

На правах рукописи



**Белов Александр Александрович**

**Экономичные методы расчета жестких задач  
в моделях кинетики, теплопроводности, диффузии**

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва — 2017

Работа выполнена на Кафедре математики Физического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова

Научный руководитель: **Калиткин Николай Николаевич**,  
член-корреспондент РАН,  
доктор физико-математических наук, профессор.

Официальные оппоненты: **Алфимов Георгий Леонидович**,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
кафедра «Высшая математика №1»,  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский университет «МИЭТ».

**Буслаев Александр Павлович**,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
заведующий кафедрой «Высшая математика»,  
Московский автомобильно-дорожный государственный технический университет (МАДИ).

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)», кафедра информатики и вычислительной математики.

Защита состоится «25» мая 2017 г. в \_\_\_\_\_ часов на заседании диссертационного совета Д 002.024.003 на базе Института прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН по адресу: 125047, Москва, Миусская площадь д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН и на сайте <http://www.keldysh.ru/>.

Автореферат разослан « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2017 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
Д 002.024.03, к.ф.-м.н.



Корнилина М. А.

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы исследования.** В настоящее время чрезвычайно актуальной является проблема поиска новых источников энергии и повышения эффективности имеющихся. Пути ее решения являются оптимизация процессов горения с точки зрения энерговыхода и осуществление управляемого термоядерного синтеза (УТС). Для решения этих проблем требуются надежные численные методы, позволяющие проводить расчеты с высокой гарантированной точностью (не хуже 0.1%). Для моделирования процессов в мишенях УТС требуются достоверные данные о скоростях реакций.

Другой важной проблемой является расчет электродинамических конструкций, в которых поле лишь незначительно проникает внутрь проводника. Примерами таких процессов являются диффузия магнитного поля в сжимающую оболочку магнитокумулятивных генераторов сверхмощных магнитных полей и сверхсильных токов, поверхностный индукционный нагрев при закалке стальных деталей, поверхностное легирование полупроводников донорами и акцепторами и многие другие. Все указанные задачи являются актуальными для современной науки и техники. Их необходимо рассчитывать экономично и с высокой точностью.

**Степень разработанности темы исследования.** Важной проблемой является расчет кинетики реакций. Скорости разных химических и ядерных реакций могут отличаться друг от друга на много порядков и быстро растут с увеличением температуры. Поэтому данная задача является жесткой. Традиционно для ее численного моделирования используются неявные схемы, которые при больших системах реакций оказываются неприемлемо трудоемкими и требуют 128-битовых вычислений. Н. Н. Калиткин и В. Я. Гольдин<sup>1</sup> предложили специальную явную схему, однако она имеет лишь первый порядок точности. Попытки его повысить оказались неудачными.

Важным приложением для методов расчета кинетики является протекание термоядерных реакций в мишенях лазерного синтеза и токамаках. Здесь возникает вспомогательная проблема: требуются достоверные данные о скоростях этих реакций (эта проблема имеет также большое самостоятельное значение). Скорости термоядерных реакций определяются по экспериментально измеренным сечениям. Такие эксперименты чрезвычайно сложны и дают очень большие погрешности. Обработка таких данных является трудной проблемой. Существующие методы хорошо работают в тех условиях,

---

<sup>1</sup>Гольдин В. Я., Калиткин Н. Н. Нахождение знакопостоянных решений обыкновенных дифференциальных уравнений // ЖВМиМФ. 1966. Т. 6, № 1. С. 162-163.

когда теоретическая физика уверенно предсказывает качественный характер искомой зависимости. Однако для сечений термоядерных реакций таких формул пока не предложено, известные формулы Гамова и Брейта-Вигнера применимы лишь в ограниченных диапазонах энергий. В связи с этим хорошие методы аппроксимации отсутствуют.

В расчетах горения в мишенях термоядерного синтеза и при исследовании пробоя в плазме и полупроводниках важную роль играет анализ сингулярностей решений нелинейных уравнений в частных производных. Обычно разрушение решений исследуют аналитически. Однако получить конструктивный ответ удается не всегда. Е. А. Альшина, Н. Н. Калиткин и П. В. Корякин<sup>2</sup> впервые предложили метод численной диагностики, не использующий аналитического исследования. Однако процедура сложна, недостаточно надежна и дает лишь ориентировочные значения параметров сингулярности без оценок их погрешности. Это делает метод работоспособным лишь в руках высококвалифицированного вычислителя.

Для решения эллиптических уравнений без смешанных производных в прямоугольных областях в работах Н. Н. Калиткина, А. А. Болтнева и О. А. Качер<sup>3</sup> был предложен сверхбыстрый логарифмический счет на установление. Он имеет экспоненциальную скорость сходимости, что значительно быстрее общих методов. Однако оставался открытым вопрос о выборе наилучшего набора шагов и об оценках погрешности итераций.

Для моделирования сингулярно возмущенных краевых задач в прямоугольных областях Н. С. Бахвалов<sup>4</sup> и Г. И. Шишкин<sup>5</sup> предлагали сетки, адаптированные к пограничным слоям. Однако эти сетки оказались далеки от оптимальных. Для разностных схем на них строят априорные оценки сходимости<sup>6</sup>. Однако они являются мажорантными и неудобны на практике.

### Цели и задачи. Целями данной работы являются

1. Разработка технологий моделирования кинетики реакций с гарантированной точностью  $0.1 \div 0.01\%$ . Проведение моделирования кинетики термоядерных реакций.

---

<sup>2</sup>Альшина Е. А., Калиткин Н. Н., Корякин П. В. Диагностика особенностей точного решения методом сгущения сеток // ДАН. 2005. Т. 404, № 3. С. 295-299.

<sup>3</sup>Болтнев А. А., Калиткин Н. Н., Качер О. А. Логарифмически сходящийся счет на установление // ДАН. 2005. Т. 404, № 2. С. 177-180.

<sup>4</sup>Бахвалов Н. С. К оптимизации методов решения краевых задач при наличии пограничного слоя // ЖВМиМФ. 1969. Т. 9, № 4. С. 841-859.

<sup>5</sup>Шишкин Г. И. Аппроксимация решений сингулярно возмущенных краевых задач с угловым пограничным слоем // ЖВМиМФ. 1987. Т. 27, № 9. С. 1360-1372.

