы, обобщающие консервативные схемы Самарского. В-третьих, для начальных задач широко применяются параметризации через длину дуги интегральной кривой.

Однако, несмотря на достигнутые успехи, ряд задач по-прежнему не удается решить в рамках существующих реализаций МКР. Общим свойством этих задач является наличие принципиальных трудностей, связанных с наличием особенностей в решении: пограничных слоев (которые при уменьшении ширины в пределе стремятся к сильным разрывам), сингулярностей (в которых решение обращается в бесконечность), сильных либо слабых разрывов на границах раздела сред. Поэтому разработка новых подходов, позволяющих решать данные задачи в рамках МКР, является актуальной.

Характеристика содержания диссертационной работы. Целью диссертационной работы является обобщение МКР на новые классы задач, решение которых содержит особенности (пограничные слои, сингулярности, разрывы) и которые представляют трудность для известных алгоритмов, построенных в рамках МКР.

Введение содержит общую характеристику работы. Обоснована актуальность решаемых задач, сформулированы цели и задачи работы, указана научная новизна полученных результатов, их теоретическая и практическая значимость. Описаны методы и методология исследования, методы обоснования достоверности результатов и их апробации. Сформулированы положения, выносимые на защиту.

В первой главе дан обзор МКР для ОДУ, уравнений в частных производных и миметических схем. Приведено изложение метода сгущения сеток и апостериорных оценок точности в современной формулировке. Перечислены задачи, которые по-прежнему представляют трудности для существующих конечно-разностных подходов.

Во второй главе предложен новый метод автоматического выбора шага по наклону и кривизне интегральной кривой – геометрически адаптивные сетки. Разработана процедура сгущения сеток, позволяющая применить метод Ричардсона и находить апостериорную асимптотически точную оценку погрешности полученного решения. Для расчетов по явным схемам построены экономичные методы вычисления кривизны.

В третьей главе предложен соискателем новый специализированный численный метод для задач кинетики. Этот метод явный, и его трудоемкость существенно меньше, чем у явно-неявных и чисто неявных схем. Проведены расчеты задачи кинетики химических реакций на примере водород-кислородного горения. Показано, что предложенный специализированный явный метод и явные схемы Рунге-Кутты на геометрически-адаптивных сетках успешно справляются с этими задачами. Проведено тестирование известных алгоритмов выбора шага с контролем фактической точности расчета на данном классе задач. А также показано, что известные программы, которые не используют геометрически-адаптивные сетки, теряют надежность, не обеспечивают заданную точность, а в ряде случаев и вовсе не позволяют провести расчет.

В четвертой главе разработан новый численный метод обнаружения и исследования ближайшей сингулярности алгебраического или логарифмического типа в решениях дифференциальных уравнений. Он позволяет надежно обнаруживать наиболее важные типы особенностей и находить их характеристики с апостериорной асимптотически точной оценкой погрешности. Предложен новый метод решения задачи Коши для системы ОДУ с последовательностью алгебраических особых точек целого порядка. Метод основан на введении обобщенной инверсной функции, для которой особая точка исходного решения является простым нулем.

В пятой главе для системы стационарных одномерных уравнений Максвелла построена бикомпактная (двухточечная консервативная) разностная схема, которая позволяет проводить расчеты обобщенных решений с разрывом решения и его производной. Для ряда случаев построено явное решение системы разностных уравнений бикомпактной схемы в конечном виде. Для нестационарных задач предложен новый метод спектрального разложения, позволяющий учитывать дисперсию материала. Закон дисперсии может быть произвольным (в том числе заданным таблично).

В шестой главе построены физически содержательные и сложные для расчета тестовые примеры. С их помощью показаны преимущества схем, предложенных в предыдущей главе.

В седьмой главе рассмотрена двумерная задача о наклонном падении плоской волны на одномерный плоскопараллельный рассеиватель. В рамках метода оптических путей предложен новый метод интегрирования уравнений Максвелла вдоль оптического луча, который позволяет рассчитывать эту задачу с помощью одномерных схем. Для верификации предложенного метода проведены расчеты тестовых задач с известным точным решением. Проведены расчеты спектров отражения и прохождения реальных фотонных кристаллов и выполнено сравнение этих расчетов с ранее опубликованными экспериментами. Выполнены расчеты реальной задачи о формировании поверхностной волны Блоха при наклонном падении импульса на одномерный фотонный кристалл. Проведено исследование параметров этой волны в зависимости от толщин слоев фотонного кристалла.

В восьмой главе рассмотрены некоторые задачи обработки экспериментальных данных таких как скорости химических и термоядерных реакций.

В Заключении сформулированы основные результаты работы.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, их достоверность. Обоснованность полученных результатов обусловлена тем, что для всех предложенных методов доказаны теоремы о сходимости.

Предложенные методы проверялись на тестовых задачах с известным точным решением. В ходе расчетов непосредственно проверялась сходимость численного решения к точному, а также контролировалось соответствие фактического порядка точности теоретическому.

Расчеты прикладных задач, точное решение которых неизвестно, проводились на сгущающихся сетках с апостериорной оценкой погрешности по методу Ричардсона и контролем фактического порядка точности, что обеспечивает точность решения на уровне ошибок округления компьютера.

Достоверность результатов обеспечивается тем, что расчеты по предложенным алгоритмам сравнивались с расчетами по другим широко известным методам либо с доступными результатами натурного эксперимента.

Практическая значимость исследований. Предложенные математические методы представляют интерес для широкого круга исследователей при решении прикладных задач. Геометрически-адаптивные сетки следует рассматривать как надежный метод расчета жестких задач Коши для ОДУ; они могут заменить существующие программы, основанные на вложенных схемах и локальном сгущении сетки. Методы диагностики сингулярностей и расчета задач со множественными полюсами могут стать надежным инструментом для исследования задач с разрушением решения. Построенные методы решения уравнений Максвелла применимы к различным задачам электродинамики слоистых сред (фотоника, плазмоника). Выполненные расчеты динамики поверхностных волн Блоха могут непосредственно использоваться при планировании новых экспериментов.

Недостатки работы.

По диссертационной работе Белова А.А. можно сделать следующие замечания:

1. Для доказательства теоремы 9 метрика Хаусдорфа не нужна, не ясно, зачем она упомянута на с. 74.

2. В главе 2 развит достаточно сложный метод решения систем ОДУ. Этот метод был протестирован лишь на одном тестовом примере (п. 2.3.1), причем одномерном. Следовало испытать метод на других задачах, например, задаче многих тел.
3. Вопрос о выборе оптимального параметра при интегрировании ОДУ (раздел 2.1) для ряда динамических систем исследовался в начале XX века. В задаче многих тел обычно используют не длину интегральный кривой, а регуляризирующий параметр, которой позволяет описывать столкновение двух тел без особенности. Следовало привести обзор различных подходов к выбору параметра и сравнить их в численных экспериментах.
4. На странице 95 написано: «Для каждого пакета проводилась серия расчётов с уменьшением заданной относительной точности RelTol. При заданных значениях RelTol меньше $2.22045 \cdot 10^{-14}$ эти функции принудительно увеличивают RelTol до $2.22045 \cdot 10^{-14}$.» По умолчанию в MATLAB верхний предел относительной погрешности равен $2^{-52} \approx 2.22045 \cdot 10^{-16}$. Что означает “с уменьшением заданной относительной точности”?
5. Восьмая глава состоит из 1.5 страниц, и результаты выходят за рамки данной диссертации. Поэтому соискателю следовало бы переместить из основного текста диссертации в Приложения.
6. В диссертации имеется список работ автора и список использованной литературы, нумерация которых начинается с единицы. Это может создать путаницу.

Данные замечания, однако, не снижают научной и практической ценности диссертационной работы.

Заключение. Диссертационное исследование соответствует паспорту специальности 1.2.2. «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», а именно:

п.1 «Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений» в части разработки новых математических методов моделирования объектов и явлений – экономичных методов моделирования задач кинетики реакций, процессов нелинейного горения, задач интегральной фотоники и ряда других;

п.2 «Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий» в части разработки, обоснования и тестирования новых эффективных вычислительных методов для задач с особенностями в решении – жестких задач Коши для ОДУ с контрастными структурами, задач Коши для ОДУ с сингулярностями, одномерных уравнений Максвелла в слоистых диспергирующих средах – с применением современных компьютерных технологий;

п.3 «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента» в части реализованы в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента;

п.8 «Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента» в части проведения комплексных исследований научных проблем с применением новейших методов математического моделирования и вычислительного эксперимента: моделирование кинетики реакций водород-кислородного горения, расчеты спектров реальных фотонных кристаллов, формирование и динамика поверхностных волн Блоха в диэлектрическом фотонном кристалле.

Полученные автором результаты достоверны, основные выводы и заключения обоснованы. Автореферат корректно отражает результаты диссертационного исследования. Основные результаты диссертации достаточно полно изложены в 32 работах, из которых 32 изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 22 – в периодических научных изданиях, индексируемых Web of Science и Scopus.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертационная работа «Обобщение метода конечных разностей на задачи с особенностями в решении» полностью соответствует требованием п.2.1 раздела II Положения о присуждении ученых степеней в ФГАУ ВО Российский университет дружбы народов, утвержденного Ученым советом РУДН, протокол №12 от 23 сентября 2019 года, предъявляемых к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, а ее автор – Белов Александр Александрович – степени доктора физико-математических наук.

Официальный оппонент:

академик Монгольской академии наук,
доктор физико-математических наук (05.13.18 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ),
заместитель директора
Лаборатории информационных технологий,
Объединенный институт ядерных исследований Чулуунбаатар Очбадрах

Подпись О. Чулуунбаатара заверяю.
Ученый секретарь ЛИТ ОИЯИ,
кандидат физико-математических наук О.Ю. Дереновская

Международная межправительственная организация
Объединенный институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри, 6
г. Дубна, Московская обл., Россия, 141980
+7 (496) 216-50-59, post@jinr.ru

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

06.06.2023