

Отзыв официального оппонента

на диссертационную работу «Конечно-разностные и спектрально-Галеркинские методы в моделях, описываемых дробными уравнениями в частных производных с запаздыванием» (автор – Ибрахим Абделрахим Кхалифа Омран), представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2. – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертационная работа Ибрахима Абделрахима Кхалифы Омрана посвящена разработке, обоснованию и алгоритмизации численных методов, предназначенных для программной реализации нелинейных дробно-дифференциальных математических моделей с запаздыванием, имеющих важные приложения в исследовании сложных биохимических процессов.

Актуальность темы диссертационного исследования

В числе широкого ряда моделей систем реакционно-диффузионного типа особую роль в биологии играют модели, позволяющие описывать периодические в пространстве и стационарные во времени диссипативные структуры на основе вычисления распределений концентраций ключевых химических субстанций. На протяжении длительного времени в фокусе внимания ученых были общие условия диффузионной неустойчивости, анализ возникновения и эволюции паттернов, Тьюринговы механизмы формирования нелинейных динамических структур, возникающих вследствие волновых свойств реакционно-диффузионных систем, и т.п. В частности, одной из простейших систем этого класса является идеализированная система Шнакенберга, позволяющая формализовать пространственно-временное распределение концентраций двух биохимических веществ, которые являются активатором и субстратом.

Поскольку биохимические реакционно-диффузионные процессы относятся к классу трудноформализуемых систем с нелинейной динамикой, протекающей в сложно-структурированных средах, модификация базовых математических моделей, описывающих процессы на основе учета свойств нелокальности – запаздывания и эффекта памяти, обладает существенным научным потенциалом.

В настоящее время, одним из основных подходов, используемых для формализации эффектов памяти, является введение в математическую постановку производных дробного порядка, нелокальных по своему определению. Так как построение аналитических решений для дифференциальных уравнений, включающих запаздывание и/или дробные производные, встречает серьезные затруднения, в современной научной практике на первый план выдвигается методологии приближенных методов.

Объектом исследования в диссертационной работе является достаточно сложный класс задач, применяющихся для моделирования пространственно-временных состояний биохимических систем с учетом введения запаздывания и операторов дробного дифференцирования. Указанное направление исследований, связанное с развитием и обоснованием методов математического моделирования дробно-дифференциальных

динамических систем с запаздыванием, несомненно, представляется актуальным.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций сформулированных в диссертации, их достоверность

В тексте диссертации представлен глубокий анализ результатов предшествующих исследований, включающий постановки задач моделирования, результаты исследования разработанных алгоритмов и вычислительных схем (в частности, методология гибридизации конечно-разностного подхода и спектрального метода Лежандра-Галеркина для решения нелинейных дробно-дифференциальных задач), средства программных реализаций. Автором проведено корректное позиционирование собственных результатов в общей системе научных знаний, сложившейся в данной предметной области. Обоснованность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации Ибрахима Абделрахима Кхалифы Омрана, подтверждается следующим.

Непротиворечивость и достоверность научных результатов автора гарантируется применением апробированных численных методов для решения уравнений в частных производных, проведением строгих математических доказательств, а также положительными результатами верификации численных решений на основе сравнения с аналитическими решениями для тестовых задач.

Основное содержание диссертации достаточно полно отражено в 4 научных публикациях автора, опубликованных в профильных изданиях, цитируемых международными базами Web of Science и Scopus, соответствующих научной специальности 1.2.2. – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Диссертационная работа прошла апробацию на научных семинарах профильной кафедры и научных конференциях.

Научная новизна проведенных исследований и полученных результатов

Можно отметить ряд важных результатов, полученных соискателем. Существенно, что новые результаты присутствуют в научных областях: математическое моделирование, численные методы, комплексы программ, соответствующих паспорту научной специальности 1.2.2. – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Автором разработан и обоснован численный метод решения нелинейного уравнения реакции-диффузии с дробной производной Рисса по пространству Рисса и с дробной производной Капуто по времени с постоянным запаздыванием, проведено доказательство устойчивости разработанного метода, определен порядок его сходимости. И.А.К. Омраном разработан и обоснован численный метод решения обобщенных нелинейных многочленных дробных по времени и пространству уравнений реакции-диффузии с запаздыванием, проведено доказательство устойчивости и получен порядок сходимости. Разработан и обоснован численный алгоритм решения для реализации дробно-дифференциальной модификации модели Шнакенберга с запаздыванием. В области разработки программ соискатель разработал прикладные программы, реализующие разработанные вычислительные алгоритмы.