<sup>6</sup>см., например, Ершова Т. Я. О решении задачи Дирихле для сингулярно возмущенного уравнения реакции-диффузии в квадрате на сетке Бахвалова // Вестн. Моск. Ун-та. Вычисл. матем. и киберн. 2009. № 4. С. 7-14., Андреев В. Б. О точности сеточных аппроксимаций негладких решений сингулярно возмущенного уравнения реакции-диффузии в квадрате // Дифференц. уравн. 2009. Т. 42, № 7. С. 895-906.

2. Нахождение скоростей термоядерных реакций с точностью несколько процентов.
3. Разработка надежных методов диагностики сингулярностей с гарантированной точностью для систем ОДУ.
4. Разработка экономичных методов решения эллиптических уравнений (в том числе сингулярно возмущенных) для достаточно широкого класса многомерных задач (переменные коэффициенты, неравномерные прямоугольные сетки).

**Научная новизна.** В диссертации впервые предложены и обоснованы следующие новые результаты.

С использованием предложенных технологий обработки экспериментов для 4 термоядерных реакций, наиболее важных для управляемого синтеза в газовых мишенях, найдены аппроксимации сечений и скоростей реакций. Погрешность аппроксимаций для сечений не превышает 1%, а для скоростей реакций составляет 1÷4%, что в 5 раз точнее использовавшихся ранее. Это существенно для моделирования процессов в термоядерных мишенях.

Проведено моделирование кинетики этих реакций, и оценены условия, необходимые для возникновения самоподдерживающегося горения. Показано, что критерий Лоусона следует увеличить на 3 порядка.

Разработана специализированная экономичная технология моделирования кинетики реакций. Одновременно с решением она предоставляет гарантированную оценку его математической погрешности. В ней используется явная численная схема, трудоемкость которой очень мала. Эта схема имеет более высокий порядок точности (второй) и одновременно является более надежной, чем ранее известные схемы.

Разработана технология обработки экспериментальных данных с нахождением дисперсии аппроксимирующей кривой. Задача рассматривается как некорректная. Решение представляется методом двойного периода, для регуляризации используется стабилизатор А. Н. Тихонова с квадратом второй производной. Это позволяет подавить нефизичные осцилляции и получать высокую точность, хорошо передавая форму экспериментальной кривой. Такой подход позволяет единообразно решать широкие классы задач.

Предложен простой и надежный метод диагностики сингулярностей (полюс, логарифмический полюс, смешанная особенность) для систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Он позволяет вычислять параметры этих особенностей с апостериорной асимптотически точной оценкой погрешности. Метод работает при аргументе “длина дуги”, который оптимален при моделировании таких задач. Метод позволяет исследовать модели, описываемые нелинейными уравнениями в частных производных, поскольку

они сводятся методом прямых к системам ОДУ огромного порядка. С использованием этого метода исследована модель S-режима нелинейного горения.

Для моделирования процессов, описываемых эллиптическими уравнениями, предложен новый линейно-тригонометрический набор шагов для счета на установление. Коэффициенты уравнения могут быть переменными, а прямоугольные сетки – неравномерными. Набор строится в логарифмической шкале и дает экспоненциальную скорость сходимости, что является теоретическим пределом. Предложенный набор уменьшает число итераций в 1.5 раза по сравнению с логарифмически равномерным. Он более прост и надежен, чем известные ранее наборы. Разработана процедура упорядочивания шагов логарифмического набора, аналогичная методу Ричардсона и позволяющая найти апостериорные асимптотически точное значение погрешности итераций. Ранее существовали только мажорантные оценки точности по невязке, отличающиеся от точных на несколько порядков.

Для моделирования процессов диффузии в пограничных слоях, описываемых сингулярно возмущенным уравнением Гельмгольца в прямоугольной области, предложена адаптивная квазиравномерная сетка, обеспечивающая высокую точность даже при очень тонких пограничных слоях ( $\sim 10^{-7}$  от размеров области) уже на скромных сетках с небольшим числом узлов (до 500 по каждому направлению). Она позволяет находить апостериорную асимптотически точную оценку погрешности по методу Ричардсона и устанавливать порядок фактической точности. Это существенно экономичнее, чем использование мажорантных априорных оценок.

На основе предложенных методов впервые разработаны 3 пакета программ на языке Matlab (Kinetic для расчета кинетики реакций, SiDiaG для диагностики сингулярностей у систем ОДУ, SuFaReC для решения задачи Дирихле для обобщенного уравнения Гельмгольца). Все расчеты проводятся одновременно с нахождением апостериорного асимптотически точного значения погрешности. Эффективность пакетов подтверждена большим количеством численных экспериментов, которые позволили верифицировать работу соответствующих вычислительных технологий (численных методов и их программных реализаций). Пакет SiDiaG является первым математическим обеспечением, позволяющим численно диагностировать разрушение решения систем ОДУ. Ранее программ с такой функциональностью не предлагалось.

Таким образом, перечисленные задачи рассмотрены на всех уровнях: проведено моделирование реальных задач и получены физически значимые результаты, построены качественно новые численные методы, разработаны комплексы актуальных прикладных программ.

**Теоретическая и практическая значимость работы.** Полученные в работе аппроксимации для сечений и скоростей термоядерных реакций

значительно точнее известных ранее. Это существенно для моделирования процессов в мишенях управляемого синтеза. Предложенные математические методы качественно превосходят по точности, надежности и эффективности ранее известные алгоритмы и представляют интерес для широкого круга исследователей. Разработанные пакеты программ должны найти широкое применение для исследовательских расчетов, а также как прототипы программных комплексов для производственных расчетов. Ниже перечислены организации, для которых будут полезны результаты, полученные в данной работе.

Новые численные методы для задач кинетики должны найти широкое применение как часть больших газодинамических пакетов программ для расчетов химической кинетики, проводимых в Институте проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, на Физическом и Химическом факультетах МГУ им. М. В. Ломоносова, в Институте прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН и в других организациях.

Вместе с новыми выражениями для скоростей термоядерных реакций они будут исключительно полезны в расчетах мишеней для УТС, проводимых в федеральных ядерных центрах (Саров и Снежинск), ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, Физическом институте академии наук им. П. Н. Лебедева, Объединенном институте ядерных исследований, Национальном исследовательском центре “Курчатовский институт” и других.

