

Отзыв официального оппонента

на диссертацию Баддура Али «**Исследование консервативных разностных схем в моделях движения многих тел**», представленную к защите в диссертационном совете ПДС 0200.006 при федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Российский университет дружбы народов» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Актуальность темы диссертационной работы. Диссертация Баддура Али посвящена разработке методов построения разностных схем, аппроксимирующих динамические системы и сохраняющих все их алгебраические интегралы.

Традиционно численные методы противопоставляются аналитическим и качественным методам исследования математических моделей. Однако в конце 1980-х годов произошел перелом. С одной стороны накопился огромный материал, полученный в результате компьютерных экспериментов, свидетельствующий о том, что численные методы не всегда дают решение, близкое к точному. Хорошо известен пример, указанный чл.-корр. РАН Н.Н. Калиткиным, когда реализация метода Дормана-Принца, в которой указывают желаемую точность, дает решение, точность которого отличается от желаемой на много порядков. Задачи Небесной механики представляют значительные трудности для исследования их по методу конечных разностей и дали численным методам целый ряд трудных тестов.

С другой стороны, выросла и уверенность в том, что метод конечных разностей – универсальный метод исследования дифференциальных уравнений. В середине XX века академик РАН А.А. Самарский превратил набор численных рецептов решения дифференциальных уравнений в стройную теорию разностных схем, введенные им терминология и обозначения употребляются повсеместно. Центральным вопросом того времени был вопрос о сходимости того или иного метода и скорости сходимости. Практический метод оценки ошибки конечно-разностных методов был предложен Н.Н. Калиткиным на пути обобщения результатов Ричардсона. Однако сходимость является важной, но не единственной характеристикой разностной схемы.

Одной из вех на пути осознания этого обстоятельства стало решение задачи численной идентификации подвижной особой точки, предложенной академиком РАН Г.И. Марчуком и решенной Н.Н. Калиткиным и Е.А. Альшиной в 2000-х годах. Здесь важно подчеркнуть, что ранее из учебника в учебник кочевало рассуждение, принадлежащее Эйлера, согласно которому при приближении к подвижной особенности точного решения ошибка численного метода становится все больше и больше и поэтому идентифицировать особенность

численным методом невозможно. Оказалось, однако, что при приближении к особенности приближенное решение, найденное по методу CROS, выходит на постоянный уровень, высота которого однозначно определяется порядком особенности. Это и позволяет решить задачу Марчука.

Таким образом, мы надеемся на то, что метод конечных разностей рано или поздно позволит справиться со всеми трудностями, в том числе и с задачей многих тел, но в то же время знаем, что для этого потребуются разрабатывать новые разностные схемы. Поэтому развитие методов конструирования разностных схем, обладающих заданными свойствами, является актуальной проблемой.

Стандартом для численного исследования обыкновенных дифференциальных уравнений стали явные схемы Рунге-Кутты, в виду простоты их реализации на компьютере. В применении к задаче трех тел они имеют одну характерную особенность: при счете на больших временных интервалах полная механическая энергия не сохраняется и более того в некоторые моменты времени внезапно скачком меняется. Разумеется, нарушение закона сохранения энергии чрезвычайно затрудняет интерпретацию результата с механической точки зрения, а с другой стороны является простейшим индикатором качества найденного решения.

Первая разностная схема, аппроксимирующая задачу многих тел и сохраняющая точно все классические интегралы движения – будем далее называть ее консервативной разностной схемой – была предложена Гринспеном, в 1990-х годах проводившего исследования в области молекулярной динамики. Это не случайно, интерпретировать результаты, полученные в рамках парадигмы молекулярной динамики, в ситуации, когда не сохраняется энергия, весьма затруднительно.

Следует отметить, что консервативная схем появилась как удачная находка, и до настоящего момента оставалось не ясным, ни как строить такие схемы, ни как велико их множество. В 2020 году был предложен метод квадратизации энергии, на его основе, а в действительности, существенном развитии в диссертации Баддура Али построено целое семейство консервативных схем для задачи многих тел, то есть даны ответы на эти актуальные вопросы.

Характеристика содержания диссертационной работы. В диссертации Баддура Али рассмотрено проектирование и исследования консервативных разностных схем для задачи многих тел. Для достижения поставленной цели последовательно решены следующие задачи: 1.) на основе метода квадратизации энергии разработан метод проектирования консервативных разностных схем для задачи многих тел, 2.) разработан численный метод исследование моделей движения многих тел на основе спроектированных разностных схем и

реализован в виде функции пакета Fdm for Sage, 3.) реализация протестирована путем вычисления по методу Ричардсона-Калиткина на тестовых примерах.

Такой выбор темы представляется весьма удачным. Дело в том, что достижение поставленной цели требует отладить все этапы исследования математической модели по методу конечных разностей, начиная с теоретических изысканий, направленных на конструирование разностной схемы с заданными свойствами, и кончая проверкой предсказаний теории по методу Ричардсона-Калиткина.

В первой главе дан обзор конечно-разностных методов интегрирования динамических систем и представлен пакет Fdm for Sage. Следует заметить, что Sage – одна из наиболее распространенных современных систем компьютерной алгебры, в которой собраны все свободные наработки в этой области, в чем можно видеть и свои достоинства, и свои недостатки. Численные методы традиционно не относятся к компьютерной алгебре и поэтому соответствующий блок в Sage весьма скромный, здесь имеется реализация метода Рунге-Кутты 4-го порядка. Проф. Л.А. Севастьянов и его ученики строят свои исследования вокруг идеи проникновения методов компьютерной алгебры в численные методы. Научный руководитель соискателя – М.Д. Малых – предложил своим студентам и аспирантам собрать свои результаты в общий пакет Fdm for Sage. В его реализации чувствуется конвергенция аналитических и численных методов. Напр., пользователь может узнать значение любого символьного выражения в любой точке на рассматриваемом временном отрезке даже не зная, что при этом выполняется интерполяция, порядок которой согласован с порядком разностной схемы. Методически удачным представляется и введение отдельного класса для начальных задач. Это позволяет четко отделить математическую модель, то есть задачу Коши, и метод ее решения. Полагаю, что этот пакет будет очень полезен в учебном процессе.

Во второй главе описана реализация метода Калиткина-Ричардсона в пакете Fdm for Sage, выполненная соискателем. Следует отметить, что Баддур Али использует локальную версию этого метода: он вычисляет ошибку заданного символьного выражения в заданный момент времени, в то время как обычно вычисляют ошибку по той или иной норме. Такой выбор понятен, соискателя интересует изменение алгебраических интегралов и более того, момент времени, когда ошибка становится слишком большой. При проведении серии компьютерных экспериментов в 5-ой главе этот метод позволяет оценить точность интегрирования дифференциальных уравнений. Применение этого инструмента позволяет подтвердить результаты диссертации многочисленными компьютерными экспериментами, в частности убедиться в том, что порядки аппроксимации получаются правильные.

В третьей главе описана реализация симплектического метода Рунге-Кутты в пакете fdm. Конечно, в реализации симплектического метода Рунге-Кутты никакой новизны нет, но

это – необходимый для дальнейшего шаг, поскольку в Sage такой реализации нет. Следует заметить, что симплектического метод – неявный и на каждом шаге приходится решать систему нелинейных уравнений. Соискатель использует для этого метод простых итераций, причем число итераций выбирается честно по разности двух последних значений. Метод простых итераций расходится, если шаг по времени не достаточно мал, поэтому соискатель разработал оригинальный алгоритм адаптации шага, который всегда выбирается так, чтобы удовлетворялась найденная соискателем оценка, гарантирующая сходимость метода простых итераций.

В четвертой главе описано новое семейство консервативных разностных схем для задачи многих тел. Здесь сформулирована и решена важнейшая задача диссертационного исследования: для задачи многих тел составить разностную схему, которая сохраняет все ее алгебраические интегралов точно и инвариантна относительно перестановок тел и обращения времени. Для решения этой задачи используется метод квадратизации энергии: описана замена переменных, после которой все интегралы движения задачи многих тел становятся линейными или квадратичными и поэтому их сохраняет любая симплектическая схема Рунге-Кутты. Для отыскания такой замены, научный руководитель соискателя М.Д. Малых предложил ввести в рассмотрение помимо координат и скоростей тел дополнительные переменные: расстояния между телами и обратные расстояния между телами. Соискатель доказал, что расширенная таким образом система дифференциальных уравнений обладает только линейными и квадратичными интегралами. Эти интегралы сохраняет любая симплектическая схема Рунг-Кутты в силу теоремы Купера, что и дает решение поставленной задачи.

Пятая глава посвящена тестированию семейства консервативных разностных схем для задачи многих тел. Особо следует отметить, что в тексте диссертации очень подробно описаны параметры используемых схем Рунге-Кутты, в т.ч. указаны таблицы Бутчера. Это делает результаты компьютерных экспериментов потенциально проверяемыми. Прделанные компьютерные эксперименты не только хорошо иллюстрируют теоретические результаты 4-ой главы. Они показали, что предложенный метод по затрате ресурсов близок к симплектическим методам Рунге-Кутты, но, в сравнении с ними, позволяет удерживать изменение энергии на заданном уровне ценой незначительного усложнения метода.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, их достоверность. Диссертация содержит ряд оригинальных теорем, доказательства которых были своевременно опубликованы в реферируемых журналах, что вполне подтверждает обоснованность результатов. При компьютерном моделировании используется весьма авторитетная и современная система

компьютерной алгебры Sage. Достоверность результатов вычислений по предложенным алгоритмам подтверждается совпадением результатов вычислений в тестовых примерах с результатами других авторов.

Практическая значимость исследований. Методы, разработанные в диссертации, применимы к исследованию динамических систем, применяемых в самых различных областях человеческой деятельности, от исследования Солнечной системы до исследования динамики популяций, всюду, где важно выполнение законов сохранения и баланса.

Недостатки работы. В диссертации имеется ряд недостатков.

1. При изложении метода Калиткина-Ричардсона употребляется термин диаграмма Ричардсона. Мне представляется, что этот термин не является общепринятым.
2. При проведении компьютерных экспериментов возникают случаи, когда тела подлетают близко друг к другу, то есть имеется вычислительная особенность. На траекториях появляются петельки, которые тоже можно отнести к вычислительным особенностям. Было бы интересно узнать, срабатывает ли на этих особенностях метод идентификации подвижных особенностей.
3. Вместо метода простых итераций можно применить метод Ньютона и тем самым сократить число итераций. Было бы весьма полезно предоставить пользователю самому выбрать итерационный метод в реализации неявного метода Рунге-Кутты и сравнить результаты. Навскидку результаты будут похожи, но вот затраты ресурсов существенно изменятся.
4. Работа содержит ряд опечаток и не вполне удачных с точки зрения языка оборотов речи.

Указанные недостатки не снижают общее положительное впечатление о диссертационной работе.

Заключение. Диссертационное представляет собой законченное и самостоятельное исследование, в котором решена актуальная задача проектирования консервативных разностных схем, аппроксимирующих задачу многих тел, имеющая важное научное значение.

Диссертационное исследование соответствует паспорту специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, а именно п. 1 «Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений» в части разработки новых математических методов моделирования объектов и явлений — разностных схем высокого порядка для задачи многих тел, сохраняющих все алгебраические интегралы движения; п. 2 «Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий» в части

разработки, обоснования и тестирования эффективных числительных методов исследования классической модели многих тел с применением современных компьютерных технологий; п. 3 «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента» в части реализации названных численных методов и алгоритмов в системе компьютерной алгебры Sage и проведения численных экспериментов.

Полученные автором результаты достоверны, основные выводы и заключения обоснованы. Автореферат корректно отражает результаты диссертационного исследования. Основные научные результаты диссертации достаточно полно изложены в 8 печатных изданиях, 3 из которых изданы в периодических научных журналах, индексируемых МБД Scopus, 2 — в журналах, включенных в Перечень ВАК/РУДН, 3 — в тезисах докладов.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертационная работа «Численно-аналитические методы в задачах математического моделирования» полностью соответствует требованиям п. 2.2 разделы II Положения о присуждении ученых степеней в ФГАУ ВО Российский университет дружбы народов, утвержденного Ученым советом РУДН, протокол № 12 от 23 сентября 2019 г., предъявляемых к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, а ее автор — Баддур Али — степени кандидата физико-математических наук.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук (специальность 01.01.03 — «Математическая физика»), доцент, профессор кафедры математики физического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Корпусов Максим Олегович
«30» января 2023 г.



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1

Тел.: +7 (495) 939-10-00

Электронная почта: korpusov@gmail.com