Значимость результатов для науки и практики

Теоретическая значимость результатов диссертации Ибрахима Абделрахима Кхалифа Омрана состоит в разработке и обосновании подхода (фундаментального базиса) к численному решению целого класса начально-граничных задач для дробно-дифференциальных уравнений с запаздыванием.

Практическая значимость работы заключается в потенциально возможном применении разработанного аппарата для исследования на основе вычислительных экспериментов реакционно-диффузионных процессов и явлений иной природы, например, в физике твердого тела (для описания характеристик состояния «ферроиков» – сегнетоэлектриков, ферромагнетиков и мультиферроиков).

Общая оценка диссертационной работы

Диссертационная работа Ибрахима Абделрахима Кхалифа Омрана характеризуется высокой степенью проработки теоретического материала, логичностью и последовательностью изложения аспектов доказательств, высоким качеством представления научного контента в целом.

Особого внимания заслуживает научный результат – теоретическое обоснование и алгоритмическая реализация комбинированного подхода: конечно-разностного метода и спектрально-Галеркинського метода реализации дробно-дифференциальной модели Шнакенберга, формализуемой с помощью достаточно сложного дробно-дифференциального уравнения, включающего запаздывание.

Диссертация оформлена в соответствии с современными требованиями, результаты изложены системно, структурированность глав соответствует логике сформулированных задач. Текст работы оформлен в соответствии с действующими стандартами, написан грамотно, с использованием общепринятой математической символики и системы обозначений.

При детальном рассмотрении, по содержанию и оформлению диссертационной работы можно сделать следующие замечания.

Общие замечания и вопросы по диссертационной работе

1. В главе 1 разработан и теоретически исследован гибридный численный метод для решения нелинейных дробно-дифференциальных уравнений с частными производными реакционно-диффузионного типа с запаздыванием (как комбинация L1 конечно-разностной схемы в части аппроксимации дробной производной по времени и спектрального метода Лежандра-Галеркина в части аппроксимации по пространству). Однако автор рассматривает не общий класс задач, а только задачи с краевыми условиями I рода (что для естественных систем с протекающими биохимическими процессами может оказаться весьма специфичным случаем) и для определенных диапазонов изменения порядков дробного дифференцирования ($0 < \beta < 1$, $1 < \alpha < 2$). При формулировке результатов необходимо было указать границы применимости предлагаемой методологии, поскольку решение уравнений аналогичного вида с краевыми условиями Неймана или Робена, а также попытка применения численного метода в случае обобщенного уравнения

аномальной диффузии приведет к необходимости существенной модификации вычислительной схемы.

2. В главе 1 приведен только один пример в качестве теста, соотнесенного с программной реализацией метода и демонстрацией его эффективности. В этом примере (текст диссертации, стр. 46–47) не указаны краевые условия, предыстория процесса и вид функции $g(x,t)$. Хотя ясно, что $g(x,t)$ может иметь громоздкий вид для тестовой задачи с известным аналитическим решением, но аналитическое решение задачи с запаздыванием оказывается не зависимым от параметра запаздывания, поэтому лучше $g(x,t)$ было бы указать в явном виде.

Автор избегает и графической визуализации самого решения. В прикладном математическом смысле читателю, конечно, представляет интерес график решений при вариации порядков дробного дифференцирования по времени и координате, а также в зависимость решения от вида нелинейного слагаемого в правой части.

3. В главе 2 автор дает обобщение методологии, описанной в главе 1, на случай присутствия нескольких членов, ассоциированных с производными дробного порядка по времени. При этом в практической части этой главы можно отметить замечание, аналогичное п. 2 – при формулировке «задачи» (и на англ. “the problem”, стр. 61) автор выписывает только уравнение без указания краевых условий и предыстории. Здесь также сделан акцент только на демонстрации точности метода. В численном примере требуется комментарий относительно «малости окна наблюдения процесса», так как выбран параметр запаздывания $t^*=1.5$ при интервале времени наблюдения $[0,1]$.