Методы диагностики полюсов и других особенностей должны стать надежным инструментом для исследования сингулярностей, проводимых на кафедре математики Физического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова, в Математическом институте академии наук им. В. А. Стеклова, в Московском институте электронной техники и в других организациях.

Построенные методы расчета и апостериорного теоретического анализа для сингулярно возмущенных краевых задач следует рассматривать как стандартные вычислительные технологии, которые должны стать обязательными для прикладных расчетов, проводимых в широком круге организаций: соответствующие факультеты МГУ (Физический, Факультет вычислительной математики и кибернетики) и других университетов, Институте математического моделирования Уральского отделения РАН, Вычислительном центре РАН, ИПМ им. М. В. Келдыша РАН и др.

**Методология и методы исследования.** При разработке математических алгоритмов использовались традиционные методы вычислительной математики. Применялись как формальный, так и эвристический подходы. Последний позволил создать эффективные алгоритмы в тех областях, где формальное исследование проблематично.

Большое внимание уделялось обоснованию сходимости методом сгущения сеток и построению фактических оценок погрешности. Работа всех

алгоритмов проверялась на представительных тестовых задачах, поэтому их построение также было важным аспектом.

При разработке прикладных пакетов был использован язык высокого уровня Matlab, совместимый со свободно распространяемой средой для математических вычислений GNU Octave. Она позволяет легко визуализировать результаты расчетов.

### Положения, выносимые на защиту:

1. Разработаны и реализованы экономичные численные алгоритмы решения задач кинетики, диффузии и эффективный метод численного обнаружения и диагностики сингулярностей в ОДУ, работающий в автоматическом режиме. Разработан и успешно применен метод обработки экспериментальных данных с нахождением дисперсии аппроксимирующей кривой.
2. Разработан простой итерационный метод решения многомерных эллиптических уравнений с логарифмической сходимостью, что является теоретическим пределом. Одновременно с решением метод вычисляет асимптотически точную оценку погрешности. Метод позволяет эффективно решать сингулярно возмущенные уравнения.
3. Создано три пакета прикладных программ для решения указанных выше задач. Эффективность пакетов подтверждена численными экспериментами.
4. Разработаны новые математические методы моделирования основных ядерных реакций синтеза изотопов водорода, получены наиболее точные на настоящий момент аппроксимации сечений и скоростей реакций.

Степень достоверности. Достоверность и надежность разработанных математических методов гарантируется их проверкой на представительных тестовых задачах с известным точным решением, а также расчетами на сгущающихся сетках с апостериорной оценкой погрешности по методу Ричардсона и контролем фактического порядка точности. В ходе таких расчетов проверяется сходимость сеточного решения к некоторой предельной функции. Согласно известным фундаментальным теоремам Рябенко-Филлипова, эта предельная функция является точным решением. Это обеспечивает математическую точность на уровне ошибок округления компьютера.

Надежность обработки экспериментальных данных следует из большого объема анализируемого материала, а также из физически осмысленного поведения аппроксимирующей кривой. Вычисленные оценки точности аппроксимаций для сечений контролируются по соответствию известным физическим закономерностям (например, формула Гамова). Они подтвержде-



ны наиболее надежными экспериментальными данными, измеренными с наибольшей точностью.

**Личный вклад автора.** Все результаты диссертации, выносимые на защиту, получены соискателем лично. В том числе, соискатель самостоятельно предложил и разработал метод обнаружения и диагностики сингулярностей у систем ОДУ, провел исследование квадратурных формул Эйлера-Маклорена произвольных порядков точности, а также разработал 3 пакета прикладных программ и провел все расчеты. Научный руководитель Н. Н. Калиткин определял общее направление работ, первоначальные постановки задач, предложил идеи ряда методик и алгоритмов и участвовал в обсуждении результатов.

**Апробация результатов.** Результаты работы докладывались на международной конференции “XVII Харитоновские тематические научные чтения” (Саров, 23-27 марта 2015), научно-координационной сессии “Исследования неидеальной плазмы” (Москва, 27-28 ноября 2015), международной конференции “Современные проблемы математической физики и вычислительной математики” к 110-летию со дня рождения академика А. Н. Тихонова (Москва, 31 октября – 3 ноября 2016), на международной конференции “Современные проблемы вычислительной математики и математической физики” памяти академика А.А. Самарского к 95-летию со дня рождения (Москва, 16-17 июня 2014), на международной конференции “13th Annual Workshop on Numerical Methods for Problems with Layer Phenomena” (Москва, 6-9 апреля 2016), на международной конференции “Days on Diffraction 2015” (Санкт-Петербург, 25-29 мая 2015), на VII и VIII международной конференции “Акустооптические и радиолокационные методы измерений и обработки информации” (Суздаль, 14-17 сентября 2014 и 20-23 сентября 2015), на международном научном семинаре “Актуальные проблемы математической физики” (Москва, 28-29 ноября 2014), на XV Всероссийской школе-семинаре “Физика и применение микроволн” имени профессора А.П. Сухорукова (Москва, Можайск, 1-6 июня 2015), на научной конференции “Ломоносовские чтения” (Москва, 18-27 апреля 2016), на научной конференции “Тихоновские чтения” (Москва, 27-31 октября 2014), на семинарах Кафедры математики Физического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова (21 декабря 2016, 2 марта 2016, 2 октября 2013) и на семинаре Кафедры вычислительной математики Факультета ВМК (11 декабря 2013).

**Публикации.** По теме диссертации всего опубликовано 13 работ в журналах из перечня ВАК: Доклады академии наук – 3, Математическое моделирование – 6, Журнал вычислительной математики и математической физики – 1, Известия РАН. Серия физическая – 1, Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша – 2.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Полный объем диссертации 159 страниц текста с 58 рисунками и 7 таблицами. Список литературы содержит 57 наименований.

## Содержание работы

**Глава 1. Введение.** Приводится краткая характеристика работы, включая обоснование актуальности, цель работы, научную новизну и практическую значимость, обоснование достоверности результатов и положения, выносимые на защиту.

В работе рассматриваются следующие жесткие задачи:  $1^{\circ}$  кинетика реакций,  $2^{\circ}$  диагностика сингулярностей,  $3^{\circ}$  жесткие краевые задачи (уравнения Пуассона и Гельмгольца). Важным приложением для методов расчета кинетики являются термоядерные реакции в газовых мишенях. Поэтому в диссертации рассматривается важная вспомогательная проблема –  $4^{\circ}$  получение достоверных данных о скоростях этих реакций.

