

На правах рукописи



**Белов Александр Александрович**

**Обобщение метода конечных разностей на задачи с особенностями в решении**

Специальность 1.2.2. Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Москва — 2023



## Общая характеристика работы

**Актуальность темы исследования.** 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. Алгоритмы, развиваемые школой 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. Калиткиным были впервые введены бикомпактные схемы, обобщающие консервативные схемы Самарского. В-третьих, для начальных задач широко применяется 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 в пределе при уменьшении ширины стремятся к разрывам), сингулярностей (в которых решение или его производные обращаются в бесконечность), разрывов на границах раздела сред. Поэтому разработка новых подходов, позволяющих решать данные задачи в рамках МКР, является актуальной.

**Степень разработанности темы исследования.** 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.). Значительный вклад в развитие соответствующих численных методов внесли работы следующих авторов. Дж. Гиршфельдер и Ч. Кертисс предложили одну из первых численных схем для жестких задач. Дж. Бутчер систематически развивал теорию схем Рунге-Кутты и впервые построил большое количество схем высоких порядков точности. В работах Х. Розенброка были предложены исключительно удачные явно- неявные схемы. Дальнейшему их развитию посвящены работы Э. Хайрера, Г. Ваннера, С.С. Филиппова, Е.А. Новикова. Особенно отметим работы представителей школы Калиткина: П.Д. Ширков, А.Б. Альшин и Е.А. Альшина впервые предложили двухстадийные явно-неявные схемы с комплексными коэффициентами. В работах Калиткина и И.П. Пошивайло предложены оптимальные обратные схемы Рунге-Кутты, обладающие одновременно высокой точностью и уникальной надежностью.

Для расчетов жестких задач широко используют алгоритмы автоматического выбора шага, основанные на локальном сгущении сеток или вложенных схемах. Наиболее известными являются алгоритмы Ч. Гири и Дж. Дормана, П. Принса. Дальнейшему развитию этих подходов посвящены работы Бутчера, Л. Шампина, П. Капса, Дж. Кэша, Дж. Прентиса и ряда других исследователей. Однако вопрос о фактической точности таких расчетов остается открытым. 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.

Характерным примером жесткой задачи является задача кинетики химических реакций. Эта задача имеет ряд специфических особенностей; в частности, ее решение является неотрицательным. Калиткин и В.Я. Гольдин построили специализированную разностную схему для этой задачи, обеспечивающую неотрицательность численного решения. Эта схема была очень надежной, однако она имела первый порядок точности.

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. М. Бергер и Р. Кон предложили метод масштабирования. Развитием этого подхода является применение нормализующих групп, предложенное в работах Л. Чена и соавторов. В работах А. Кангиани и соавторов были предложены адаптивные сетки на основе априорных и апостериорных оценок решения. Ч. Бадд и Р. Рассел предложили и программно реализовали метод движущихся сеток. В работах П. Гройсмана для задач с сингулярностями предложено использовать чисто неявные схемы (например, обратную схему Эйлера). В работах Ч. Чо введено понятие численного разрушения и предложен алгоритм его обнаружения.

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

3) В ряде приложений (прямое вычисление некоторых специальных функций и др.) требуется расчет решения ОДУ не только до полюса, но и после него. В работах Б. Форнберга, Дж. Вайдемана, А.А. Абрамова, Л.Ф. Южно разработан ряд подходов для расчета трансцендент Пенлеве. В работах М.Д. Малых и Л.А. Севастьянова был разработан способ продолжения за полюс для уравнений с квадратичной нелинейностью. Однако разностные методы, единообразно применимые к широкому классу задач, не предложены.

4) В ряде актуальных проблем требуется решать систему уравнений Максвелла, описывающих эволюцию электромагнитного поля в слоистых средах. В стационарном случае для таких задач наиболее популярны следующие методы. Современная формулировка метода матриц рассеяния построена Д. Берреманом; систематическое применение этого метода к прикладным задачам представлено в работах А.Г. Свешникова, А.В. Тихонравова, Севастьянова, К.П. Ловецкого, А.А. Хохлова. Методы типа RCWA предложены в работах М. Мохарама и Т. Гейлорда. Этот класс методов активно развивается в работах Севастьянова, Ловецкого, Хохлова, Егорова, В.А. Сойфера. Основопологающие результаты по методу конечных элементов получены в работах Ж. Неделека, П. Равьяра и Дж. Томаса, Дж. Хистхэвена; систематическому применению этого метода посвящены работы В.В. Котляра и Сойфера. Современная формулировка метода конечных разностей в частотной области приведена в монографии Ю. Инана и Р. Маршалла. В нестационарном случае наиболее употребительными являются различные варианты метода конечных разностей во временной области. Большой вклад в развитие этого подхода внесли Инан, А. Тафлов, Д. Салливан, Дж. Беренгер, Г. Мур, Сойфер, Котляр, Свешников, А.Н. Боголюбов. В литературе отмечено, что для сеточных методов значительную проблему представляет потеря точности вблизи границ раздела и учет частотной дисперсии среды.

**Цель диссертационной работы.** Целью диссертационной работы является обобщение метода конечных разностей на задачи с вычислительными особенностями: контрастные структуры, подвижные особые точки, разрывы коэффициентов. С этой целью были рассмотрены математические модели, имеющие указанные особенности: жесткие задачи Коши для ОДУ (включая задачу кинетики реакций), задачи Коши с сингулярностями в решении (включая уравнения в частных производных, например, модели нелинейного горения), задачи для системы одномерных уравнений Максвелла в слоистых средах с частотной дисперсией.

**Задачи диссертационной работы.** Для достижения указанной цели решены следующие задачи:

1. Разработка, обоснование и тестирование алгоритма выбора шага по кривизне интегральной кривой для численного интегрирования задач Коши для ОДУ.
2. Разработка, программная реализация и тестирование явной схемы для расчета кинетики реакций, которая имеет второй порядок точности и обеспечивает неотрицательность численного решения. Сравнение предложенной схемы с другими методами первого и второго порядка точности.
3. Разработка, обоснование и тестирование методов численного исследования подвижных особых точек и их последовательностей в решениях ОДУ с апостериорной асимптотически точной оценкой погрешности. Реализация предложенных методов в виде комплекса проблемно-ориентированных программ.
4. Применение предложенных методов к исследованию сингулярностей в решениях УрЧП методом прямых.
5. Разработка, обоснование, программная реализация и тестирование би-компактной разностной схемы для одномерной системы уравнений Максвелла в слоистых средах. Сравнение предложенных схем с другими методами (МКЭ, МКР во временной области).
6. Разработка, обоснование и тестирование метода интегрирования уравнений Максвелла вдоль оптического луча для задачи о наклонном падении плоской волны на набор плоско-параллельных пластин. Реализация предложенного метода в виде комплекса проблемно-ориентированных программ.

**Научная новизна.** 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 бикompактная консервативная разностная схема. Для предложенных схем доказана сходимость для произвольных неравномерных сеток и неоднородных сред.

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

**Теоретическая и практическая значимость работы.** 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. 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. 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.

**Методы исследования.** При разработке математических алгоритмов использовались традиционные методы вычислительной математики. Разностные схемы составлялись методом разностной аппроксимации. Для тестирования предложенных методов проводились расчеты задач с известным точным решением. Вычислялась погрешность численного решения относительно точного. Дополнительно вычислялись оценки точности по Ричардсону.

При разработке прикладных пакетов был использован язык Matlab, совместимый со свободно распространяемой средой для математических вычислений GNU Octave.

### **Положения, выносимые на защиту:**

1. 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.
2. Для задач кинетики реакций предложена и протестирована явная схема второго порядка точности, обеспечивающая неотрицательность численного решения.
3. Предложены и протестированы методы численного интегрирования ОДУ с вещественными подвижными сингулярностями. Они позволяют численно обнаружить и исследовать ближайшую особую точку алгебраического и логарифмического типа, а также проводить расчет решения с последовательностью алгебраических особых точек целого порядка.
4. Для системы одномерных уравнений Максвелла в слоистой среде с частотной дисперсией предложена и протестирована бикомпактная разностная схема.



5. Предложен и протестирован метод оптических путей для интегрирования уравнений Максвелла вдоль оптического луча, позволяющий рассчитывать ряд двумерных задач с помощью одномерных схем.

### **Достоверность и обоснованность полученных результатов.**

**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 натурального эксперимента.

**Апробация результатов.** Результаты работы докладывались на конференциях: международные конференции «Современные проблемы вычислительной математики и математической физики» памяти академика А.А. Самарского к 95-летию со дня рождения и к 100-летию со дня рождения (Москва, июнь 2014, июнь 2019), международная конференция «Современные проблемы математической физики и вычислительной математики» к 110-летию со дня рождения академика А.Н. Тихонова (Москва, ноябрь 2016), XVII, XIX, XXI международные конференции «Харитоновские тематические научные чтения» (Саров, март 2015, апрель 2017, апрель 2019), международная конференция Progress In Electromagnetics Research Symposium (Санкт-Петербург, май 2017), международная конференция 13th annual workshop «Numerical methods for problems with layer phenomena» (Москва, апрель 2016), Научно-координационная сессия по неидеальной плазме (Москва, ноябрь 2015), XVI, XVII Всероссийские школы-семинары «Физика и применение микроволн» им. проф. А.П. Сухорукова (Можайск, июнь 2017, июнь 2019, июнь 2021), XVII, XVIII Всероссийские школы-семинары «Волновые явления в неоднородных средах» им. проф. А.П. Сухорукова (Можайск, июнь 2018, июнь 2020) научная конференция «Ломоносовские чтения» (Москва, апрель 2016, апрель 2021), конференция Совета молодых ученых ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Москва, ноябрь 2015), конференция, посвященная 90-летию со дня рождения В.Я. Гольдина (ИПМ им М.В. Келдыша РАН).

Сделаны доклады на научных семинарах: семинар кафедры вычислительной математики ВМиК МГУ им. М.В. Ломоносова (декабрь 2013), семи-

нар кафедры математики физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова (март 2016, декабрь 2016), семинар по обратным задачам математической физики НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова (ноябрь 2016), семинар отдела № 14 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (январь 2017), семинар Института прикладной математики и телекоммуникаций РУДН (апрель 2021, май 2022), семинар по вычислительной и прикладной математике Лаборатории информационных технологий им. М.Г. Мещерякова ОИЯИ (Дубна, ноябрь 2021).

**Личный вклад автора.** Все результаты диссертации, выносимые на защиту, получены автором лично. В работах, опубликованных в соавторстве, вклад автора является определяющим.

**Публикации.** По теме диссертации всего опубликовано 22 работы в изданиях, индексируемых международными базами данных Web of Science, Scopus, 10 публикаций в журналах, входящих в перечень РУДН/ВАК, 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ, 18 публикаций в тезисах и трудах конференций. Список основных публикаций дан в конце автореферата.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, семи глав и заключения. Общий объем диссертации: 401 страница текста с 124 рисунками и 8 таблицами. Список литературы включает 531 наименование.

## Содержание работы

**Введение.** Дана общая характеристика работы. Обоснована актуальность решаемых задач, сформулированы цели и задачи работы, указана научная новизна результатов, их теоретическая и практическая значимость. Описаны методы и методология исследования. Обоснована достоверность результатов. Сформулированы положения, выносимые на защиту.

**Глава 1. Исторический очерк метода конечных разностей.** Дан обзор методов конечных разностей 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. К этой группе задач относятся  $1^{\circ}$  жесткие задачи Коши с контрастными структурами,  $2^{\circ}$  задачи Коши, решения которых имеют сингулярности на отрезке интегрирования,  $3^{\circ}$  задачи для уравнений в частных производных в слоистых средах. Эти задачи имеют общую черту: их решения содержат особенности. Особенностью может быть как особая точка в узком смысле (в которой решение обращается в бесконечность), так и сильный либо слабый разрыв (в котором решение остается конечным). Контраст-

ная структура также может рассматриваться как особенность, поскольку в пределе при увеличении жесткости она стремится к сильному разрыву.

**Глава 2. Жесткие задачи Коши.** Жесткими называют задачи, в которых присутствуют процессы с сильно различающимися характерными временными масштабами. Строгое определение жесткости для задач Коши предложено Ракитским<sup>1</sup>. Традиционно считается, что для жестких задач явные схемы непригодны<sup>2</sup>.

Разумный адаптивный выбор шага существенно облегчает интегрирование жестких задач. Подавляющее большинство известных алгоритмов автоматического выбора шага основано на вложенных схемах либо локальном сгущении<sup>2,3</sup>. Примерами являются программы Гира и Дормана-Принса. В них пользователь задает желаемую точность  $\text{tolerance}$  ( $\text{tol}$ ), и расчет проводится на единственной сетке. Тестирование на задачах с известными точными решениями показывает, что для мягких задач фактическая погрешность близка к  $\text{tolerance}$ . Однако на жестких задачах фактическая погрешность может отличаться от  $\text{tolerance}$  на несколько порядков.

**Геометрически-адаптивные сетки.** 1<sup>o</sup> Рассмотрим задачу

$$du/dt = \mathbf{f}(\mathbf{u}, t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}^0. \quad (1)$$

В структуре решения жесткой задачи (см. рис. 1, А) традиционно выделяют 2 области. Первая – пограничные слои; это участки быстрого изменения решения. Они могут возникать как в начальный момент времени, так и в последующие моменты внутри промежутка интегрирования. Вторая – участки медленного изменения решения, которые называются регулярными. В диссертации предложено выделять еще одну характерную область – участок большой кривизны интегральной кривой между каждым пограничным слоем и регулярным решением. Эта область названа переходной.

2<sup>o</sup> Традиционно близость двух кривых рассматривают через норму их разности. Однако такой подход неудобен для решений жестких задач. Пограничный слой при увеличении жесткости стремится к ломаной линии с вертикальным звеном. Если положение пограничного слоя у двух решений различается на малую величину (например,  $O(h)$ ), то отличие этих кривых в норме  $C$  есть  $O(1)$ . В данной работе предложено оценивать близость этих линий в метриках типа Хаусдорфа. Непосредственно метрика Хаусдорфа для

---

<sup>1</sup>Ю.В. Ракитский, С.М. Устинов, И.Г. Черноруцкий. Численные методы решения жестких систем. М.: Наука, 1979

<sup>2</sup>Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999.

<sup>3</sup>Хайрер Э., Нерсет С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир. 1990.

множеств  $A, B$ , состоящих из элементов  $a, b$

$$D(A, B) = \max\left\{\sup_{\mathbf{b} \in B} \inf_{\mathbf{a} \in A} |\mathbf{a} - \mathbf{b}|, \sup_{\mathbf{a} \in A} \inf_{\mathbf{b} \in B} |\mathbf{a} - \mathbf{b}|\right\} \quad (2)$$

является аналогом нормы  $C$  из-за использования операции  $\sup$ . Вместо  $\sup$  проинтегрируем  $(\inf |\mathbf{a} - \mathbf{b}|)^2$  по длине дуги; это можно рассматривать как обобщение метрики Хаусдорфа, аналогичное норме  $L_2$ .

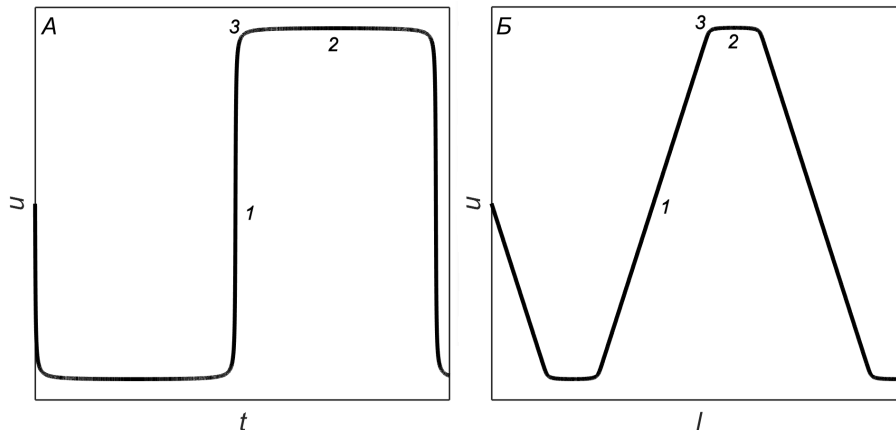


Рис. 1: Структура решения жесткой задачи; А – аргумент «время», Б – аргумент «длина дуги»; 1 – пограничный слой, 2 – регулярное решение, 3 – переходная зона.

3° Выполним переход к длине дуги интегральной кривой

$$\begin{aligned} d\mathbf{U}/dl &= \mathbf{F}(\mathbf{U}), \quad 0 \leq l \leq L; \quad U_0 = t, \quad U_j = u_j, \quad 1 \leq j \leq J; \\ F_0 &= (1 + (\mathbf{f}, \mathbf{f}))^{-1/2}, \quad F_j = f_j(1 + (\mathbf{f}, \mathbf{f}))^{-1/2}. \end{aligned} \quad (3)$$

В новом аргументе (см. рис. 1, Б) пограничные слои становятся почти прямолинейными участками с наклоном  $\pm 1$ ; их, как и регулярные участки, можно рассчитывать с крупным шагом. Однако переходные зоны остаются трудными для расчета. Поэтому шаг  $h$  должен быть тем меньше, чем больше кривизна  $\varkappa$  интегральной кривой.

4° В диссертации построена оптимальная зависимость  $h(\varkappa)$ . Доказана

**Теорема 1.** Пусть правая часть системы ОДУ имеет 2-е непрерывные производные по всем аргументам. Тогда в смысле  $L_2$ -аналога метрики Хаусдорфа оптимальная сетка для явной схемы Эйлера при числе узлов  $N \rightarrow \infty$  асимптотически удовлетворяет равенству

$$h_n = \frac{1}{N} \varkappa_n^{-2/5} \int_0^L \varkappa^{2/5}(l) dl, \quad 1 \leq n \leq N.$$

где  $L$  – полная длина дуги.

Для практических расчетов была построена следующая формула для шага:

$$h = \left[ \frac{N_{\min}}{L} + \frac{N_{\max} \varkappa^{2/5}}{\int_0^L \varkappa^{2/5}(l) dl} \right]^{-1}. \quad (4)$$

Здесь  $N_{\max}$  – число шагов на всей сетке с учетом переходных зон;  $N_{\min}$  – число шагов на регулярных участках (без учета переходных зон),  $N_{\min} \ll N_{\max}$ .

Сетка (4) была названа *геометрически-адаптивной* (GEAD mesh – Geometrically Adaptive mesh). Расчеты тестовых примеров показали, что закон  $h \sim \varkappa^{-2/5}$  хорошо работает не только для явной схемы Эйлера, но и для других явных и неявных схем. Такой выбор шага позволяет решать задачи очень высокой жесткости даже явными схемами.

**Вычисление кривизны.** *1°* Для неявных и явно-неявных схем кривизну в  $n$ -м узле удобно вычислять через матрицу Якоби правых частей  $\varkappa_n = \mathbf{f}_n \mathbf{f}$ , которая необходима для выполнения стандартного шага. Это не увеличивает общую трудоемкость расчета основной схемы.

*2°* Для явных схем такой способ неприемлемо увеличивает трудоемкость. В диссертации построены экономичные формулы вычисления кривизны для явных схем Рунге-Кутты (ERK) с числом стадий от 1 до 4. Значение кривизны в текущий момент времени (которое понадобится для расчета следующего шага) вычисляется через комбинацию стадий  $\mathbf{w}_q$  на предыдущем шаге и значение правой части  $\mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}})$  в текущий момент времени (которое также будет использовано на следующем шаге)

$$\hat{\varkappa} = h^{-1} \sum_{q=1}^{S+1} c_q \mathbf{w}_q, \quad c_q = \text{const}, \quad \mathbf{w}_{S+1} = \mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}}). \quad (5)$$

При этом для схем ERK1 и ERK2 кривизну удастся вычислить с точностью  $O(h)$ , для схем ERK3 и ERK4 – с точностью  $O(h^2)$ .

**Расчет с гарантированной точностью.** Чтобы найти асимптотически точную оценку погрешности по методу Ричардсона, проведем расчет на наборе сгущающихся сеток. Сгущение сеток будем проводить в два этапа.

*1°* Сначала произвольно выберем некоторый профиль кривизны  $\varkappa(l)$  и значения  $N_{\min}$ ,  $N_{\max}$  и вычислим с этим  $\varkappa$  интеграл в (4). С этими значениями интеграла и  $N_{\min}$ ,  $N_{\max}$  решим систему ОДУ, одновременно вычисляя  $h_n$  для каждого следующего шага по формуле (4). При этом попутно пересчитываются значения  $\varkappa_n$ . Вычислим интеграл от нового профиля  $\varkappa_n$  и удвоим  $N_{\min}$ ,  $N_{\max}$ . С этими значениями повторим решение системы ОДУ.

Повторим процедуру сгущения сетки и уточнения профиля  $\varkappa$  и получим последовательность решений и сеток. При этом четные узлы очередной сетки не совпадают с узлами предыдущей. Поэтому построенные последовательность сеток не является квазиравномерной.

Описанное сгущение сеток проводится до тех пор, пока узлы соседних сеток станут достаточно близкими. В качестве критерия близости выбирается

$$\|\zeta\| < \zeta_0, \quad \|\zeta\| = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=0}^N \zeta_n}, \quad \zeta_n = \sqrt{\xi_n} - 1/\sqrt{\xi_n}, \quad \xi_n = \frac{\hat{h}_{2n} + \hat{h}_{2n+1}}{h_n}. \quad (6)$$

Здесь  $\zeta_0$  – настроечный параметр, задаваемый пользователем. Чем он меньше, тем ближе соответственные узлы соседних сеток.

Если такое установление сеток произошло, то последняя сетка адаптирована к кривизне точного решения. Это значит, что она получена из равномерной некоторым гладким преобразованием, то есть является квазиравномерной. Далее переходим ко второму этапу.

**2<sup>o</sup>** Возьмем последнюю сетку первого этапа. Все ее узлы берем в качестве четных узлов следующей сетки. Нечетные узлы ставим так, чтобы каждый шаг  $h_n$  делился нечетным узлом новой сетки в отношении, равном  $\sqrt[4]{h_{n+1}/h_{n-1}}$ . Аналогично строится следующая сетка и т.д.

Такая последовательность сеток является квазиравномерной, т.к. четные узлы каждой новой сетки точно совпадают с узлами предыдущей сетки, а разность 2 соседних шагов новой сетки есть  $o(h)$ . Поэтому можно применить метод Ричардсона к каждой паре сеток, найти апостериорную асимптотически точную оценку погрешности и однократно уточнить решение. Предложенную процедуру можно описать с помощью алгоритма 1.

**Algorithm 1** Расчет на геометрически-адаптивных сетках с контролем точности

```

1: Задать  $N_{\min}, N_{\max}, L, \int \varkappa dl$ 
2: while  $\|\zeta\| > \zeta_0$  do
3:   while  $t < T$  do
4:     Вычислить  $h$  по формуле (4)
5:     Вычислить  $\hat{u}, t$  согласно выбранной схеме численного интегрирования
6:     Вычислить  $\varkappa$  по формуле (5)
7:     Вычислить  $\zeta$  по формулам (6)
8:   end while
9:   Вычислить  $\|\zeta\|$ 
10:   $N_{\min} \leftarrow 2N_{\min}, N_{\max} \leftarrow 2N_{\max}$ 
11: end while
12: while  $\Delta > tol$  do
13:   Квазиравномерно сгустить последнюю полученную сетку согласно п. 2o.
14:   for  $1 \leq n \leq N - 1$  do
15:     Вычислить  $\hat{u}, t$  согласно выбранной схеме численного интегрирования
16:     Вычислить поточечную оценку по методу Ричардсона
17:   end for
18:   Вычислить норму  $\Delta$  оценки точности
19: end while

```

### Глава 3. Кинетика химических реакций.

**Задача кинетики реакций** является классическим примером жесткой задачи<sup>2</sup>. Она имеет следующий вид

$$\frac{du_j}{dt} = \sum_{i,l,q=1}^J (\pm K_{jil}(T)u_i u_l \pm K_{jilq}(T)u_i u_l u_q). \quad (7)$$

Здесь  $u_j$  – концентрации,  $J$  – число компонент, включая все промежуточные,  $K$  – скорости реакций. Первое слагаемое в правой части соответствует двухчастичным реакциям, второе – трехчастичным. Знак «+» ставят для реакций с наработкой  $j$ -го вещества, знак «-» – для реакций с расходом.

Задача (7) имеет ряд особенностей. **1°** Решение  $u_j$  неотрицательно. **2°** Правые части каждого уравнения априори разбиваются знакоопределенные слагаемые. Положительные отвечают за наработку вещества, отрицательные – за расход. **3°** Скорости различных реакций могут отличаться до  $10^{10}$  раз. **4°** Порядок системы обычно очень велик (десятки уравнений). Это затрудняет применение неявных схем.

**Специальные схемы.** Задача кинетики может быть записана в виде

$$du_j/dt = f_j(\mathbf{u}) = -u_j\varphi_j(\mathbf{u}) + \psi_j(\mathbf{u}), \quad \mathbf{u} = \{u_j, 1 \leq j \leq J\}, \quad (8)$$

причем  $u_j \geq 0$ ,  $\varphi_j(\mathbf{u}) \geq 0$ ,  $\psi_j(\mathbf{u}) \geq 0$ . Это позволяет построить специализированный метод, учитывающий указанные особенности. Калиткин и Гольдин предложили<sup>4</sup> специальную схему точности  $O(\tau)$ . Она обеспечивала неотрицательность решения, однако ее точность была недостаточной, а попытки увеличить порядок точности оказались неудачными.

В диссертации построена схема точности  $O(\tau^2)$ , имеющая более высокую надежность. Приведем ее. Напишем неявную схему

$$\hat{u}_j = \frac{u_j + \tau\psi_j(\bar{\mathbf{u}})(1 + \tau\varphi_j(\bar{\mathbf{u}})/2)}{1 + \tau\varphi_j(\bar{\mathbf{u}}) + (\tau\varphi_j(\bar{\mathbf{u}}))^2/2}, \quad \bar{\mathbf{u}} = (\mathbf{u} + \hat{\mathbf{u}})/2. \quad (9)$$

Будем находить решение алгебраической системы простыми итерациями

$$\hat{u}_j^{s+1} = \frac{u_j + \tau\psi_j(\bar{\mathbf{u}}^s)(1 + \tau\varphi_j(\bar{\mathbf{u}}^s)/2)}{1 + \tau\varphi_j(\bar{\mathbf{u}}^s) + (\tau\varphi_j(\bar{\mathbf{u}}^s))^2/2}, \quad \bar{\mathbf{u}}^s = (\mathbf{u} + \hat{\mathbf{u}}^s)/2, \quad \hat{\mathbf{u}}^0 = \mathbf{u}. \quad (10)$$

При этом выполним только две итерации, так что схема (10) является явной. Увеличение  $\psi_j$  приводит к увеличению  $\hat{u}_j$ , а увеличение  $\varphi_j$  – к уменьшению  $\hat{u}_j$ , что соответствует физическому смыслу этих слагаемых. Схему Калиткина-Гольдина и схему (10) будем называть **химическими схемами** (одностадийной и двухстадийной соответственно).

<sup>4</sup>Гольдин В. Я., Калиткин Н. Н. // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1966. Т. 6, № 6, С. 162–163.

**Горение водорода в кислороде. 1°** Рассмотрим расчет кинетики реакций при изотермическом горении водород-кислородной смеси (температура  $T = 2000$  К). Система содержит 25 прямых и столько же обратных реакций и учитывает следующие 9 компонент: O, H, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, OH, H<sub>2</sub>O, HO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Начальные условия соответствовали «гремучей смеси» (2 части молекулярного H<sub>2</sub> на 1 часть молекулярного O<sub>2</sub>) при давлении  $p = 1$  атм. Расчеты проводились на GEAD-сетках по явным схемам ERK: двухстадийной (ERK2) и четырехстадийной (ERK4).

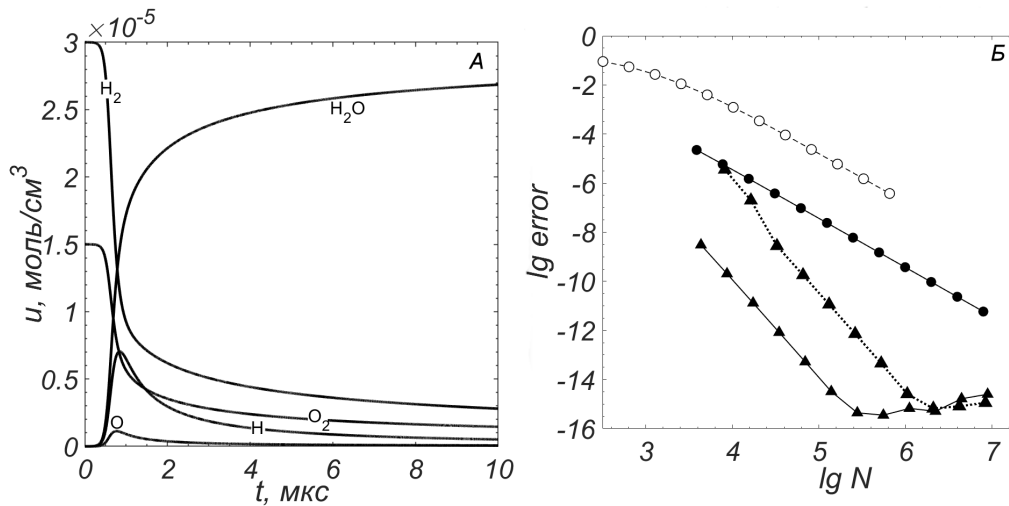


Рис. 2: Горение «гремучей смеси» при  $T = 2000$  К. А – профили концентраций важнейших компонент. Б – погрешности: сплошные линии – расчет на GEAD-сетке, пунктир – расчет на равномерной сетке по  $l$ .  $\blacktriangle$  – ERK4,  $\bullet$  – ERK2.  $\circ$  – схема (10) на равномерной сетке по  $t$ .

2° На рис 2, А приведены концентрации основных компонент в зависимости от времени. Видны вспышка смеси и выход концентраций на стационарные значения. Все графики плавные, без пилообразных осцилляций. Правильный качественный вид решения подтверждает надежность расчета.

3° Точное решение этой задачи неизвестно. Поэтому погрешности определялись по методу Ричардсона. График погрешности в зависимости от числа шагов сетки приведен на рис 2, Б. Для наглядности проведено дополнительное усреднение по компонентам решения.

Видно, что в двойном логарифмическом масштабе графики выходят на прямые, а их наклоны соответствуют теоретическим порядкам точности схем. Схема ERK4 обеспечивает отличную точность при хорошей надежности. Точность схемы ERK2 заметно хуже. Также на рис. 2, Б представлена погрешность расчета по схеме ERK4 на равномерных сетках по длине дуги. Видно, что использование GEAD-сеток дает выигрыш по точности  $\sim 3 \cdot 10^3$  раз по сравнению с равномерными сетками. Это показывает важность измельчения шага в переходных зонах.



4° Расчет по схеме (10) проводился на равномерной сетке по времени. Эта схема уверенно справилась с таким расчетом и обеспечила разумную точность  $\sim 1\%$  уже на сетке, содержащей  $N \approx 2500$  шагов. Это показывает высокую надежность химической схемы. Она с успехом применялась в прикладных расчетах течения химически реагирующих газовых смесей<sup>5</sup>.

5° Для сравнения проводился расчет этой же задачи по стандартным программам Гира и Дормана-Принса, реализованным в среде Matlab. Для определения фактической точности полученное решение сравнивалось с решением, найденным на GEAD-сетках с точностью ошибок округления. На рис. 3 показаны полученные погрешности в зависимости от tolerance.

При расчетах на GEAD-сетках фактическая погрешность контролируется по методу Ричардсона. Поэтому она равна  $\text{tol}$  вплоть до достижения ошибок округления. Программа Гира в аргументе  $t$  давала относительную точность хуже 0.1 независимо от значения  $\text{tol}$ . Такая большая погрешность неприемлема для практических расчетов. Программа Дормана-Принса в аргументе  $t$  не позволила завершить расчет. Таким образом, обе программы в этом аргументе уступают в надежности химической схеме (10).

После перехода к аргументу  $l$  обе программы смогли завершить расчет. Однако их фактическая точность резко отличалась от заданного  $\text{tol}$ . Даже если она оказывается достаточной, стандартные программы не позволяют это проверить. Сделать вывод о фактической количественной точности мы смогли только после сравнения численного решения с решением, полученным другим методом с заведомо достаточной точностью.

#### Глава 4. Задачи Коши с сингулярностями решения.

**Обнаружение ближайшей сингулярности.** 1° В ряде задач для нелинейных уравнений в частных производных возникают сингулярности ре-

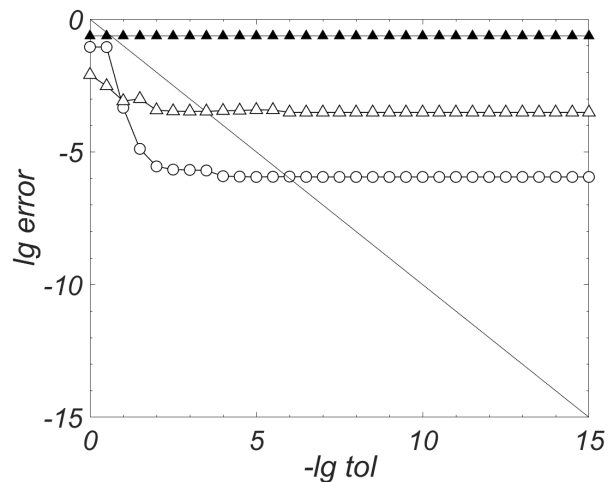


Рис. 3: Расчет горения водорода в кислороде.  $T = 2000$  К. Сплошная линия — GEAD-сетки. Маркеры — стандартные программы:  $\circ$  — программа Дормана-Принса,  $\Delta$  — программа Гира. Темные маркеры — аргумент  $t$ , светлые — аргумент  $l$ .

