"УТВЕРЖДАЮ"

Первый проректор-
проректор по научной работе РУДН
доктор медицинских наук,
профессор, член-корр. РАН
____________ А.А. Костин
____

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов» (РУДН) на основании решения, принятого на заседании кафедры прикладной информатики и теории вероятностей факультета физико-математических и естественных наук РУДН.

Диссертация «Обобщение метода конечных разностей на задачи с особенностями в решении» выполнена на кафедре прикладной информатики и теории вероятностей факультета физико-математических и естественных наук РУДН.

Белов Александр Александрович 1991 года рождения, гражданин России, в 2013 году окончил с отличием физический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова по специальности «Физика». В 2017 году окончил аспирантуру физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова по направлению «Информатика и вычислительная техника».

В 2017 году в диссертационном совете Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук на тему «Экономичные методы расчета жестких задач в моделях кинетики, теплопроводности, диффузии» по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» под научным руководством чл.-корр. РАН Н.Н. Калиткина.

В период подготовки диссертации являлся доцентом кафедры прикладной информатики и теории вероятностей факультета физико-математических наук РУДН, где и работает по настоящее время.

Научный консультант – Севастьянов Леонид Антонович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры прикладной информатики и теории вероятностей факультета физико-математических наук РУДН.

Тема диссертационного исследования была утверждена на заседании Ученого совета факультета физико-математических и естественных наук РУДН 18.10.2022, протокол № 0201-08/03.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Оценка выполненной соискателем работы. Диссертационная работа Белова А.А. посвящена разработке, исследованию и практическому применению новых алгоритмов метода конечных разностей для следующих классов задач: жесткие задачи Коши для ОДУ, задачи Коши с сингулярностями в решении, задачи для системы одномерных уравнений Максвелла в слоистых средах с частотной дисперсией.

В физике и технике возникают новые все более сложные задачи, предъявляющие чрезвычайно требования к точности и надежности расчета. Это приводит к бурному развитию приближенных методов расчета, из которых наиболее универсальными являются методы конечных разностей (МКР) и конечных элементов (МКЭ). В рамках этих подходов разработано большое количество алгоритмов как общего назначения, так и ориентированных на конкретные прикладные задачи. Эти алгоритмы реализованы в широко известных прикладных пакетах.

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

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

Однако, несмотря на достигнутые успехи, ряд задач по-прежнему не удается решить в рамках существующих реализаций МКР.

1) До сих пор значительные трудности представляет расчет жестких и плохо обусловленных задач Коши (к ним относятся кинетика реакций, модели нелинейных осцилляторов, системы ОДУ, полученные в результате применения метода прямых к УрЧП и др.) Существенный вклад в развитие разностных методов для этого класса задач внесли Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Х. Розенброк, Э. Хайрер, Г. Ваннер, Дж. Бутчер, Л. Шампин, Ч. Гир, Дж. Дорман, П. Принс, С.С. Филиппов, Е.А. Новиков. Значимые

результаты получены представителями школы Калиткина: Е.А. Альшиной, А.Б. Альшиным, П.Д. Ширковым, И.П. Пошивайло.

Для расчетов жестких задач широко используют алгоритмы автоматического выбора шага, основанные на локальном сгущении сеток или вложенных схемах. Наиболее известными являются алгоритмы Гира и Дормана-Принса. В литературе неоднократно отмечалось, что фактическая точность порой не соответствует заданной пользователем. Известны также случаи, когда эти алгоритмы не позволяют завершить расчет, срываясь до того, как достигнут конец отрезка интегрирования.

2) Не меньшие трудности представляет исследование решений, имеющих подвижные особые точки, что типично для нелинейных моделей. Примерами являются нелинейное горение, кумуляция, пробой в плазме и т.д. В литературе описано большое количество подходов. Примерами являются метод масштабирования, построение нормализующих групп, адаптивные сетки на основе априорных и апостериорных оценок решения, метод движущихся сеток. Отметим работы М. Бергер и Р. Кона, А. Кангиани, Р. Рассела, Ч. Бадда, П. Гройсмана, Ч. Чо.

Наиболее работоспособным является метод Е.А. Альшиной, Н.Н. Калиткина, П.В. Корякина, основанный на анализе сходимости при сгущении сеток. Он позволяет рассчитать положение и порядок особенности, но вопрос о фактической точности такого расчета остается открытым.

В ряде приложений (например, прямое вычисление некоторых специальных функций) требуется расчет решения ОДУ не только до полюса, но и после него. Значительный вклад в эту область привнесли работы Б. Форнберга, Дж. Вайдемана, А.А. Абрамова, Л.Ф. Юхно. В литературе описаны методы, основанные на применении цепных дробей, Паде-аппроксимации и специальных заменах неизвестной функции. Однако они предназначены для расчета трансцендент Пенлеве и используют априорную информацию о виде решения. В работах М.Д. Малых и Л.А. Севастьянова был разработан способ продолжения за полюс для уравнений с квадратичной нелинейностью. Разностные методы, единообразно применимые к широкому классу задач, не предложены.

3) В ряде актуальных проблем требуется решать систему уравнений Максвелла, описывающих эволюцию электромагнитного поля в слоистых средах. В стационарном случае для таких задач наиболее популярны методы матриц рассеяния, RCWA-методы, метод конечных элементов, методы конечных разностей в частотной области. В нестационарном случае наиболее употребительными являются различные варианты метода конечных разностей во временной области. Большой вклад в развитие этих подходов

внесли Ю. Инан, А. Тафлов, Д. Салливан, Д. Берреман, Дж. Беренгер, Г. Мур, Ж. Неделек, Дж. Хистхэвен, Л.А. Севастьянов, К.П. Ловецкий, А.А. Хохлов, А.А. Егоров, В.А. Сойфер, В.В. Котляр, А.Г. Свешников, А.В. Тихонравов, А.Н. Боголюбов, Е.Л. Гусев. В литературе отмечено, что для сеточных методов значительную проблему представляет потеря точности вблизи границ раздела и учет частотной дисперсии среды.

Общим свойством перечисленных задач является наличие принципиальных трудностей, которые возникают при применении МКР. Они обусловлены наличием особенностей в решении: пограничных слоев, сингулярностей решения или его производных, разрывов на границах раздела сред.

В диссертационном исследовании Белова А.А. разработаны новые алгоритмы метода конечных разностей для перечисленных задач. Проведено их обоснование и тестирование. Предложенные алгоритмы применены к решению ряда актуальных прикладных задач: моделирование кинетики реакций водород-кислородного горения, расчеты спектров реальных фотонных кристаллов, формирование и динамика поверхностных волн Блоха в диэлектрическом фотонном кристалле.

Личное участие соискателя в получении результатов. Все результаты диссертации, выносимые на защиту, получены автором лично. В работах, опубликованных в соавторстве, вклад автора является определяющим.

Степень достоверности результатов проведенных исследований. Обоснованность полученных результатов обусловлена тем, что для всех предложенных методов доказаны теоремы о сходимости.

Предложенные методы проверялись на представительных 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. Это обеспечивает математическую точность 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.

Новизна результатов проведенных исследований. Для численного интегрирования задачи Коши для ОДУ предложен, реализован и протестирован новый метод построения квазиравномерных сеток – геометрически-адаптивных сеток – на основе оригинального подхода к выбору шага по кривизне интегральной кривой.

Предложена, реализована и протестирована новая специальная явная схема второго порядка точности для расчетов кинетики реакций, обеспечивающая положительность решения.

Оценены границы применимости сеточных методов и методов разложения по малому параметру, и дан ряд практических рекомендаций.

Предложен, реализован и протестирован новый метод обнаружения и исследования алгебраических особых точек и логарифмических полюсов для систем ОДУ, который позволяет рассчитывать параметры особенности с апостериорной асимптотически точной оценкой погрешности.

Предложен, реализован и протестирован новый метод обобщенной инверсной функции для решения задачи Коши для систем ОДУ с последовательностью алгебраических особых точек целого порядка. В отличие от ранее известных подходов, предложенный метод не использует априорной информации о свойствах задачи.

Для системы стационарных и нестационарных одномерных уравнений Максвелла предложена бикомпактная консервативная разностная схема. Для предложенных схем доказана сходимость для произвольных неравномерных сеток и неоднородных сред.

Для задачи о наклонном падении плоской волны на систему плоско-параллельных либо клиновидных пластин предложен метод интегрирования уравнений Максвелла вдоль оптического луча, позволяющий решать эту задачу по одномерным схемам.

Практическая значимость проведенных исследований. Предложенные математические методы качественно превосходят по точности, надежности и экономичности ранее известные алгоритмы, расширяют область приложения метода конечных разностей и представляют интерес для широкого круга исследователей при решении прикладных задач. Они используются в работах научной группы проф. Л.А. Севастьянова в Российском университете дружбы народов, могут непосредственно использоваться в работах, проводимых на ряде факультетов МГУ им. М.В. Ломоносова (физическом в коллективах под руководством А.Н. Боголюбова и Н.Н. Нефедова, ВМиК в коллективе под руководством Ю.А. Еремина и др.), в Институте проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН коллективом под руководством акад. РАН С.Т. Суржикова, в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН коллективами под руководством акад. РАН Б.Н. Четверушкина и чл.-корр. РАН В.Ф. Тишкина, в федеральном ядерном центре ВНИИЭФ (Саров) в коллективе под руководством Р.М. Шагалиева, в Физическом институте академии наук им. П.Н. Лебедева в коллективе под руководством А.А. Рупасова, в Объединенном институте ядерных исследований в коллективе под руководством А. Георге и П.Г. Акишина и ряде других организаций.

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, проводимых на кафедре математики Физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова в группе проф. М.О. Корпусова, в Российском университете дружбы народов в группе проф. Л.А. Севастьянова, в Московском институте электронной техники в группе проф. Г.Л. Алфимова и в других организациях.

Построенные методы решения уравнений Максвелла применимы к различным задачам электродинамики слоистых сред (фотоника, плазмоника) и могут быть использованы в СГУ группой проф. В.Л. Дербова, в РУДН в группе проф. Л.А. Севастьянова, на физическом факультете МГУ в группах проф. А.Н. Боголюбова и проф. А.А. Федянина, на факультете ВМиК МГУ в группе проф. Ю.А. Еремина, в НИУ ИТМО на мегафакультете фотоники под руководством проф. П.А. Белова и ряде других организаций. Предложенные методы могут стать надежным вычислительным инструментом в расчетах, предваряющих натурный эксперимент. Выполненные расчеты динамики поверхностных волн Блоха могут непосредственно использоваться при планировании новых экспериментов, которые проводятся в указанных коллективах на физическом факультете МГУ и в НИУ ИТМО.

Ценность научных работ соискателя.

- Для жестких задач Коши предложен, программно реализован и протестирован метод геометрически-адаптивного выбора шага по кривизне интегральной кривой. На его основе проведено оригинальное исследование кинетики реакций водород-кислородного горения.
- Для задач кинетики реакций предложена и протестирована явная схема второго порядка точности, обеспечивающая неотрицательность численного решения.

- Предложены и протестированы методы численного интегрирования ОДУ с вещественными подвижными сингулярностями. Они позволяют численного обнаружить и исследовать ближайшую особую точку алгебраического и логарифмического типа, а также проводить расчет решения с последовательностью алгебраических особых точек целого порядка.
- Для системы одномерных уравнений Максвелла в слоистой среде с частотной дисперсией предложена и протестирована бикомпактная разностная схема.
- Предложен и протестирован метод оптических путей для интегрирования уравнений Максвелла вдоль оптического луча, позволяющий рассчитывать ряд двумерных задач с помощью одномерных схем.

Специальность, которой соответствует диссертация. Диссертация выполнена в соответствии с паспортом специальности 1.2.2. «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» и включает оригинальные результаты, направленные на построение и исследование алгоритмов метода конечных разностей для задач с контрастными структурами, сингулярностями, а также разрывами решения и его производных на границах раздела сред.

В соответствии с **п. 1** паспорта специальности в диссертации разработаны новые математические методы моделирования объектов и явлений: экономичные методы моделирования задач кинетики реакций, процессов нелинейного горения, задач интегральной фотоники и ряда других.

В соответствии с **п. 2** паспорта специальности разработаны, обоснованы и протестированы новые эффективные вычислительные методы 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.

В соответствии с **п. 3** паспорта специальности предложенные эффективные численные методы реализованы в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента (GACK-GEAD для расчетов кинетики химических реакций, SiDiaG для исследования ближайшей вещественной сингулярности в решении системы ОДУ, Continuation для численного интегрирования ОДУ с несколькими вещественными алгебраическими особыми точками, BiSpDec для решения уравнений Максвелла при наклонном падении плоской волны на набор плоско-параллельных диэлектрических пластин и исследования динамики связанных состояний).

В соответствии с **п. 8** паспорта специальности проведены комплексные исследования 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.

Тем самым, в работе присутствуют оригинальные результаты одновременно из трех областей: математического моделирования, численных методов и комплексов программ.

Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем. Основные результаты по теме диссертации изложены в 32 печатном издании, из которых 32 изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 22 – в периодических научных изданиях, индексируемых Web of Science и Scopus. Основные положения и результаты диссертации отражены в следующих опубликованных работах:

1. A.A. Belov Numerical detection and study of singularities in solutions of differential equations // Doklady Math – 2016 – Vol. 93, No. 3 – P. 334-338.
2. A.A. Belov, Zh.O. Dombrovskaya. Bicompact finite-difference scheme for Maxwell equations in layered media // Doklady Math. – 2020 – Vol. 101, No. 3. – P. 185-188.
3. A.A. Belov, N.N. Kalitkin. The reciprocal function method for Cauchy problems with first order poles // Doklady Math. – 2020 – Vol. 101, No. 2 – P. 165-168.
4. A.A. Belov, N.N. Kalitkin, P.E. Bulatov, E.K. Zholkovskii. Explicit Methods for Integrating Stiff Cauchy Problems // Doklady Math. – 2019 – Vol. 99, No. 2. – P. 230-234.
5. A.A. Belov, N.N. Kalitkin, I.P. Poshivaylo. Geometrically adaptive grids for stiff Cauchy problems // Doklady Math. – 2016 – Vol. 93, No. 1. – P. 112-116.
6. A.A. Belov, Zh.O. Dombrovskaya, A.N. Bogolyubov. A bicompact scheme and spectral decomposition method for difference solution of Maxwell's equations in layered media // CAMWA. – 2021. – Vol. 96C. – p. 178-187.
7. A.A. Belov, Zh.O. Dombrovskaya. The Optical Path Method for the Problem of Oblique Incidence of a Plane Electromagnetic Wave on a Plane-Parallel Scatterer // Mathematics. – 2023. Vol. 11. – No. 2. – P. 466.
8. A.A. Belov, N.N. Kalitkin, I.A. Kozlitin. Refinement of thermonuclear reaction rates// Fus. Eng. Des. – 2019. – Vol. 141. – P. 51-58.

9. A.A. Belov, N.N. Kalitkin. Efficient Numerical Integration Methods for the Cauchy Problem for Stiff Systems of Ordinary Differential Equations // Differential equations. – 2019. – Vol. 55, No. 7. – P. 871-883.
10. A.A. Belov, N.N. Kalitkin. Numerical Integration of a Cauchy Problem Whose Solution Has Integer-Order Poles on the Real Axis // Differential equations. – 2022. – Vol. 58, No. 6. – P. 813-833.
11. A.A. Belov. Numerical blow-up diagnostics for differential equation solutions // Comp. Math. Math. Phys. – 2017. – Vol. 57, No. 1. – P. 122-132.
12. A.A. Belov, Zh.O. Dombrovskaya. Highly Accurate Methods for Solving One-Dimensional Maxwell Equations in Stratified Media // Comp. Math. Math. Phys. – 2022. – Vol. 62, No. 1. – P. 84-97.
13. A.A. Belov, Zh.O. Dombrovskaya. Testing of bicompact schemes for one-dimensional Maxwell's equations in layered media // Comp. Math. Math. Phys. – 2022. – Vol. 62, No. 9. – P. 1496-1514.
14. A.A. Belov, N.N. Kalitkin. Curvature-based grid step selection for stiff Cauchy problems // Math. Models Computer Simul. – 2017. – Vol. 9, No. 3. – P. 305-317.
15. A.A. Belov, N.N. Kalitkin. Features of calculating contrast structures in the Cauchy problem // Math. Models Computer Simul. – 2017. – Vol. 9, No. 3. – P. 281-291.
16. A.A. Belov, N.N. Kalitkin, L.V. Kuzmina. Modeling of chemical kinetics in gases // Math. Models Computer Simul. – 2017. – Vol. 9, No. 1. – P. 24-39.
17. A.A. Belov, N.N. Kalitkin. Nonlinearity problem in the numerical solution of superstiff Cauchy problems // Math. Models Computer Simul. – 2016. – Vol. 8, No. 6. – P. 638-650.
18. A.A. Belov, Zh.O. Dombrovskaya. Precision Methods of Calculating Problems of Non-Stationary Integrated Photonics // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. – 2022. – Vol. 86, No. 2. – P. 205-210.
19. Zh.O. Dombrovskaya, A.A. Belov. Difficulties faced by Yee's scheme in photonics problems // Journal of Physics: Conference Series. – 2020. – Vol. 1461. – P. 012032.
20. Zh.O. Dombrovskaya, A.A. Belov, V.A. Govorukhin. Adaptive mesh for computation of electromagnetic wave propagation through high refractive index dielectric structures // Journal of Physics: Conference Series. – 2020. – Vol. 1461. – P. 012031.
21. A.A. Belov, N.N. Kalitkin. Error estimations for the regularized double period method // Progress In Electromagnetics Research Symposium – Spring (PIERS), 2017. – P. 2123-2130.

22. A.A. Belov, M.O. Korpusov. Numerical Blow-up Diagnostics for Differential equation solutions // Progress In Electromagnetics Research Symposium – Spring (PIERS), 2017. – 2017. – P. 2637-2643.
23. А.А. Белов. Пакет GACK для расчета химической кинетики с гарантированной точностью // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2015. – вып. 71.
24. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин. Численное интегрирование задач Коши с особыми точками // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2020. – вып. 76.
25. А.А. Белов, А.С. Вергазов, Н.Н. Калиткин. Контроль точности при численном интегрировании жестких систем // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2020. – вып. 88.
26. А.А. Белов, П.Е. Булатов, Н.Н. Калиткин. Сравнительный анализ алгоритмов автоматического выбора шага для жестких задач Коши // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2019. – вып. 146.
27. А.А. Белов, А.С. Вергазов, Н.Н. Калиткин. Погрешность численного решения жестких задач Коши на геометрически-адаптивных сетках // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2019. – вып. 138.
28. А.А. Белов, О.В. Вальяников, Н.Н. Калиткин. Численное решение задач Коши с сингулярностями // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2019. – вып. 121.
29. Е.К. Жолковский, А.А. Белов, Н.Н. Калиткин. Решение жестких задач Коши явными схемами с геометрически-адаптивным выбором шага // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2018. – вып. 227.
30. П.Е. Булатов, А.А. Белов, Н.Н. Калиткин. Расчет химической кинетики явными схемами с геометрически-адаптивным выбором шага // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2018. – вып. 173.
31. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин. Численные методы решения задач Коши с контрастными структурами // Моделирование и анализ информационных систем. – 2016. – Т. 23, вып. 5. – С. 528-537.
32. A.A. Belov, N.N. Kalitkin. Numerical solution of Cauchy problems with multiple poles of integer order // Discrete & Continuous Models & Applied Computational Science. – 2022. – Vol. 30, no. 2. – P. 127-136.

Программы решения стационарной и нестационарной задач для системы одномерных уравнений Максвелла имеют свидетельства о государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ за номерами № 2022663076 от 11.07.2022 и № 2022661873 от 28.06.2022.

Текст диссертации был проверен на использование заимствованного материала без ссылки на авторов и источники заимствования. После исключения всех корректных совпадений иных заимствований не обнаружено.

Диссертационная работа Белова Александра Александровича рекомендуется к защите на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Заключение принято на заседании кафедры прикладной информатики и теории вероятностей факультета физико-математических и естественных наук Российского университета дружбы народов.

Присутствовало на заседании 34 человек.

Результаты голосования: «за» - 34 чел., «против» - 0 чел., «воздержалось» - 0 чел. 07.02.2023 г., протокол № 0200-19-04/07.

Председательствующий на заседании:
Заведующий кафедрой прикладной информатики
и теории вероятностей,
д. т. н., профессор К.Е. Самуйлов

Подпись Самуйлова К.Е. удостоверяю.

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ» * (РУДН) * ФАКУЛЬТЕТ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ И ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

Ученый Секретарь Ученого совета
факультета физико-математических
и естественных наук РУДН И.С. Зарядов