**Глава 2. Нестационарные жесткие задачи.** В данной главе разработан новый метод расчета задач кинетики и проведено моделирование реальной кинетики 4 термоядерных реакций. Построен новый метод численной диагностики сингулярностей систем ОДУ и применен к исследованию модели S-режима нелинейного горения.

**Задача кинетики** представляет собой систему ОДУ с полиномиальными правыми частями (квадратичными для двухчастичных реакций и кубическими для трехчастичных). Ее вид позволяет построить специализированный метод. Эта задача может быть записана в следующем виде:

$$dn_j/dt = f_j(\mathbf{n}), \quad f_j(\mathbf{n}) = -n_j\varphi_j(\mathbf{n}) + \psi_j(\mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \{n_j, 1 \leq j \leq J\}, \quad (1)$$

причем  $n_j \geq 0$ ,  $\varphi_j(\mathbf{n}) \geq 0$ ,  $\psi_j(\mathbf{n}) \geq 0$ . Существенно то, что концентрация  $n_j$  входит в  $j$ -ю отрицательную правую часть как сомножитель. Для задачи (1) Калиткин и Гольдин предложили 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 второго порядка точности, имеющая более высокую надежность. Приведем ее. Напишем неявную схему

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

Будем находить решение алгебраической системы простыми итерациями

$$\hat{n}_j^{s+1} = \frac{n_j + \tau\psi_j(\bar{\mathbf{n}}^s)(1 + \tau\varphi_j(\bar{\mathbf{n}}^s)/2)}{1 + \tau\varphi_j(\bar{\mathbf{n}}^s) + (\tau\varphi_j(\bar{\mathbf{n}}^s))^2/2}, \quad \bar{\mathbf{n}}^s = (\mathbf{n} + \hat{\mathbf{n}}^s)/2, \quad \hat{\mathbf{n}}^0 = \mathbf{n}. \quad (3)$$

При этом выполним только две итерации, то есть по существу получим явную схему. Увеличение  $\psi_j$  приводит к увеличению  $\hat{n}_j$ , а увеличение  $\varphi_j$  – к уменьшению  $\hat{u}_j$ , что соответствует физическому смыслу этих слагаемых. Схему Калиткина-Гольдина и схему (3) будем называть *химическими схемами* (одностадийной и двухстадийной соответственно). В задаче (1) можно ввести параметризацию через длину дуги интегральной кривой. Это уменьшает величину погрешности и повышает надежность расчетов.

**Моделирование термоядерного горения.** С использованием предложенной химической схемы (3) было проведено моделирование реальной кинетики 4 термоядерных реакций с участием D, T,  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $p$ ,  $n$ . Температура среды меняется за счет энерговыхода реакций: быстрый нейтрон покидает систему, остальная энергия остается внутри. Газодинамический разлет и потери энергии на излучение не учитываются. Такая постановка очень грубая и позволяет рассчитать только начальную стадию горения. Однако эта задача предъявляет высокие требования к численным методам.

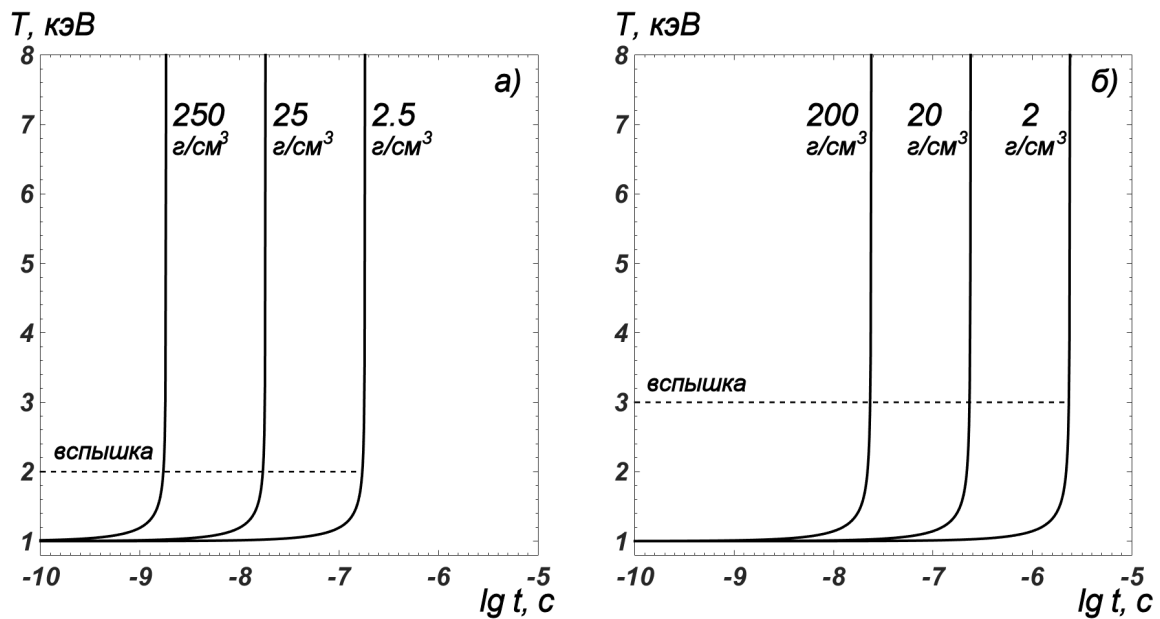


Рис. 1: Профили температуры; а) DT-мишень, б) DD-мишень; плотности указаны около кривых.

Расчет проводился для дейтериево-тритиевой мишени при плотностях замороженного газа  $\rho = 2.5, 25$  и  $250 \text{ г/см}^3$  и для чисто дейтериевой мишени при  $\rho = 2, 20$  и  $200 \text{ г/см}^3$ . Начальная температура равнялась  $T_0 = 1 \text{ кэВ}$ . Если взять меньшее значение  $T_0$ , то расчетные кривые практически повторяют те кривые, которые получаются при этих условиях (но это будет соответствовать более поздним моментам времени). Поэтому расчеты представительны.

На рис. 1 приведены профили температуры при разных плотностях для обеих мишеней. Пунктиром показана температура начала вспышки, то есть тот момент, после которого реакции начинают протекать очень интен-

сивно. Для DT-мишени температура вспышки составляет  $T_b = 2$  кэВ, а для DD-мишени –  $T_b = 3$  кэВ. Ход кривых при разных плотностях примерно одинаков. Достижение температуры вспышки  $T_b$  необходимо для возникновения самоподдерживающейся реакции, иначе она погаснет из-за газодинамического разлета и уноса энергии излучением. Для этого необходимо увеличить времена удержания и пересмотреть критерий Лоусона.

**Диагностика сингулярностей.** При исследовании разрешимости нелинейных уравнений требуется обнаруживать полюса решения. Вблизи сингулярности решение круто нарастает, поэтому такие задачи являются жесткими.

Аналитически исследовать модель достаточно сложно, получить конструктивный ответ удастся лишь в простейших случаях. Е. А. Альшина, Н. Н. Калиткин и П. В. Корякин впервые предложили метод численного исследования разрушений, основанный на анализе сходимости при сгущении сеток по времени  $t$ . Однако процедура была сложна, недостаточно надежна и давала лишь ориентировочные значения параметров сингулярности без оценок их погрешности. Это делало метод работоспособным лишь в руках опытного вычислителя.

В диссертации предложен новый простой и надежный способ диагностики особенностей типа полюс  $(t_0 - t)^{-q}$ , логарифмический полюс  $\ln^q(t_0 - t)$  и смешанной особенности  $(t_0 - t)^{-q} \ln(t_0 - t)$  для систем ОДУ. Метод позволяет вычислять характеристики этих особенностей с апостериорной асимптотически точной оценкой погрешности. Он особенно хорошо работает при параметризации через длину дуги  $l$ , в которой производились все расчеты.

Поясним основную идею на примере задачи со степенным полюсом порядка  $q$  в момент времени  $t_0$ . Решение этой задачи представимо в виде

$$u(t) = \varphi(t)/(t_0 - t)^q \approx C/(t_0 - t)^q, \quad C = \text{const}. \quad (4)$$

Дифференцируя (4) и записывая полученное равенство в узлах  $n$  и  $n + 1$ , получим систему алгебраических уравнений относительно  $q$  и  $t_0$ , которая решается явно

$$q = \frac{t_{n+1} - t_n}{u_n/f_n - u_{n+1}/f_{n+1}}, \quad t_0 = q \frac{u_n}{f_n} + t_n. \quad (5)$$

Выражения (5) не зависят от параметризации интегральных кривых. Если на достаточно подробных сетках с увеличением текущей длины дуги значения  $q$  и  $t_0$ , выходят на константы, то поведение решения определяется множителем  $(t_0 - t)^{-q}$ , и можно диагностировать полюс. Погрешности этих  $q$  и  $t_0$  вычисляются асимптотически точно по методу Ричардсона.

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

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( u^2 \frac{\partial u}{\partial x} \right) + u^3. \quad (6)$$

Точное решение этой задачи известно и имеет полюс порядка  $q = 1/2$  в каждой точке пространства, причем на всем отрезке решение разрушается одновременно. Методом прямых сведем (6) к системе ОДУ

$$du_j/dt = 1/(2h_x^2) \cdot [(u_{j+1}^2 + u_j^2)(u_{j+1} - u_j) - (u_j^2 + u_{j-1}^2)(u_j - u_{j-1})] + u_j^3. \quad (7)$$

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 CROS, имеющей второй порядок точности,  $L_2$ -устойчивость и чрезвычайно высокую надежность.

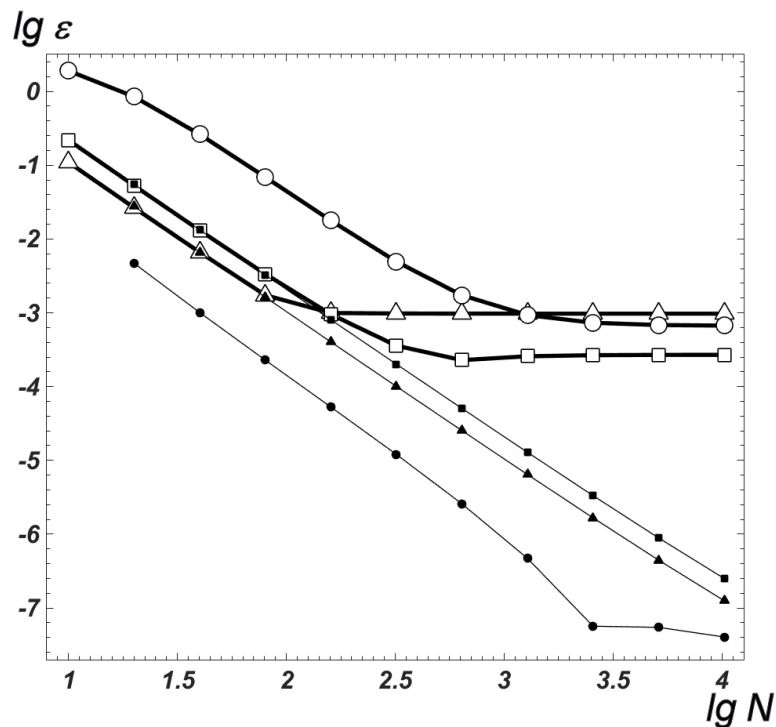


Рис. 2: Сходимость в задаче (7), расчет по схеме CROS;  $\circ - u$ ,  $\triangle - q$ ,  $\square - t_0$ ; светлые маркеры – погрешность по точному решению; темные маркеры – оценки точности по методу Рундсона.

На рис. 2 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 рундсоновские значения погрешности,

относящиеся к системе ОДУ (7), продолжают сходиться со вторым порядком вплоть до фона ошибок округления (показан для  $u$ ).