4. Если рассматривать задачу (40) (в автореферате, стр. 15 или задачу (3.36), в диссертации, стр. 82) как задачу прикладного математического моделирования (а не абстрактную задачу рассматриваемого класса), то, конечно, требуется ввести размерные или нормированные параметры модели – множители, которые обеспечат выполнение контроля размерностей математической модели (альтернативно – ввести безразмерные характеристики системы). Изначально функции с буквенными обозначениями Φ_1 , Φ_2 введены как концентрации химических субстанций и в исходной системе присутствуют коэффициенты связи масштабов времени и координаты – коэффициенты диффузии k_1 , k_2 (система (33) в автореферате или система (3.3) в диссертации). Далее при тех же буквенных обозначениях всем коэффициентам установлены единичные значения (часто в приложениях как раз коэффициент диффузии для двух субстанций значительно отличается). В тексте нет ремарки относительно того, что при определенной комбинации параметров решение может оказаться в области неустойчивости Тьюринга.

В этом же вычислительном эксперименте не очевиден смысл выражения «поведение автокатализатора и реагента под действием функций Φ_1 , Φ_2 ...» – очевидно, что в модели Шнакенберга одна функция задает активатор, а другая – некий субстрат. Вывод об адекватности применения дробно-дифференциальной модели по сравнению с целочисленной здесь представляется преждевременным, поскольку сделан он на том основании, что автор отмечает зависимость «гладкости формы решения» от порядка дробного дифференцирования. Последнее может говорить только об обобщении подхода

на основе дробно-дифференциальной модификации (на примере абстрактной задачи, в которой нет согласованных по порядкам измерений параметров).

5. Отмечая достойный уровень подготовленного соискателем текста автореферата на русском языке, тем не менее, можно отметить замечание методического плана при формулировке цели работы. «Диссертация направлена на разработку и обоснование численных методов **решения** нелинейных дробных **моделей** с запаздыванием» – «решение» относится больше к «задачам» и «уравнениям», а к математическим моделям корректнее в данном контексте отнести формализацию, алгоритмическую и программную реализацию. Следует отметить, что англоязычный вариант этой части текста в диссертации изложен вполне корректно.

6. Текст практически лишен недостатков в части оформления. Можно отметить только отдельные неточности. В публикациях автора в названии первой статьи собственные имена написаны со строчных букв. В автореферате встречается повтор слов: «Другое возможное исследование дальнейших исследований ...». Графическая визуализация на стр. 47, 62 смотрится несколько грубо: шрифт не совпадает со шрифтом основного текста, выбран очень крупный размер маркеров кривых. Не очень удачная идея представить две пространственно-временные динамики на одном графике (стр. 16, автореферат или стр. 83, диссертация), визуализация была бы нагляднее с представлением значений в виде проекций на плоскость (*xot*) и размещением рядом шкалы ColorBar. Есть опечатки «первая ряда» и т.п. на стр. 17 автореферата (1 абзац сверху).

Сделанные замечания не влияют на очевидный научный потенциал и общую высокую оценку научных результатов диссертационной работы.

Заключение

В целом можно заключить, что диссертация Ибрахима Абделрахима Кхалифа Омрана «Конечно-разностные и спектрально-Галеркинские методы в моделях, описываемых дробными уравнениями в частных производных с запаздыванием» представляет собой научно-квалификационную работу, в которой содержится решение научной задачи, имеющей существенное значение для развития теории численного моделирования сложных реакционно-диффузионных систем.

Диссертационная работа Ибрахима Абделрахима Кхалифа Омрана выполнена на актуальную тему, носит завершённый характер и при этом имеет дальнейшие перспективы развития. Тематика и результаты выполненных научных исследований соответствуют паспорту специальности 1.2.2. – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (физико-математические науки). Полученные автором результаты являются новыми, обоснованными, достоверными и имеют существенное теоретическое и практическое значение. В автореферате и публикациях соискателя в полной мере отражены содержание диссертации, а также наиболее существенные положения, выводы и рекомендации.

Таким образом, представленная диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям п.9 Положения о присуждении ученых степеней в Уральском федеральном университете им. Первого президента России Б.Н. Ельцина, а ее автор, Ибрахим Абделрахим Кхалифа Омран, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2. – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент

3/1

Масловская Анна Геннадьевна

«13» марта 2023 г.

Масловская Анна Геннадьевна, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры «Математический анализ и моделирование».

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Амурский государственный университет».

675027, Амурская область, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21, каб. 338.

Тел. сот.: 8963-816-84-19. E-mail: maslovskayaag@mail.ru

«13» марта 2023 г.

Подпись Масловской А.Г. заверяю:

