

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Белова Александра Александровича

«Экономичные методы расчета жестких задач в моделях кинетики, теплопроводности, диффузии», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Актуальность темы выполненной работы

Диссертационная работа А.А.Белова посвящена разработке численных методов, применимых для исследования так называемых *жестких* задач. Под жесткими задачами здесь понимаются задачи, для которых характерна большая разномасштабность процессов, например, наличие «быстрых» и «медленных» переменных, резкое изменение решения в некоторых областях, сменяющийся плавным поведением в других, и тому подобные явления. Жесткие задачи естественно возникают в многочисленных приложениях, в том числе, при моделировании процесса диффузии, моделировании термоядерных реакций, в фотонике, в теории ультрахолодных газов и других областях современной физики. «Наивное» использование стандартных численных методов для таких задач приводит к большим и неконтролируемым ошибкам счета. Соответственно, тематика диссертационной работы представляется чрезвычайно интересной и актуальной.

Общая методология и методика исследования

Основу диссертации составляет разработка методов численного исследования жестких задач различных типов.

Для жестких задач, возникающих при моделировании кинетики термоядерных реакций, предложена новая явная схема второго порядка точности. Эта схема имеет малую трудоемкость (не большую, чем трудоемкость двухстадийной схемы Рунге-Кутты). После тестирования на модельных примерах, схема была применена для моделирования четырехступенчатой реакции, описываемой системой из шести ОДУ. Показано, что предложенная схема является надежной.

При исследовании задачи о локализации особенностей решений дифференциальных уравнений, которую также следует считать жесткой, разработан метод диагностики типа особенности. После проведения тестовых расчетов на ОДУ, метод был применен для нелинейного уравнения параболического типа, описывающего S-режим нелинейного горения. Это уравнение было сведено методом прямых к системе ОДУ большого порядка и найден тип возникающей особенности.

Для задач, сводящихся к эллиптическим уравнениям (в частности, уравнениям типа Гельмгольца), предложен эффективный метод численного решения. Его основой является метод счета на установление, для которого предложен новый линейно-тригонометрический набор шагов. Приведены теоретические оценки точности, представлены результаты расчетов, в том числе в «трудных» случаях, когда среды являются сильно неоднородными. Далее, предложенный метод использован для описания пограничных слоев, описываемых сингулярно возмущенными эллиптическими уравнениями.

Наконец, для эффективного применения разработанных алгоритмов, автором разработан новый метод обработки экспериментальных данных, измеренных со значительной погрешностью. Он основывается на сочетании метода двойного периода, предложенного ранее Н.Н.Калиткиным, и использования стабилизатора А.Н.Тихонова. При этом получены аппроксимации для сечений четырех термоядерных реакций, актуальных для задач управляемого термоядерного синтеза.

Далее, в работе представлено детальное описание и приведены листинги трех пакетов программ: KINETIC, SIDIAG и SUFAREC, позволяющих, соответственно, исследовать кинетику реакций, диагностировать особенности решений уравнений и эффективно решать эллиптические уравнения.

Степень обоснованности и достоверности

Основные результаты диссертационной работы связаны с разработкой и обоснованием численных методов и составлением программного комплекса.

Физические модели кинетики, исследуемые в работе, являются традиционными и не вызывают сомнений. Используемые значения физических параметров обоснованы путем сравнения с результатами других исследователей. Математическая достоверность результатов подтверждается фундаментальными теоремами о сходимости расчетов на сгущающихся сетках. Все методы проверялись на тестовых задачах с известным точным решением.

Положения, выносимые на защиту, прошли апробацию на научных конференциях, семинарах институтов РАН, опубликованы в 13 печатных работах в ведущих журналах, входящих в перечень ВАК.

Научная новизна полученных результатов

Полученные результаты являются новыми. Следует отметить, что

В области численных методов

1. разработан, обоснован и реализован новый численный алгоритм решения задач физической кинетики.
2. разработан, обоснован и реализован новый алгоритм численной диагностики сингулярностей решений ОДУ.
3. разработан, обоснован и реализован новый метод решения эллиптических граничных задач, пригодный, в частности, для нахождения решений в случае, когда имеется пограничный слой.

В области математического моделирования

- Для четырех термоядерных реакций, найдены новые аппроксимации сечений и скоростей реакций. Проведено моделирование кинетики этих

реакций, оценены условия, необходимые для возникновения самоподдерживающегося горения.

Созданы новые программные комплексы:

- KINETIC, для моделирования кинетики термоядерных реакций;
- SIDIAG, для локализации особенностей решений и установления их типов;
- SUFAREC, для решения задачи Дирихле для уравнения Гельмгольца с использованием эволюционно-факторизованной схемы, разработанной в диссертации.

Таким образом, научная новизна в диссертации имеет место в области **численных методов**, в области **математического моделирования**, а также в области **создания комплекса программ**.

Значимость результатов для науки и практики

Предложенные численные алгоритмы превосходят по эффективности ранее известные алгоритмы и представляют интерес для широкого круга исследователей. В частности, новые численные методы для задач кинетики, в совокупности с результатами по аппроксимации для сечений и скоростей термоядерных реакций, могут использоваться в составе крупных пакетов для расчета моделей управляемого термоядерного синтеза, проводимых в федеральных ядерных центрах. Методы диагностики особенностей могут оказаться полезными как для физиков-прикладников (режимы с обострением в задачах нелинейной диффузии) так и для математиков (проведение тестов, типа теста Пенлеве). Методы численного исследования для сингулярно возмущенных краевых задач, разработанные в диссертации, представляют собой улучшение известных методов и имеют помимо практического, теоретический интерес.

Пакеты программ KINETIC, SIDIAG, SUFAREC, подробно описанные в диссертации и *выложенные в открытый доступ*, безусловно, представляют

интерес не только с практической точки зрения, но и служат отправной точкой для дальнейшего развития представленных в диссертации методов и подходов.

Внутреннее единство работы и ее структура

Работа состоит из введения, пяти глав и заключения.

Во **введении** (первая глава по нумерации) обсуждается понятие жесткости, содержатся формулировки основных проблем, отражено современное состояние исследований в данных областях. Далее, во введении обоснована актуальность решаемых задач, описана методология исследования и представлены положения, выносимые на защиту

Вторая глава посвящена разработке численного метода для задач кинетики. При этом одновременно с нахождением решения вычисляется апостериорная асимптотически точная оценка погрешности. Метод применен к моделированию реальной кинетики термоядерных реакций, актуальных для управляемого термоядерного синтеза. Далее, в этой же главе представлен метод локализации сингулярностей решений систем ОДУ и показана его эффективность (а) для модельных ОДУ и (б) для нелинейного уравнения диффузии, которое сводится к системе большого порядка ОДУ при помощи метода прямых.

В третьей главе представлен итерационный метод численного решения эллиптических уравнений. Этот метод является вариацией счета на установление, которая при этом обеспечивает логарифмическую скорость сходимости. Предложен практически неулучшаемый набор шагов для счета на установление, представлены априорные оценки сходимости и апостериорные оценки погрешности.

Четвертая глава посвящена исследованию сингулярно возмущенных краевых задач для уравнений типа Гельмгольца. Предложено введение адаптивной квазиравномерной сетки, которая позволяет находить решение с высокой точностью при небольшом числе узлов.

В пятой главе представлен метод для широкодиапазонной аппроксимации экспериментальных результатов. Он необходим для получения данных для алгоритмов из второй главы. Обосновывается необходимость такой работы, подробно описывается сам метод, приводится таблица для скоростей реакций.

В шестой главе приведено описание пакетов KINETIC, SIDIAG, SUFAREC, представлены их листинги и контрольные проверочные тесты.

В заключении сформулированы основные результаты диссертации.

Следует отметить, что структура диссертации отражает заявленные цели работы, а её содержание полностью соответствует специальности 05.13.18 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»: в работе представлены и обоснованы новые численные методы (главы 2, 3, 4, 5), с их использованием проведено моделирование достаточно конкретной задачи, относящейся к теории управляемого термоядерного синтеза (главы 2 и 5), при этом разработаны новые комплексы программ (глава 6).

Замечания по диссертационной работе

Приведенные ниже замечания носят рекомендательный характер, не меняют значимости и никак не влияют на положительную оценку качества работы Белова А.А., выполненной на высоком научном уровне.

1) Структура диссертации представляется не самой оптимальной. Глава 2, на мой взгляд, перегружена результатами (задачи кинетики, соответствующие расчеты по «химическим» схемам плюс изложение метода диагностики особенностей, который, как мне кажется, заслуживает отдельной главы). В то же время материал главы 4 представлен очень кратко, причем для исследования используются методы главы 3. Не стоило ли объединить эти главы?

2) Как мне кажется, названия глав выбраны не совсем удачно. В главе под названием «Уравнение Пуассона» речь с самого начала идет о *любом* уравнении эллиптического типа, вообще говоря, с переменными коэффициентами, допускающем расщепление по направлениям. В главе «Диффузия в пограничных слоях» основной объект исследования – *эллиптическое* уравнение с пограничным слоем. Стоило бы указать, какое отношение это имеет непосредственно к диффузии – или изменить название главы.

3) Представлялось бы правильным, если бы автор более четко указал, какое отношение к жестким задачам имеет материал главы 3 «Уравнение Пуассона» (насколько я понимаю, жесткость здесь имеется в задаче счета на установление, но хотелось бы, чтобы это было сформулировано более конкретно).

4) Метод локализации особенностей, представляющий на мой взгляд, значительный интерес, проиллюстрирован на нескольких примерах, все из которых, к сожалению, являются модельными. Почему бы, например, не провести соответствующий расчет для уравнения, для которого ответ неизвестен (например, заменив в уравнении (2.53) кубичную нелинейность на квадратичную) и сделать предположение о типах особенностей, которые в этом случае должны возникать? Замечу, что еще один круг задач, относящихся к этой тематике, и представляющий значительный интерес связан с описанием коллапса для уравнений типа нелинейного уравнения Шредингера.

5) Для расчета таблиц в главе 5, автор использует формулы Эйлера-Маклорена, при этом коэффициенты этих формул автором строятся рекуррентно. Между тем имеется общее выражение для этих коэффициентов, использующее числа Бернулли, см. напр. «Справочник по специальным функциям», под ред. М.Абрамовица и И. Стиган, Наука, 1979, формулы 23.1.30 – 23.1.31. На мой взгляд, использование этих выражений могло бы существенно упростить рассуждения.

6) Заключение диссертации формально повторяет основные выводы, выносимые на защиту. Вместе с тем, как мне кажется, здесь было бы уместно не только подвести итоги работы, но и наметить некоторые нерешенные задачи, а также перспективы дальнейших исследований.

Заключение

Диссертация Белова А.А. «Экономичные методы расчета жестких задач в моделях кинетики, теплопроводности, диффузии» является законченным научным исследованием. Она посвящена актуальным вопросам

математического моделирования, численных методов и связанных с ними комплексов программ, выполнена на высоком научном уровне. Научная новизна основных результатов значительная. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Автореферат правильно отражает содержание диссертации. Рецензируемая диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям. Ее автор, **Белов Александр Александрович**, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент,
доктор физ.-мат. наук,
профессор кафедры ВМ-1
Национального исследовательского
университета «МИЭТ»



Г. Л. Алфимов

124498, г. Москва, г. Зеленоград, площадь Шокина, дом 1;
тел +7(916) 947 10 01
e-mail: galfimov@yahoo.com

Подпись Г. Л. Алфимова удостоверяю

Ученый секретарь НИУ «МИЭТ»
кандидат техн. наук, профессор

03.05.2017



Н. М. Ларионов