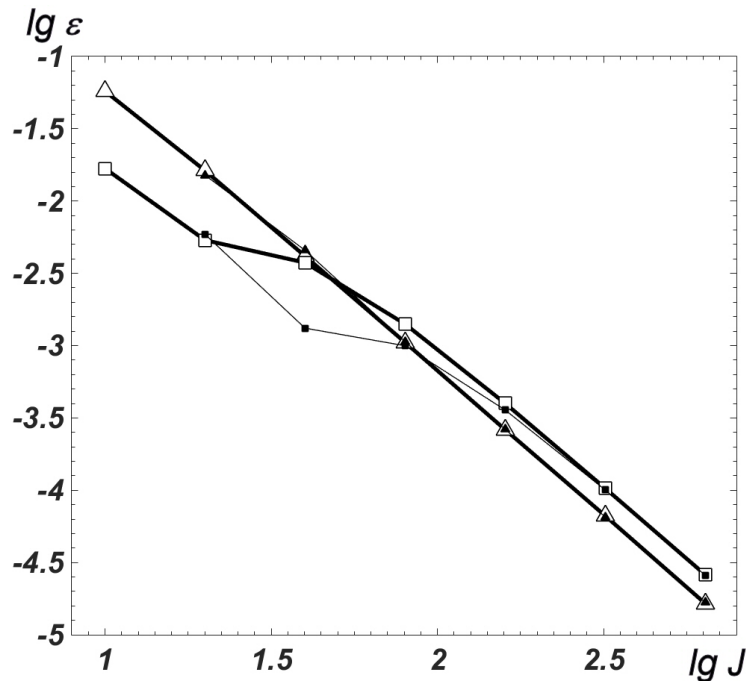


Рис. 3: Сходимость в задаче (6) при сгущении сеток по  $x$ . Обозначения соответствуют рис. 2.

На рис. 3 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.

**Глава 3. Уравнение Пуассона.** Моделирование задач, описываемых многомерными эллиптическими уравнениями, с помощью разностных методов приводит к системам линейных алгебраических уравнений  $Au = b$  огромной размерности. Для систем общего вида работоспособны только итерационные методы сопряженных направлений, в которых требуемое число итераций составляет  $S \approx 10\sqrt{\lambda_{\max}/\lambda_{\min}} \approx 10N$ , где  $\lambda_{\min}$ ,  $\lambda_{\max}$  – границы спектра,  $N$  – среднее число узлов по каждой координате. Требуется  $\sim 300 \div 1000$ , что приводит к неприемлемо большим  $S$ . Поэтому нужно искать ограничения, позволяющие построить более быстрые, но достаточно общие методы.

Рассмотрим эллиптические задачи без смешанных производных вида

$$Lu \equiv \sum_{\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left( k_{\alpha}(\mathbf{r}) \frac{\partial u}{\partial x_{\alpha}} \right) = -f(\mathbf{r}) \quad (8)$$

в прямоугольной области. Коэффициенты  $k_\alpha$  будем считать переменными, а сетки – прямоугольными и неравномерными. Это достаточно общая и содержательная постановка. Она приводит к разностной задаче

$$(\Lambda_x + \Lambda_y + \Lambda_z) u = -f. \quad (9)$$

Здесь трехточечный оператор по направлению  $x$  имеет вид

$$(\Lambda_x u)_n = \frac{2}{h_{x,n+1/2} + h_{x,n-1/2}} \left[ \frac{k_{x,n+1/2}}{h_{x,n+1/2}} (u_{n+1} - u_n) - \frac{k_{x,n-1/2}}{h_{x,n-1/2}} (u_n - u_{n-1}) \right]. \quad (10)$$

Выражения для  $\Lambda_y$  и  $\Lambda_z$  аналогичны.

**Логарифмический счет на установление.** Задача (8) решается счетом на установление. Характерные времена затухания низшей и высшей пространственных гармоник различаются в  $\sim N^2$  раз,  $N \gg 1$ . Поэтому данная задача относится к жестким.

Для экономичного решения соответствующего многомерного параболического уравнения нужно применять некоторый способ факторизации. Наиболее удобна эволюционная факторизация, предложенная Г. И. Марчук<sup>7</sup> и Н. Н. Калиткиным<sup>8</sup>:

$$\prod_\alpha \left( E - \frac{\tau}{2} \Lambda_\alpha \right) \frac{\hat{u} - u}{\tau} = \sum_\alpha \Lambda_\alpha u + f. \quad (11)$$

Эта схема экономична, имеет аппроксимацию  $O(\tau^2 + \sum h_\alpha^2)$ , является безусловно устойчивой и условно асимптотически устойчивой. Она записывается единообразно для произвольного числа пространственных измерений.

Скорость сходимости счета на установление зависит от выбора набора шагов  $\tau$ . А. А. Болтнев, Н. Н. Калиткин и О. А. Качер предложили строить последний в логарифмической шкале

$$\ln \tau_s = (1/2) \cdot \ln (\tau_{\max} \tau_{\min}) + (1/2) \cdot \ln (\tau_{\max} / \tau_{\min}) f(s), \quad 0 \leq s \leq S. \quad (12)$$

Здесь  $f(s)$  – производящая функция. Этот набор обеспечивает экспоненциальную сходимость счета на установление. Это значительно быстрее, чем для общих итерационных методов, и по трудоемкости эквивалентно быстрому преобразованию Фурье (хотя границы применимости значительно шире). Однако не был решен вопрос о выборе наилучшей производящей функции. Предлагались различные варианты  $f(s)$ , но они были неоптимальными.

В диссертации построен новый **линейно-тригонометрический** набор с производящей функцией

$$f_{\text{лт}}(s) = \frac{\pi}{\pi + 2} f_{\text{р}}(s) + \frac{2}{\pi + 2} f_{\text{ч}}(s), \quad (13)$$

$$f_{\text{р}}(s) = (2s/S) - 1, \quad f_{\text{ч}}(s) = -\cos(\pi s/S). \quad (14)$$

<sup>7</sup>Марчук Г. И. Методы расщепления. М.: Наука. 1988.

<sup>8</sup>Калиткин Н. Н. Улучшенная факторизация параболических схем // ДАН. 2005. Т. 402, № 4. С. 467-471.

Предложенный набор уменьшает число итераций в 1.5 раза по сравнению с логарифмически равномерным. Набор (13)–(14) более прост и надежен и оказался практически неулучшаемым (поскольку он почти одинаково гасит все спектральные компоненты решения).