<sup>5</sup>Пескова Е.Е. Моделирование химически реагирующих потоков с использованием вычислительных алгоритмов высокого порядка точности. Диссертация ... канд. физ.-мат. наук. Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева. 2018.

шения. Примерами являются различные режимы горения термоядерных мишеней, процессы пробоя в полупроводниках, задачи нелинейной лазерной оптики и др. Такие решения не могут быть продолжены за сингулярность. Исходное уравнение в момент сингулярности перестает описывать физическое явление и дальнейший его расчет не имеет смысла.

2° Аналитически исследовать сингулярность достаточно сложно, получить конструктивный ответ удастся лишь в простейших случаях. В литературе описано большое количество разностных подходов, применимых к узким классам задач (как правило, параболическое уравнение с нелинейной правой частью). Альшина, Калиткин и Корякин<sup>6</sup> предложили первый метод численного исследования разрушений, применимый к широкому кругу задач. Он основан на анализе сходимости при сгущении сеток по времени  $t$ . Однако процедура была сложна и порой давала сбои. Кроме того, вопрос о точности расчета параметров сингулярности оставался неясным. Это делало метод работоспособным лишь в руках опытного вычислителя.

3° В диссертации предложен и обоснован новый способ диагностики алгебраической особой точки  $(t_0 - t)^{-q}$ , логарифмической особенности  $\ln^q(t_0 - t)$  и смешанной особенности  $(t_0 - t)^{-q} \ln(t_0 - t)$  для систем ОДУ.

Пусть, например, решение  $u(t)$  имеет алгебраическую особую точку порядка  $q$  в момент времени  $t_0$ . Решение этой задачи представимо в виде  $u(t) \approx C/(t_0 - t)^q$ ,  $C = \text{const}$ . Дифференцируя это равенство и записывая полученное выражение в узлах  $n$  и  $n + 1$ , получим систему алгебраических уравнений относительно  $q$  и  $t_0$ . Ее решение имеет вид

$$q = (t_{n+1} - t_n)(u_n/f_n - u_{n+1}/f_{n+1})^{-1}, \quad t_0 = qu_n/f_n + t_n. \quad (11)$$

Соотношения (11) являются разностной схемой для расчета  $q$  и  $t_0$ . В отличие от известных методов, эти выражения применимы в аргументе  $l$ , использование которого кардинально повышает надежность расчета. Если с увеличением текущего  $l$  значения  $q$  и  $t_0$ , выходят на константы, то поведение решения определяется множителем  $(t_0 - t)^{-q}$ , и можно диагностировать полюс. Погрешности  $q$  и  $t_0$  вычисляются асимптотически точно по методу Ричардсона.

4° Данный подход применим и к сложным моделям, описываемым нелинейными уравнениями в частных производных, так как они сводятся методом прямых к системам ОДУ. В диссертации проведено исследование модели S-режима нелинейного горения

$$u_t = (u^2 u_x)_x + u^3. \quad (12)$$

Точное решение этой задачи известно и имеет полюс порядка  $q = 1/2$  в каждой точке пространства, причем на всем отрезке решение разрушается одно-

<sup>6</sup>Альшина Е. А., Калиткин Н. Н., Корякин П. В. // ДАН. 2005. Т. 404, №3, С.295–299; Альшина Е. А., Калиткин Н. Н., Корякин П. В. // ЖВМиМФ. Т. 45, № 10, С. 1837–1847.

временно. Методом прямых сведем (12) к системе ОДУ

$$du_j/dt = 1/(2h_x^2) \cdot [(u_{j+1}^2 + u_j^2)(u_{j+1} - u_j) - (u_j^2 + u_{j-1}^2)(u_j - u_{j-1})] + u_j^3. \quad (13)$$

Здесь  $j$  и  $h_x$  – номер узла и шаг по пространству соответственно. Порядок системы  $J$  составляет несколько сотен компонент, ее правые части сложны. Поэтому такой тест представителен. Вычисления проводились по схеме Розенброка с комплексным коэффициентом CROS.

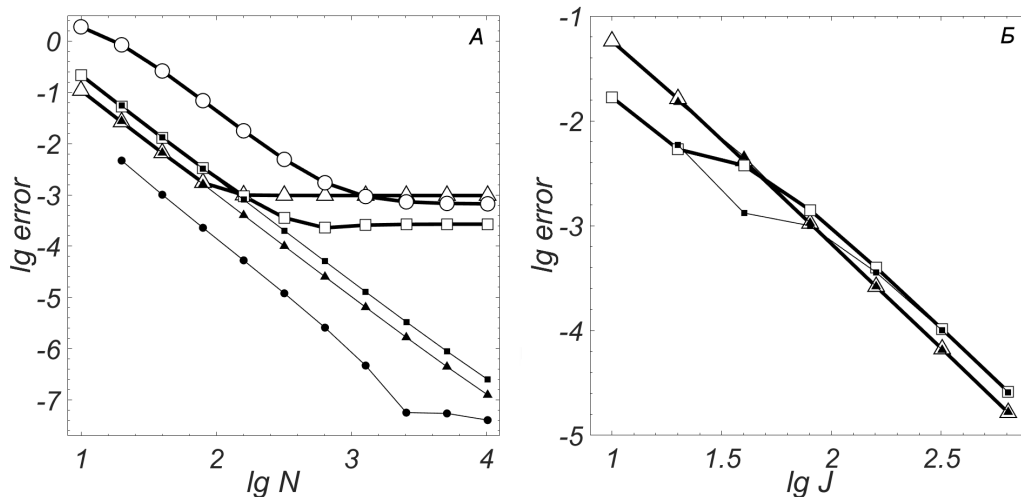


Рис. 4: Сходимость в задаче (12). А – сгущение сеток по  $l$  в системе (13), Б – сгущение сеток по  $x$  в методе прямых.  $\circ$  –  $u$ ,  $\triangle$  –  $q$ ,  $\square$  –  $t_0$ ; светлые маркеры – погрешность по точному решению; темные маркеры – оценки точности по методу Ричардсона.

**5°** На рис. 4, А показаны кривые сходимости  $u$ ,  $t_0$ ,  $q$  при сгущении сеток по длине дуги. Четко видно, что все три величины сходятся со вторым порядком точности. Однако, начиная с некоторой достаточно подробной сетки, кривые погрешности, вычисленные сравнением с точным решением, выходят на горизонтальный участок на уровне  $\sim 10^{-3}$ . Это обусловлено введением дискретизации по пространству. При этом ричардсоновские значения погрешности, относящиеся к системе ОДУ (13), продолжают сходиться со вторым порядком вплоть до фона ошибок округления (показан для  $u$ ).

**6°** На рис. 4, Б приведены кривые сходимости  $q$  и  $t_0$  при сгущении сеток по  $x$ . Видно, что на грубых сетках сходимость является нерегулярной, однако начиная с  $J \approx 120$  кривые выходят на прямолинейные участки с наклоном  $p = 2$ . Это соответствует регулярной сходимости. При этом погрешности по методу Ричардсона отлично совпадают с фактической точностью, вычисленной при помощи сравнения с точным решением. Таким образом, данная методика является более простой, надежной и удобной для практического применения, чем известные методы.

**Последовательность сингулярностей.** **1°** Существует класс важных для практики задач, в которых решение имеет несколько последова-

тельно расположенных сингулярностей. Примером является прямое вычисление ряда специальных функций (эллиптические функции, гамма-функция, трансценденты Пенлеве и т.д.). Классические численные схемы позволяют хорошо рассчитывать гладкие участки решения. Однако в окрестностях особых точек погрешность этих методов сильно возрастает вплоть до переполнения. Поэтому непосредственно продолжить решение за полюс не удастся. В литературе описаны специальные методы, применимые к расчету трансцендент Пенлеве, для которых имеется много априорной информации. Численные методы, единообразно решающие широкие классы задач, отсутствуют.

2° В диссертации предложен и обоснован метод инверсной функции для численного решения задачи Коши для ОДУ с произвольным количеством полюсов целого порядка на отрезке интегрирования. Опишем предлагаемый подход на примере скалярного ОДУ

$$du/dt = f(u, t), \quad u(0) = u^0, \quad 0 \leq t \leq T. \quad (14)$$

Пусть решение задачи (14) имеет последовательность полюсов целых порядков  $q_m$  в точках  $T_m$ , а особых точек других типов нет.

Пусть нам известна кратность ближайшего полюса  $q$ . Определим инверсную функцию

$$w(t) = \operatorname{sgn}(u)|u|^{-1/q}. \quad (15)$$

Полюс функции  $u(t)$  порядка  $q$  соответствует простому нулю функции  $w(t)$ . Определение (15) применимо при произвольной четности числа  $q$ . Инверсная функция удовлетворяет уравнению

$$dw/dt = -q^{-1}w^{1+q}f(w^{-q}, t). \quad (16)$$

Будем численно интегрировать уравнение (14) по некоторой схеме, пока  $|u_n|$  не начнет быстро увеличиваться, а отношение  $R \equiv f(u, t)/u^{1+1/q}$  – стремиться к константе. В качестве практического критерия выберем  $u_n > A$ ,  $|R_n - R_{n-1}| < \varepsilon$ , где  $A, \varepsilon$  – настроечные параметры программы.

Когда указанные условия оказываются выполненными, вычислим  $w_n$  согласно (15) и будем решать задачу (16) с этим начальным условием. Одновременно по значениям  $w_n$  вычисляем значения исходной функции  $u_n = 1/w_n^q$ . На ближайших шагах  $|w_n|$  будет убывать, затем  $w(t)$  пройдет через нуль, положение которого будет соответствовать полюсу функции  $u(t)$ . Далее  $|w_n|$  будет нарастать. Когда выполнится условие  $|w_n| > A^{-1}$ , возвращаемся к интегрированию уравнения (14). Этот алгоритм позволяет рассчитывать решение  $u_n$  в малой окрестности полюса и продолжить решение за него.

В реальных задачах кратность полюса заранее неизвестна. Ее можно исследовать с помощью формул (11). Расчетное значение  $q$  оказывается нецелым. Но если несколько шагов подряд оно достаточно близко к одному и тому же целому числу, то это целое число принимаем за кратность полюса.

**3°** Предложенный метод позволяет рассчитать положение полюса. Проинтерполируем значения  $t_n$  как функцию значений  $w_n$  в окрестности смены знака инверсной функции. Подстановка  $w_* = 0$  в интерполянту дает положение полюса  $T_1$ .

**4°** Описанный алгоритм единообразно применим как к первому полюсу, так и к произвольному числу последующих полюсов. Поэтому метод инверсной функции позволяет рассчитывать решения не только с единственной сингулярностью, но и с цепочкой полюсов.

Метод обобщен на случай систем ОДУ (1). Полюсы отдельных компонент решения могут не совпадать. Для каждой компоненты  $u^k(t)$  вектора  $\mathbf{u}(t)$  нужно вводить свою инверсную функцию  $w^k(t)$  согласно (15). Настраиваемые параметры  $A^k, \varepsilon^k$  целесообразно выбирать отдельно для каждой компоненты.

**5°** Для оценки близости решений с полюсами целесообразно использовать метрику Хаусдорфа. Использование традиционных норм разности решений неконструктивно, поскольку расчетные положения полюса на разных сетках заведомо отличаются друг от друга и от точного. Поэтому формальная разность пары решений вблизи полюса оказывается огромной.

**6°** Для апробации предложенных методов был построен нетривиальный тест, в котором решение имеет цепочку полюсов третьего порядка и не содержит других особых точек. Это точное решение имеет следующий вид:

$$u = u_0 + \operatorname{tg}^3(t - t_0) + \operatorname{tg}(t - t_0). \quad (17)$$

Оно удовлетворяет автономному уравнению

$$\begin{aligned} du/dt &= (1 + 3\psi^2)(1 + \psi^2), \\ \psi &= 2/\sqrt{27} \operatorname{sgn}(u - u^0) \operatorname{sh}\varphi, \quad \varphi = (1/3) \operatorname{arcsh} \left| \left( \sqrt{27}/2 \right) (u - u^0) \right|. \end{aligned} \quad (18)$$

Использовалась схема ERK4. Отрезок  $t \in [0, 15]$  содержал 5 полюсов.

**7°** Приведем результаты двух серий расчетов. В первой серии значение  $q = 3$  задавалось априори. На рис. 5, А сплошной линией показано точное решение, маркерами – численное решение на грубой сетке с шагом  $\tau = 0.15$ . Видно, что при сквозном прохождении всех пяти полюсов 3-го порядка численное решение визуально совпадает с точным. На рис. 5, Б темными кружками показана зависимость погрешностей от шага сетки в двойном логарифмическом масштабе. Кривая быстро выходит на прямолинейный участок с наклоном  $-4$ , что соответствует теоретическому порядку точности схемы ERK4. Это подтверждает высокую надежность метода. Также на рис. 5, Б темными треугольниками показана погрешность определения положения самого далекого 5-го полюса. Для нее справедливы те же выводы.

**8°** Во второй серии расчетов кратность полюса определялась автоматически по критерию (11). Погрешность решения на всем отрезке  $[0, 15]$

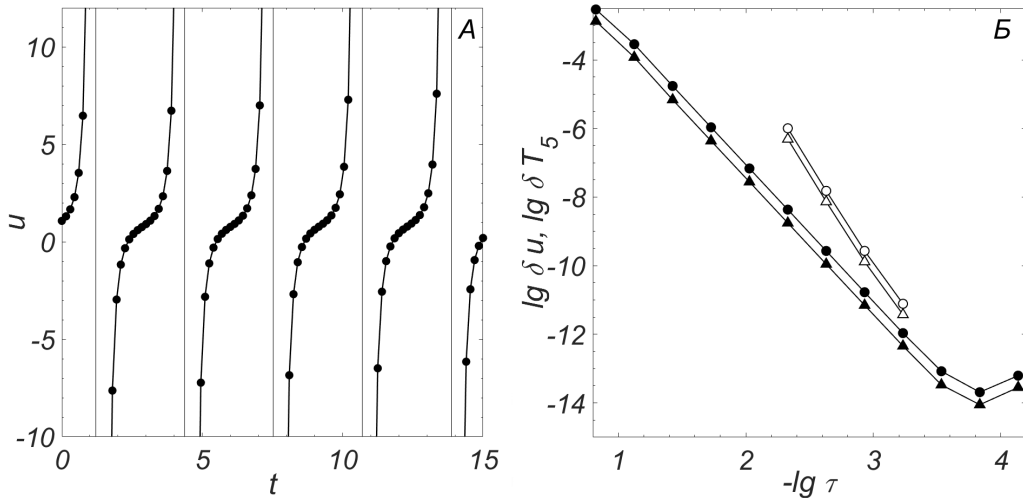


Рис. 5: Расчет теста (18) по схеме ERK4. А – решение, Б – погрешности. Обозначения – см. текст.

и ошибка положения 5-го полюса показаны на рис. 5, Б светлыми кружками и светлыми треугольниками соответственно. Видно, что эти погрешности превышают соответствующие значения, полученные при априорном задании  $q$ . Однако при сгущении сеток расхождение быстро уменьшается. Кривые стремятся к линиям, полученным при априорно заданном  $q$ . Таким образом, программа с автоматическим выбором  $q$  позволяет рассчитывать цепочки полюсов, о природе которых заранее ничего неизвестно.

## Глава 5. Разностные методы для уравнений Максвелла в слоистых средах.

**Стационарная задача. 1<sup>o</sup>** Рассмотрим плоско-параллельный рассеиватель, состоящий из  $Q$  плоско-параллельных пластин общей толщиной  $a$ . Пусть координатная ось  $z$  перпендикулярна пластинам. Электрическое поле  $\mathbf{E}$  направлено по оси  $x$ , магнитное поле  $\mathbf{H}$  – по оси  $y$ , волновой вектор  $\mathbf{k}$  – по оси  $z$ . Здесь  $k = \omega/c$ , где  $c$  – скорость света.

Пластины могут быть как диэлектрическими, так и проводящими. Обозначим координаты границ слоев через  $\xi_1 \leq \xi_2 \leq \dots \leq \xi_{Q-1}$ . На них диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$ , магнитная восприимчивость  $\mu$  и проводимость  $\sigma$  меняются скачком. Из-за нагрева токами либо падающим излучением материал пластин может быть неоднородным, т.е.  $\varepsilon$ ,  $\mu$ ,  $\sigma$  зависят от  $z$ .

Пусть на рассеиватель с обеих сторон падают монохроматические волны частоты  $\omega$  и заданной амплитуды, которые являются плоскими и линейно поляризованными. Пусть в проводящих пластинах текут внешние монохроматические токи  $\mathbf{J}_q^{\text{ext}}(z)$ , параллельные границам раздела. Кроме того, имеются индуцированные токи проводимости, порождаемые полем и равные  $\mathbf{J}_q^{\text{ind}} = \sigma \mathbf{E}$ . Если толщина пластины пренебрежимо мала, то текущий по ней ток можно считать поверхностным. Его объемная плотность есть  $\sim \delta(z - \xi_q)$ .

Поверхностные токи также могут быть внешними  $\mathbf{j}_q^{\text{ext}}$  и индуцированными  $\mathbf{j}_q^{\text{ind}} = \sigma_q^{\text{surf}} \mathbf{E}(\xi_q)$ . Пусть внешние объемные и поверхностные токи зависят от времени как  $\sim e^{-i\omega t}$  и направлены вдоль оси  $x$ .

2° Данная постановка встречается в ряде важных приложений: излучение плоских проводников, плазмоника, интегральная фотоника и др.

3° Постановка задачи включает стационарные уравнения Максвелла. Традиционно их записывают в дифференциальной форме. В диссертации используется интегральная форма

$$\int_{\Gamma} \mathbf{H}_q d\mathbf{l} = 4\pi c^{-1} \int_S (\mathbf{J}_q + \sigma_q \mathbf{E}_q) ds + c^{-1}(-i\omega) \int_S \mathbf{D}_q ds, \quad \mathbf{D}_q = \varepsilon_q \mathbf{E}_q, \quad (19)$$

$$\int_{\Gamma} \mathbf{E}_q d\mathbf{l} = -c^{-1}(-i\omega) \int_S \mathbf{B}_q ds, \quad \mathbf{B}_q = \mu_k \mathbf{H}_q. \quad (20)$$

Здесь  $S$  – произвольная поверхность, ограниченная контуром  $\Gamma$ . Используется система единиц СГС. На внешних границах поставим условия излучения

$$\partial_z \mathbf{E}_1 + i\omega c^{-1} \mathbf{E}_1 = 2ik \mathbf{E}^0, z = 0; \quad \partial_z \mathbf{E}_Q - i\omega c^{-1} \mathbf{E}_Q = 2ik \mathbf{E}^a e^{-ika}, z = a. \quad (21)$$

Здесь  $\mathbf{E}^0$ ,  $\mathbf{E}^a$  – заданные амплитуды волн, падающих справа и слева. На границах слоев поставим условия сопряжения

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_z \times (\mathbf{E}_q - \mathbf{E}_{q-1}) &= 0, & \mathbf{e}_z (\mathbf{D}_q - \mathbf{D}_{q-1}) &= 0, \\ \mathbf{e}_z \times (\mathbf{H}_q - \mathbf{H}_{q-1}) - \frac{4\pi}{c} \sigma_q^{\text{surf}} \mathbf{e}_z \times \mathbf{E}_q &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_q^{\text{ext}}, & \mathbf{e}_z (\mathbf{B}_q - \mathbf{B}_{q-1}) &= 0. \end{aligned} \quad (22)$$

4° Для оптических задач (среды кусочно-однородны, объемные токи отсутствуют) лучшими являются матричные методы<sup>7</sup>. Если материалы слоев неоднородны, то наиболее эффективен сеточно-матричный метод Свешникова-Тихонравова<sup>8</sup>. Широко применяют методы конечных и граничных элементов (Finite-Element Frequency Domain, FEFD)<sup>9</sup>. Основной их трудностью является потеря точности вблизи границ раздела из-за нарушения условий сопряжения<sup>10</sup>. Для задач, в которых присутствуют поверхностные токи и решения претерпевают сильный разрыв, методы отсутствуют.

В работах Калиткина, Корякина<sup>11</sup> показано, что для задач в слоистых средах необходимо использовать бикомпактные (двухточечные консервативные) схемы. Они сходятся на обобщенных решениях. Такие схемы построены для уравнения теплопроводности и колебаний.

<sup>7</sup>Berreman D.W. // J. Opt. Soc. Am. 1972. Vol. 62, no. 9. P. 502-510.

<sup>8</sup>Свешников А.Г., Тихонравов А.В. // Матем. моделирование. 1989. Т. 1, № 7. С. 13-38.

<sup>9</sup>см., например, Inan U.S., Marshall R.A. Numerical electromagnetics. The FDTD method. Cambridge University Press, Cambridge, 2011; Monk P. Finite Element Methods for Maxwell's Equations. Oxford University Press. Oxford. 2003; Безус Е.А., Быков Д.А., Досколович Л.Л. и др. Дифракционная оптика и нанофотоника / под ред. В.А. Соифера. М.: Физматлит, 2014; Котляр В.В. // Компьютерная оптика. 2006. Т. 29. С. 24-40.

<sup>10</sup>Hesthaven J.S. // Advances in imaging and electron physics. 2003. Vol. 127. P. 59-123.

<sup>11</sup>Калиткин Н.Н., Корякин П.В. // ДАН. 2008. Т. 419, № 6. С. 744-748; Калиткин Н.Н., Корякин П.В. // Матем. моделирование. 2009. Т. 21, № 8. С. 44-62.

5° В диссертации впервые построена бикомпактная схема для системы стационарных одномерных уравнений Максвелла. Введем специальную сетку  $\{z_n\}$ ,  $0 \leq n \leq N$ ,  $\Delta z_{n+1/2} = z_{n+1} - z_n$ , у которой границы слоев являются узлами. Для каждого шага  $\Delta z_{n-1/2}$ ,  $1 \leq n \leq N$  введем значения полей  $E_{2n-2}$ ,  $H_{2n-2}$ , относящиеся к левой границе  $z_{n-1}$ , и значения полей  $E_{2n-1}$ ,  $H_{2n-1}$ , относящиеся к правой границе  $z_n$ . Интегралы в (19), (20) вычислим по формуле трапеций, условия сопряжения аппроксимируются точно, а производные  $\partial \mathbf{E}_1 / \partial z$ ,  $\partial \mathbf{E}_Q / \partial z$  выразим из дифференциального уравнения Максвелла  $\text{rot } \mathbf{E}_q = i\omega c^{-1} \mu_q \mathbf{H}_q$ , записанного в узлах  $z_0$  и  $z_N$  соответственно. Это дает разностную схему для стационарной задачи

$$\sqrt{\varepsilon_0} E_0 + \sqrt{\mu_0} H_0 = 2\sqrt{\varepsilon_0} E^0, \quad \sqrt{\varepsilon_N} E_{2N-1} - \sqrt{\mu_N} H_{2N-1} = 2\sqrt{\varepsilon_N} E^a, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} H_{2n} - H_{2n-2} + \zeta_{n-1/2} \Delta z_{n-1/2} (E_{2n} + E_{2n-2}) + 4\pi c^{-1} \sigma_n^{\text{surf}} E_{2n} = \\ = 4\pi c^{-1} (J_{n-1/2} \Delta z_{n-1/2} - j_n), \quad 1 \leq n \leq N-1, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} E_{2n} - E_{2n-2} - i\omega (2c)^{-1} \mu_{n-1/2} \Delta z_{n-1/2} (H_{2n} + H_{2n-2}) - 4\pi c^{-1} \sigma_n^{\text{surf}} E_{2n} = \\ = 2\pi i\omega c^{-2} \mu_{n-1/2} \Delta z_{n-1/2} j_n, \quad 1 \leq n \leq N-1, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} H_{2N-1} - H_{2N-2} + \zeta_{N-1/2} \Delta z_{N-1/2} (E_{2N-1} + E_{2N-2}) = \\ = 4\pi c^{-1} J_{N-1/2} \Delta z_{N-1/2}, \end{aligned} \quad (26)$$

$$E_{2N-1} - E_{2N-2} - i\omega (2c)^{-1} \mu_{N-1/2} \Delta z_{N-1/2} (H_{2N-1} + H_{2N-2}) = 0. \quad (27)$$

Здесь введено обозначение  $\zeta = -i\omega \varepsilon c^{-1} + 4\pi c^{-1} \sigma$

3° Шаблон схемы включает только один шаг по пространству. Поэтому при выборе специальных сеток не возникает дифференцирования через границу раздела. Схема (23) – (27) выражает физические законы сохранения не только внутри слоев (интегральные уравнения Максвелла), но и на границах раздела сред (условия сопряжения). Поэтому она является полностью консервативной. Ранее такие схемы были неизвестны.

4° Доказано, что схема (23) – (27) сходится со 2-м порядком точности при наличии как слабых, так и сильных разрывов на границах раздела. Для нее применим метод сгущения сеток, асимптотически точные оценки погрешности и экстраполяция по методу Ричардсона.

**Нестационарная задача. 1°** Рассмотрим плоско-параллельный рассеиватель, состоящий из  $Q$  пластин (диэлектрических либо проводящих). Внутри пластин материал может быть неоднородным, т.е.  $\varepsilon$ ,  $\mu$ ,  $\sigma$  зависят от  $z$ . На границах раздела  $\varepsilon$ ,  $\mu$ ,  $\sigma$  меняются скачком.

Многие актуальные материалы (Si, Ge, Ta, их оксиды и т.д.) имеют частотную дисперсию диэлектрической проницаемости. Эффекты, обусловленные пространственной дисперсией (деформация волнового фронта, многомодовые режимы и др.), будем считать пренебрежимо малыми. Это справедливо для задач плазмоники и оптики диэлектрических структур. В задачах фи-



зики плазмы это приближение работает, если тепловым движением зарядов можно пренебречь (холодная плазма).

Пусть внешние объемные  $\mathbf{J}_q^{\text{ext}}$  и поверхностные  $\mathbf{j}_q^{\text{ext}}$  токи являются импульсами по времени (т.е. содержат не одну частоту, а спектр частот). На рассеиватель нормально падают волновые пакеты

$$f^0(\zeta) = E^0(\zeta)e^{-i\omega^0\zeta}, \quad \zeta = t - z/c; \quad f^a(\chi) = E^a(\chi)e^{-i\omega^0\chi}, \quad \chi = t + z/c.$$

с заданными огибающими  $E^{0,a}$  и несущей частотой  $\omega^0$ .

2° Такая задача встречается в ряде важных приложений: моделирование устройств СВЧ-техники и фотовольтаики, сверхбыстрые процессы в плазменных и оптических структурах (релаксация поверхностных волн и др.).

3° Постановка задачи включает нестационарные интегральные уравнения Максвелла

$$\int_{\Gamma} \mathbf{H}_q d\mathbf{l} - \frac{4\pi}{c} \int_S \sigma_q \mathbf{E}_q ds - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int_S \mathbf{D}_q ds = \frac{4\pi}{c} \int_S \mathbf{J}_q^{\text{ext}} ds, \quad (28)$$

$$\int_{\Gamma} \mathbf{E}_q d\mathbf{l} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int_S \mathbf{B}_q ds; \quad (29)$$

условия излучения на границе расчетной области

$$\begin{aligned} \partial_z \mathbf{E}_1 - c^{-1} \partial_t \mathbf{E}_1 &= -2\omega^0 c^{-1} \mathbf{e}_x d_{\zeta} f^0(\zeta)|_{\zeta=t-z/c}, \quad z = 0, \\ \partial_z \mathbf{E}_Q + c^{-1} \partial_t \mathbf{E}_Q &= -2\omega^0 c^{-1} \mathbf{e}_x d_{\chi} f^a(\chi)|_{\chi=t+z/c}, \quad z = a; \end{aligned} \quad (30)$$

условия сопряжения (22) на границах раздела сред; начальные условия

$$\mathbf{E}_q = 0, \quad \mathbf{H}_q = 0, \quad t = 0. \quad (31)$$

4° Для этой задачи наиболее работоспособны сеточные методы: метод конечных разностей (Finite-Difference Time Domain, FDTD), конечных элементов (Finite-Element Time Domain, FETD), конечных объемов (Finite-Volume Time Domain, FVTD) во временной области<sup>9,12</sup>. Большинство методов сводится к схеме «с перешагиванием», предложенной Йе<sup>13</sup>.

При расчетах задач в слоистых средах сеточные методы сталкиваются с двумя трудностями. Во-первых, точность резко ухудшается на границах раздела сред<sup>14</sup>. Во-вторых, многие актуальные материалы (Si, Ge, Ta и их оксиды) имеют частотную дисперсию. В этом случае указанные сеточные методы вносят существенную погрешность<sup>15</sup>.

<sup>12</sup>Taflove A., Johnson S.G., Oskooi A. Advances in FDTD Computational Electromagnetics: Photonics and Nanotechnology. Artech House, London, 2013; Sullivan D.M. Electromagnetic simulation using the FDTD method. IEEE Press, 2000.

<sup>13</sup>Yee K. // IEEE Trans. Antennas. Propag. 1966. Vol. 14, no. 3. P. 302-307.

<sup>14</sup>Armenta R.B., Sarris C.D. // Proceedings of the IEEE MTT-S International. 2012. P. 502-505. DOI:10.1109/MWSYM.2012.6258425.

<sup>15</sup>Petropoulos P.G. // IEEE Trans. Antennas Propagat. 1994. Vol. 42, no. 1. P. 62-69. J.L. Young et al. // IEEE Trans. Microwave Theory Techn. 1995. Vol. 43, no. 8. P. 1902-1910.

5° В диссертации предложен новый метод учета частотной дисперсии среды, названный методом спектрального разложения. При распространении волнового пакета в линейной диспергирующей среде для каждой гармоники реализуются свои  $\varepsilon$ ,  $\mu$ ,  $\sigma$ . Выполним численно преобразование Фурье падающих волновых пакетов, объемных и поверхностных токов по формуле трапеций, используя всюду одинаковые сетки по времени и наборы частот  $\{\omega_m\}$ ,  $\omega_{m+1} - \omega_m = \Delta\omega_m$ . Для каждой частоты получим свои амплитуды компонент падающих волновых пакетов  $E_m^{0,a}$  и источников поля  $(J_q)_m, (j_q)_m$ . Решим бикompактной схемой стационарные задачи, каждая из которых соответствует своей частоте  $\omega_m$ . Полученные амплитуды просуммируем по всем частотам  $\omega_m$ . Это и даст решение нестационарной задачи  $E(z, t), H(z, t)$ . Назовем описанный алгоритм нестационарной бикompактной схемой.

Доказано, что нестационарная бикompактная схема сходится со 2-м порядком точности. Для нее также применимы ричардсоновские оценки точности и экстраполяционное уточнение. При этом сетки по  $z, t, \omega$  должны сгущаться одновременно и в одинаковое число раз.

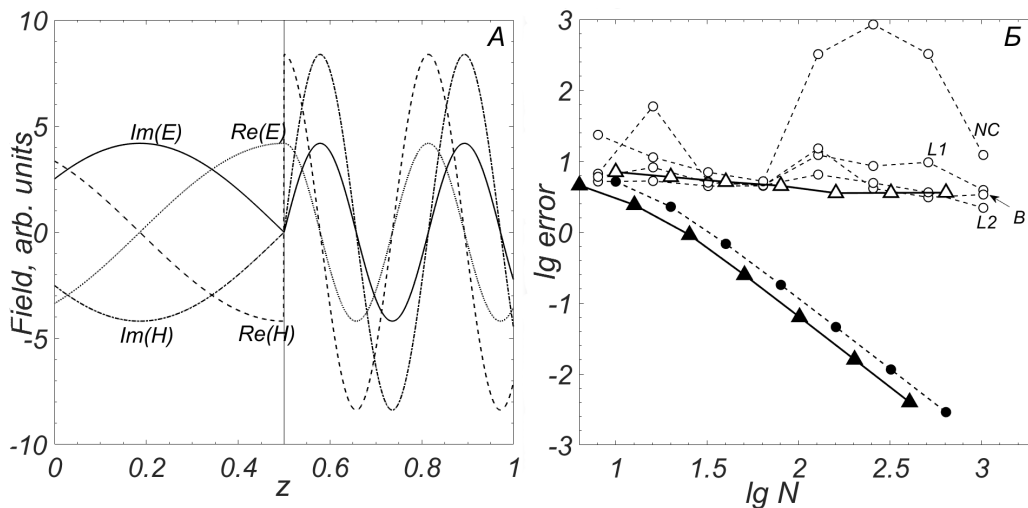


Рис. 6: Расчет задачи об излучении поверхностных токов. А – решение (32) в стационарном случае, вертикальная линия – граница раздела сред. Б – погрешности.

Пунктир – стационарная задача, сплошные линии – нестационарная задача. Темные маркеры – бикompактные схемы.  $\circ$  – метод конечных элементов: L1, L2 – лагранжевы элементы 1 и 2 порядка, В – пузырьковые (bubble) элементы 1 порядка, NC – разрывные (non-conforming) элементы 1 порядка.  $\Delta$  – явная схема FDTD.

## Глава 6. Верификация бикompактных схем для одномерных уравнений Максвелла.

1° В диссертации проведено большое количество расчетов тестовых задач с известным точным решением. Среди них задача об излучении поверхностных токов. Она описывает переизлучение метаповерхности (одиночного слоя частиц, диаметр которых меньше либо сопоставим с длиной волны) либо тонкого металлического напыления на границе рассеи-

вателя. Пусть граница раздела сред расположена в точке  $z = b < a$ . Слева от нее  $\varepsilon_1 = \mu_1 = 1$ , справа –  $\varepsilon_2 = 8$ ,  $\mu_2 = 2$ . Падающие волны  $E^{0,a}$  и объемные токи  $J_{1,2}$  отсутствуют, а по границе раздела течет поверхностный ток  $j_1$ , излучающий волны в обоих направлениях оси  $z$ . Точное решение имеет вид

$$\begin{aligned} E &= -\xi j_1([b - z]/c - t), & H &= -E, & z < b, \\ E &= \xi \sqrt{\varepsilon/\mu} j_1([z - b]\sqrt{\varepsilon\mu}/c - t), & H &= \sqrt{\varepsilon/\mu} E, & z > b. \end{aligned} \quad (32)$$

Здесь  $\xi = 4\pi c^{-1}(1 + \sqrt{\varepsilon/\mu})^{-1}$ . Задача рассматривалась в стационарной постановке при  $j_1 = e^{-i\omega t}$  и в нестационарной при  $j_1 = \exp\{-t^2/t_0^2 - i\omega t\}$ . В первом случае решение показано на рис. 6, А. Видно, что  $H$  имеет сильный разрыв, а  $E$  – слабый при  $z = b$ . Эта задача особенно трудна.

2° Погрешность определялась как разность численного и точного (32) решений. Зависимость погрешности от числа шагов для разных схем приведена на рис. 6, Б. Масштаб графика двойной логарифмический. Видно, что погрешность бикомпактных схем для стационарной и для нестационарной задач убывает, причем скорость убывания соответствует 2-му порядку точности. Точность 1% достигается уже при  $N \sim 300$  узлов сетки.

3° Для сравнения был проведен расчет стационарной задачи методом конечных элементов. Полученные погрешности также приведены на рис. 6, Б. Видно, что при сгущении сеток погрешность не убывает, то есть сходимость отсутствует. Расчеты нестационарной задачи были проведены по явной схеме FDTD. Погрешность представлена на рис. 6, Б. Она также не убывает при уменьшении шага. Приведенные расчеты убедительно верифицируют предложенные схемы. Они показывают, что для задач бикомпактные схемы превосходят классические методы по точности и надежности.

## Глава 7. Метод оптических путей.

**Постановка задачи и известные методы.** 1° Рассмотрим плоско-параллельный рассеиватель, состоящий из  $Q$  пластин (диэлектрических либо проводящих). Внутри пластин материал может быть неоднородным:  $\varepsilon$ ,  $\mu$ ,  $\sigma$  зависят от  $z$ . Имеется частотная дисперсия:  $\varepsilon$ ,  $\mu$ ,  $\sigma$  зависят от частоты поля. Эффектами пространственной дисперсии пренебрегаем.

Пусть на структуру наклонно под углом  $\alpha$  падает плоская линейно поляризованная волна. В стационарной постановке эта волна является монохроматической, в нестационарной – импульсом. Пусть внешние токи отсутствуют. При этом в проводящих пластинах возникают объемные индуцированные токи  $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ . Поверхностные токи отсутствуют. Эта задача имеет большое значение для плазмоники, интегральной фотоники, фотовольтаики и т.д.

2° Постановка задачи включает уравнения Максвелла (19), (20) для стационарной задачи либо (28), (29) для нестационарной; условия сопряжения (22) на границах раздела сред; двумерный аналог условий излучения (21) либо (30); начальные условия (31) для нестационарной задачи.

3° Для оптической задачи, в которой пластины являются диэлектрическими и однородными, а излучение – монохроматическим, лучшими являются матричные методы. Во всех остальных случаях используют сеточные методы, причем в двумерной реализации. Для стационарной задачи применяют методы конечных разностей (Finite-Difference Frequency Domain, FDFD) и конечных элементов FEFD в частотной области; для нестационарной – методы конечных разностей FDTD, конечных элементов FETD и конечных объемов FVTD во временной области. При этом возникают те же трудности, что при нормальном падении: 1) из-за преломления на границах раздела сред точность может ухудшаться; 2) в нестационарных задачах известные способы учета дисперсии вносят существенную погрешность.

**Описание метода.** 1° В диссертации предложен подход, названный методом оптических путей. Он состоит в интегрировании уравнений Максвелла вдоль направления распространения падающей и преломленной волн.

Предлагаемый подход опирается на работы коллектива Доброхотова<sup>16</sup>. Эти авторы предложили проводить интегрирование гиперболических задач вдоль направления распространения колебаний. Это аналитико-численный алгоритм. Задача решалась в два этапа.

Сначала на основе вариационного принципа вычислялись лучевые траектории. Затем вдоль них проводились одномерные расчеты фронта волны. Коллектив Доброхотова применял этот подход к расчетам коротковолновых радиотрасс в ионосфере, распространения океанских волн и другим задачам. Этот подход намного экономичнее прямого расчета многомерной задачи.

2° Применим подход Доброхотова к рассматриваемой задаче. В качестве пространственной координаты выберем направление распространения луча. Его можно найти из принципа Ферма, согласно которому время распространения света в среде должно быть минимальным

$$\int_0^a \frac{n(z)}{c} \sqrt{1 + (x'(z))^2} dz \rightarrow \min. \quad (33)$$

Если среда является неоднородной, то лучевая траектория оказывается искривленной. Лучевая траектория отраженной волны зеркально симметрична траектории падающей волны относительно нормали к границе раздела. В простейшем случае, если рассеиватель составлен из однородных изотропных диэлектрических пластин, лучевую траекторию можно построить явно на основе законов преломления и отражения. Для каждого поля в качестве неизвестной функции выберем не две проекции, а одну сумму комплексных амплитуд падающей и отраженной волн.

<sup>16</sup>см., например, Доброхотов С.Ю. и др. // ЖВМиМФ. 2020. Т. 60, №. 8. С. 1439–1448; Носиков И.А. Прямой вариационный метод для расчета траекторных характеристик КВ радиотрасс в ионосфере. Диссертация ... канд. физ.-мат. наук. Балтийский федеральный университет им. И. Канта. 2020.

Переход к лучевой траектории есть локальный поворот системы координат. Уравнения Максвелла инвариантны относительно такого поворота. Поэтому достаточно модифицировать условия сопряжения на границе раздела сред. Они принимают вид

$$\begin{aligned} E_1 = E_2, \quad H_1 \cos \alpha = H_2 \cos \beta & \text{ для } s\text{-поляризации,} \\ H_1 = H_2, \quad E_1 \cos \alpha = E_2 \cos \beta & \text{ для } p\text{-поляризации.} \end{aligned} \quad (34)$$

В новых координатах каждая пластинка должна давать такой же набег фазы (т.е. разность фаз у волны, однократно прошедшей туда и обратно через пластинку, и волны, отразившейся от наружной поверхности пластины), как в при наклонном падении. Этот набег фазы равен

$$\delta\varphi = 4\pi\lambda^{-1}h\sqrt{\varepsilon\mu} \cos \beta, \quad (35)$$

где  $h$  – исходная толщина пластины. Заменим ее на эффективную  $h \cos \beta$ .

Таким образом, исходная задача о наклонном падении эквивалентна задаче о нормальном падении суммарных комплексных амплитуд полей  $E$  и  $H$  на рассеиватель, составленный из пластин эффективной толщины, с условиями сопряжения (34). Для стационарной задачи запишем бикомпактную схему аналогично (23) – (27). В нестационарном случае составим разностную схему с помощью метода спектрального разложения и стационарной бикомпактной схемы. Использование бикомпактных схем позволяет избежать потери точности вблизи границ раздела, которая возникает в классических разностных методах. Кроме того, задача фактически решается одномерным кодом, что существенно экономичнее традиционных двумерных кодов.

**3°** Отметим, что методы группы Доброхотова применимы к задачам, в которых свойства среды плавно зависят от координаты, т.е. границы раздела отсутствуют. Обобщение этих подходов на задачи в слоистых средах с несколькими границами раздела сталкивается со значительными трудностями из-за множественных переотражений. Предлагаемый метод единообразно применим как к средам без границ раздела, так и к слоистым.

**Верификация. 1°** Рассмотрим фотонный кристалл (ФК), состоящий из 7 пар слоев  $\{\text{SiO}_2 - 130 \text{ нм}, \text{Ta}_2\text{O}_5 - 92 \text{ нм}\}^{17}$ . Эта структура изображена на рис. 7, А. На рис. 7, Б представлена зависимость  $\varepsilon(\lambda)$  для указанных материалов<sup>18</sup>. Из  $z = -\infty$  на структуру падает плоская линейно поляризованная монохроматическая волна. Угол падения равен  $45^\circ$ .

**2°** На рис. 8 приведен спектр отражения этого ФК в случае  $s$ -поляризации. Видна запрещенная зона в диапазоне длин волн 600 – 850 нм. Для них ФК работает как зеркало. Слева и справа от запрещенной зоны видны минимумы отражения, которые соответствуют практически полному

<sup>17</sup>Afinogenov B.I. // Appl. Phys. Lett. 2016. Vol. 141. P. 171107.

<sup>18</sup>Polyanskiy M.N. Refractive index database. <https://refractiveindex.info>.

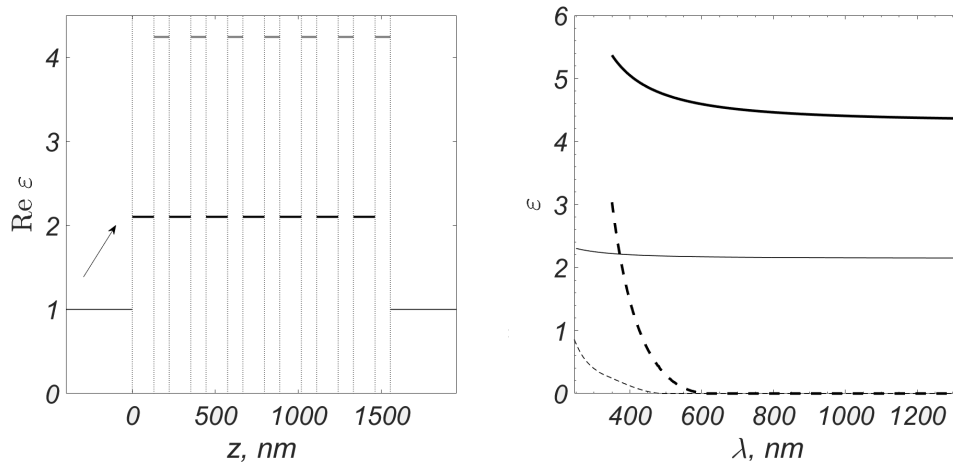


Рис. 7: Расчет задачи о фотонном кристалле. А – Зависимость  $\varepsilon(z)$  для  $\lambda = 900$  нм.

Вертикальные линии – границы слоев. Стрелка – направление распространения падающей волны. Б –  $\varepsilon(\lambda)$ , жирные линии –  $\text{Ta}_2\text{O}_5$ , тонкие –  $\text{SiO}_2$ . Сплошные линии –  $\text{Re } n$ , штриховые –  $10^3 \cdot \text{Im } n$ .

прохождению. Видно также, что расчет по бикомпактной схеме практически совпадает с расчетом методом матриц рассеяния. На выбранной сетке с  $N \approx 300$  шагов расхождение этих методов не превышает  $\sim 0.1\%$ .

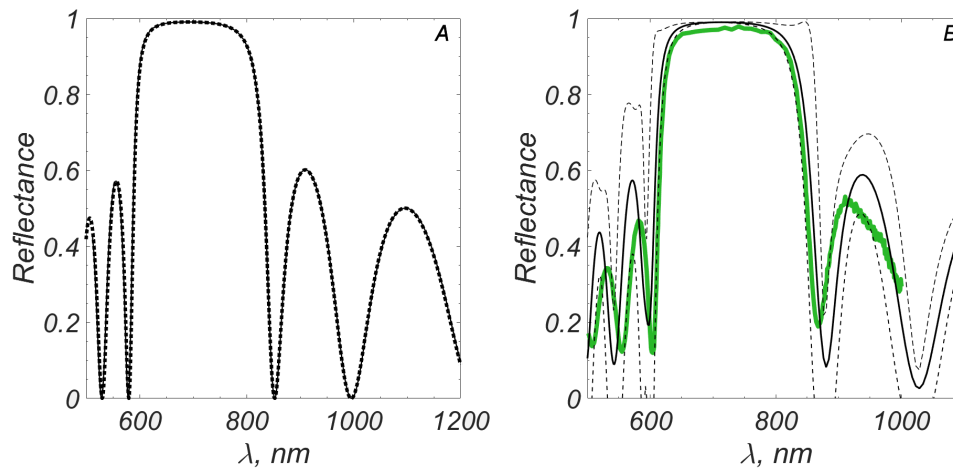


Рис. 8: Спектр отражения в задаче о фотонном кристалле. А – Идеальный ФК. Сплошная линия – бикомпактная схема, пунктир – точное решение (метод матриц рассеяния). Б – Реальный ФК. Жирная линия – эксперимент<sup>17</sup>, тонкая – расчет, штриховая – граница доверительного интервала (два стандартных отклонения).

$3^o$  В идеальном ФК границы слоев являются параллельными плоскостями. В реальном ФК из-за технологических ограничений толщины слоев не постоянны, а флуктуируют. Эти флуктуации составляют несколько процентов от размера рассеивателя. Они вносят существенные искажения в спектры.

Для учета этого фактора в диссертации предложен метод виртуального эксперимента. Пусть один из параметров задачи А известен с ошибкой  $\sigma_A$ . Будем считать этот параметр нормально распределенной случайной ве-

личной с математическим ожиданием  $A_0$  и стандартным отклонением  $\sigma_A$ . Результаты расчета необходимо усреднить по распределению  $P(A)$  значения  $A$ . Например, коэффициент отражения с учетом флуктуаций равен

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} T(A)P(A)dA, \quad \sigma_T = \sqrt{\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2}, \\ P(A) &= (\sigma_A\sqrt{2\pi})^{-1} \exp \left\{ -(A - A_0)^2 / (2\sigma_A^2) \right\}. \end{aligned} \quad (36)$$

Здесь  $\sigma_T$  – погрешность расчета из-за погрешности задания параметра  $A$ .

Введем систематическую погрешность  $h_0$  толщин, которую примем одинаковой для всех слоев. Введем также случайную погрешность толщин, распределенную по закону Гаусса с нулевым средним и стандартным отклонением  $\sigma_0$ . Конкретные ее реализации различны для разных слоев.

Величина  $h_0$  подбиралась по положению минимумов отражения, стандарт  $\sigma_0$  – по их глубине. Для обеих поляризации практически оптимальными оказались значения  $h_0 \approx 3$  нм,  $\sigma_0 \approx 3.5$  нм.

Сравнение полученного усредненного спектра с экспериментальным для  $s$ -поляризации приведено на рис. 8, Б. Показаны также доверительные интервалы усредненного спектра, равные двум стандартным отклонениям.

Видно, что положения экстремумов в расчетном и экспериментальном спектрах совпадают с точностью 1-2%. Такую точность можно считать отличной. Сами значения отражения передаются с точностью в основном 1-4%, изредка погрешность увеличивается до  $\sim 10\%$ . Это соответствует характерной точности экспериментальных измерений. Практически вся экспериментальная кривая лежит внутри доверительного коридора вокруг расчетной кривой. Это подтверждает разумность выбранных  $\sigma_0$  и  $h_0$ .

Таким образом, проведенные расчеты хорошо согласуются с экспериментом. Это подтверждает правильность предложенных методов.

**Глава 8. Скорости реакций.** Предложены новые методы регрессии экспериментальных данных, измеренных со значительными погрешностями. Эти методы позволили получить статистически достоверные доверительные коридоры аппроксимирующих кривых. Найдены **1<sup>о</sup>** сечения и скорости 7 термоядерных реакций с участием изотопов водорода и гелия, наиболее важных в проблеме управляемого термоядерного синтеза, **2<sup>о</sup>** 20 химических реакций водородо-воздушного горения, существенных для задач плазмохимии (т.е. при температурах до 1-2 кК и давлениях 1 атм.), **3<sup>о</sup>** 15 химических реакций, описывающих автокаталитический механизм пиролиза этана при давлениях от 1 до нескольких атмосфер. Эти результаты не выносятся на защиту.

**Заключение.** Приведены основные результаты работы.

1. Разработан, обоснован и протестирован алгоритм выбора шага по кривизне интегральной кривой для численного интегрирования задач Коши

для ОДУ. Построены экономичные одношаговые схемы для вычисления кривизны одновременно с решением ОДУ. Разработана процедура сгущения адаптивных сеток, которая позволяет вычислять асимптотически точную оценку погрешности по методу Ричардсона. Предложенные методы реализованы в виде комплекса проблемно-ориентированных программ. Проведено сравнение программ Гира и Дормана-Принса с предложенными методами и показаны преимущества последних. Проведено численное моделирование прикладной задачи кинетики реакций водород-кислородного горения.

2. Разработана, программно реализована и протестирована явная схема для расчета кинетики реакций, которая имеет 2-ой порядок точности и обеспечивает неотрицательность численного решения. Выполнено сравнение предложенной схемы с другими методами первого и второго порядка точности и показаны ее преимущества в задачах кинетики реакций.
3. Разработаны, обоснованы и протестированы методы численного исследования подвижных особых точек и их последовательностей в решении ОДУ с апостериорной асимптотически точной оценкой погрешности. Методы реализованы в виде комплекса программ.
4. Предложенные методы применены к исследованию сингулярностей в решениях уравнений в частных производных методом прямых.
5. Разработана, обоснована, программно реализована и протестирована би-компактная разностная схема для одномерной стационарной системы уравнений Максвелла в слоистых средах. Проведено сравнение предложенных схем с другими методами (МКЭ, МКР во временной области) и показаны преимущества предложенных подходов.
6. Разработан, обоснован и протестирован метод интегрирования уравнений Максвелла вдоль оптического луча для задачи о наклонном падении плоской волны на набор плоско-параллельных пластин. Метод реализован в виде комплекса программ.

Диссертация основана на идеях школы члена-корреспондента РАН Н.Н. Калиткина. Он определял общее направление работ и первоначальные постановки ряда задач, решенных в диссертации, а также участвовал в обсуждении результатов. Научный консультант Л.А. Севастьянов участвовал в написании текста диссертации и обсуждении результатов.

## Публикации автора по теме диссертации

**В изданиях, входящих в международную базу цитирования Scopus**

1. 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.



2. 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.
3. 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.
4. A.A. Belov, Zh.O. Dombrovskaya. Testing of bicomact schemes for one-dimensional Maxwell's equations in layered media // *Comp. Math. Math. Phys.* — 2022 — Vol. 62, No. 9 — P. 1496–1514.
5. 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.
6. A.A. Belov, Zh.O. Dombrovskaya, A.N. Bogolyubov. A bicomact 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. Bicomact finite-difference scheme for Maxwell equations in layered media // *Doklady Math.* —2020 — Vol. 101, No. 3. — P. 185–188.
8. 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.
9. 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.
10. 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.
11. 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.
12. A.A. Belov, N.N. Kalitkin, I.A. Kozlitin. Refinement of thermonuclear reaction rates // *Fus. Eng. Des.* — 2019. — Vol. 141. — P. 51–58.
13. 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.
14. A.A. Belov. Numerical blow-up diagnostics for differential equation solutions // *Comp. Math. Math. Phys.* — 2017 — Vol. 57, No. 1 — P. 122–132.

15. 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.
16. 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.
17. 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.
18. 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.
19. Belov A.A., Korpusov M.O. Numerical Blow-up Diagnostics for Differential equation solutions // *Progress In Electromagnetics Research Symposium – Spring (PIERS), 2017*. — 2017. — P. 2637–2643.
20. A.A. Belov Numerical detection and study of singularities in solutions of differential equations // *Doklady Math.* — 2016 — Vol. 93, No. 3 — P. 334–338.
21. 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.
22. 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.

### В изданиях из списков РУДН и ВАК РФ

23. 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. 105–114.
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. А.А. Белов. Пакет GACK для расчета химической кинетики с гарантированной точностью // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. — 2015. — вып. 71.

Белов Александр Александрович  
Обобщение метода конечных разностей на задачи с особенностями в  
решении

В физике и технике возникают новые все более сложные задачи, предъявляющие чрезвычайно высокие требования к точности и надежности расчета. Применение традиционных алгоритмов метода конечных разностей (МКР) к новым задачам сталкивается со значительными трудностями. Общим свойством таких задач является наличие особенностей в решении: пограничных слоев, сингулярностей, сильных либо слабых разрывов на границах раздела сред. В диссертации предложены и обоснованы, программно реализованы и протестированы новые алгоритмы метода конечных разностей для следующих классов задач: жесткие задачи Коши для ОДУ (включая задачу кинетики реакций), задачи Коши с сингулярностями в решении (включая уравнения в частных производных), задачи для системы одномерных уравнений Максвелла в слоистых средах с частотной дисперсией.

Belov Aleksandr Aleksandrovich  
Generalization of the finite difference method to problems with special points in  
the solution

In physics and engineering, new increasingly complex problems arise that place extremely high demands on accuracy and reliability of calculations. The application of traditional algorithms of the finite difference method to new problems faces significant difficulties. A common property of such problems is the presence of special points in the solution: boundary layers, singularities, strong or weak discontinuities at the interface of media. In the dissertation, new algorithms of the finite difference method are proposed, justified, programmatically implemented and tested for the following classes of problems: stiff Cauchy problems for ODES (including the problem of reaction kinetics), Cauchy problems with singularities in solution (including partial differential equations), problems for a system of the one-dimensional Maxwell equations in layered media with frequency dispersion.