**Оценки точности.** Улучшены имеющиеся теоретические оценки скорости сходимости логарифмического счета на установление. Получена априорная оценка сходимости для линейно-тригонометрического набора: число итераций  $S$  зависит от границ спектра  $\lambda_{\min}$ ,  $\lambda_{\max}$  по закону

$$S = \frac{4}{(\pi^2 + 2\pi)} \ln \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \ln \frac{1}{\varepsilon} \approx 0.25 \ln \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \ln \frac{1}{\varepsilon} \approx 13 \ln N \quad (\varepsilon = 10^{-12}). \quad (15)$$

Оценка (15) используется для построения логарифмической сетки.

Поскольку сходимость является экспоненциальной, можно применить метод, аналогичный методу Ричардсона для разностных сеток. Он сводится к специальной перестановке шагов логарифмического набора. Такая перестановка возможна в силу безусловной устойчивости схемы (9), (10). Это позволяет получить *апостериорные асимптотически точные* значения погрешности итерационного процесса. Ранее подобные методы не были известны. Существовали только мажорантные оценки точности по невязке, которые могли быть хуже по точности на несколько порядков.

Пусть  $\{\tau_q\}$  – последовательность сгущающихся вдвое сеток,  $\{U_q\}$  соответствующая последовательность решений. Из экспоненциального характера сходимости следуют *интерполяционная* и *экстраполяционная* формулы для норм погрешности

$$\|U_q - u\| \approx \|U_{q+1} - U_q\|, \quad (16)$$

$$\|U_{q+1} - u\| \approx \|U_{q+1} - U_q\|^3 / \|U_q - U_{q-1}\|^2. \quad (17)$$

Формула (16) справедлива, поскольку решение  $U_{q+1}$  значительно ближе к точному, чем  $U_q$ . Формула (17) означает экстраполяцию погрешности на  $U_{q+1}$ . Она учитывает, что регулярный участок кривой погрешности не проходит через начало координат. Формулами (16), (17) можно пользоваться вплоть до выхода решения на ошибки округления.

В диссертации найдены оптимальные значения границ  $\tau_{\min}$ ,  $\tau_{\max}$  логарифмического набора и конструктивные оценки границ спектра.

**Примеры.** На рис. 4 показано сравнение сходимости различных наборов шагов для одномерного случая, используется полулогарифмический масштаб. Все кривые имеют ярко выраженные прямолинейные участки, что подтверждает экспоненциальную скорость сходимости. Видны существенные преимущества линейно-тригонометрического набора по сравнению с равномерным и чебышевским. Для линейно-тригонометрического набора показана



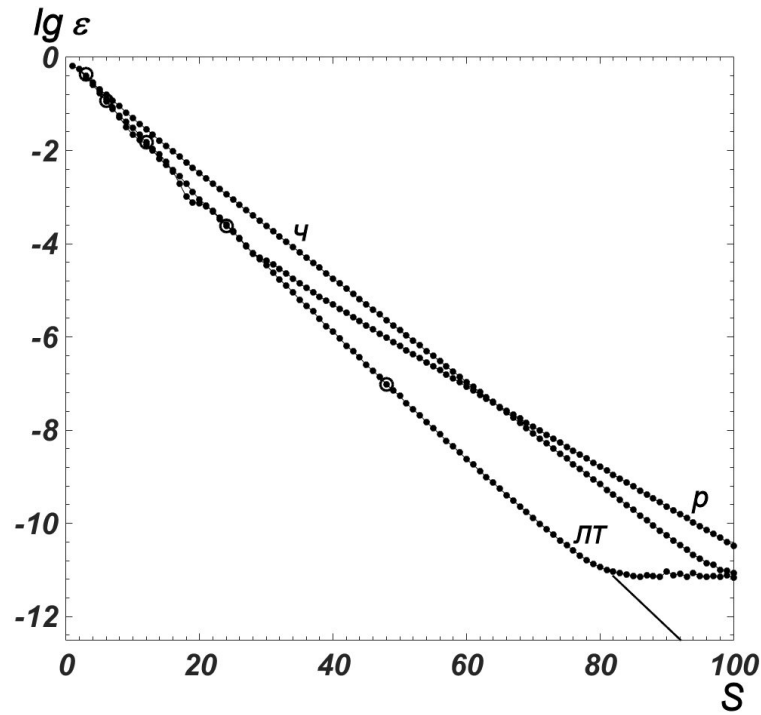


Рис. 4: Погрешность в одномерном случае;  $N = 1000$ ,  $k = 1$ ,  $h = 1/N$ ; прямая – оценка (15);  $\bullet$  – численные расчеты,  $\circ$  – оценка (16); обозначения наборов: **p** – равномерный, **ч** – чебышевский, **лт** – линейно-тригонометрический.

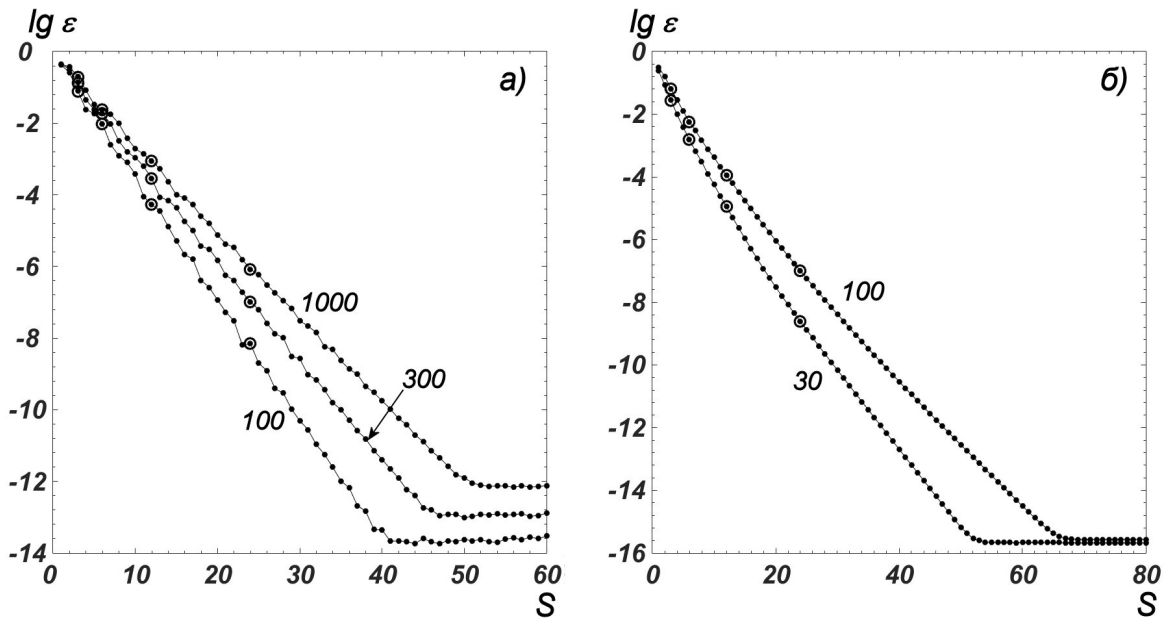


Рис. 5: Многомерные расчеты; а) двумерная задача, б) трехмерная;  $\bullet$  – расчеты по линейно-тригонометрическому набору, цифры около линий – значения  $N$ ,  $\circ$  – оценка (16).

ны априорная оценка (15) и апостериорные оценки (16). Видно, что они отлично согласуются с точными значениями погрешности. Кривые сходимости линейно-тригонометрического набора в двумерной и трехмерной задачах даны на рис. 5,а и 5,б соответственно. В обеих задачах границы спектра по направлениям сильно отличались, поэтому такие тесты представительны.

В двумерном случае сходимость оказывается быстрее, чем в одномерном, поскольку множитель роста двумерной гармонике равен произведению двух одномерных множителей. В трехмерном случае такого эффекта не наблюдается, поскольку трехмерный множитель роста не распадается на произведение одномерных множителей. Однако скорость сходимости будет не хуже, чем в одномерном случае.

Эти расчеты показывают, что предлагаемый метод позволяет достигать предельно возможной точности фона ошибок округления ( $10^{-11} \div 10^{-13}$  при 64-битовых вычислениях) за небольшое число итераций  $S \approx 40 \div 80$ . Это в  $100 \div 1000$  раз быстрее, чем для метода сопряженных градиентов. Такая скорость сходимости дает возможность решать эллиптические уравнения на многократно сгущающихся сетках по пространству, вычисляя погрешности по методу Ричардсона. Это позволяет проводить моделирование таких задач с недостижимой ранее точностью.

**Глава 4. Диффузия в пограничных слоях.** Ряд важных моделей описываются сингулярно возмущенным уравнением диффузии  $\mu^2 Lu + \varkappa(\mathbf{r})u = -f(\mathbf{r})$ , где  $\mu \ll 1$  – малый параметр. Пусть область прямоугольная, а вещество изотропно либо главные оси анизотропного кристалла параллельны осям координат. Тогда дифференциальный оператор  $L$  имеет вид (8).

В структуре решения обычно выделяют регулярную внутреннюю часть и узкий пограничный слой шириной  $\sim \mu$ , в пределах которого решение резко меняется. Эти участки решения сильно разномасштабны, поэтому задача относится к жестким.

Для моделирования таких задач Н. С. Бахвалов и Г. И. Шишкин предложили сетки, адаптированные к пограничному слою и регулярной части решения. Однако эти сетки оказались неоптимальными, так как не учитывают наличие переходной зоны между пограничным слоем и регулярным решением. Для сеток Бахвалова и Шишкина строились априорные оценки сходимости, однако они мажорантны и зачастую завышают погрешность.

В диссертации предложена адаптивная квазиравномерная сетка, которая содержит примерно одинаковое число узлов во всех участках решения (пограничный слой, переходная зона, регулярная область). Для отрезка  $x \in [-1, 1]$  она имеет вид

$$x(\zeta) = A \operatorname{th} [C\zeta (1 + \zeta^2/3)], \quad \zeta \in [-1, 1]. \quad (18)$$

Параметры  $A$  и  $C$  подбираются так, чтобы 1)  $x(1) = 1$  и 2)  $x'(1) = \mu/(\mu + \varkappa)$ . Второе условие задает шаг на границе. Шаг внутри области также следует определять через производную производящей функции  $h_{n+1/2} = x'(\zeta_{n+1/2})/N$ . Многомерная сетка строится как декартово произведение одномерных сеток вида (18). Такая сетка хорошо работает при любом соотношении  $\mu$  и  $\varkappa$ .

Аппроксимируем задачу консервативной разностной схемой

$$\mu^2 \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha} u - \varkappa u = -f, \quad (19)$$

где одномерный трехточечный оператор по координате  $x$  имеет вид (10). Эта схема имеет точность  $O(\sum h_{\alpha}^2)$ , если коэффициенты  $k_{\alpha}$  дважды непрерывно дифференцируемы. Сеточные уравнения на каждой сетке будем решать логарифмическим счетом на установление, описанным в главе 4.

Проведем расчеты на последовательности сгущающихся сеток  $N, 2N, 4N \dots$ , начиная с небольшого  $N$ . Методом Ричардсона найдем значение погрешности и одновременно по скорости ее убывания погрешности найдем порядок фактической точности. Этим способом хорошо определяются степенные зависимости  $N^{\alpha}$ , в том числе с нецелым показателем, возникающим при ограниченной гладкости решения. Более сложные зависимости вида  $N^{\alpha} \ln N$  можно обнаруживать по более медленному выходу на асимптотический режим. Такой подход существенно экономичнее, чем использование априорных оценок сходимости или двусторонних оценок.

Эффективность описанной технологии моделирования подтверждена представительными примерами. В них удавалось получать высокую точность даже при очень тонких пограничных слоях ( $\mu \sim 10^{-7}$ ) уже на скромных сетках с числом узлов  $N \sim 250 \div 500$ .

**Глава 5. Кинетика термоядерных реакций.** Для моделирования кинетики термоядерных реакций требуются достоверные данные об их скоростях. Нахождение последних сводится к обработке экспериментальных данных для сечений реакций.

В данной главе построена технология обработки экспериментальных данных с нахождением дисперсии аппроксимирующей кривой. Разработаны новые математические методы моделирования основных ядерных реакций синтеза изотопов водорода, получены наиболее точные на настоящий момент аппроксимации сечений и скоростей реакций.

**Обработка экспериментальных данных.** В термоядерных экспериментах измеряют сечения реакций в зависимости от энергии сталкивающихся частиц  $E$ . Для представления результатов физики выработали удобную форму записи – S-фактор  $S(E)$ , который получается делением сечения на фактор Гамова, учитывающий проницаемость кулоновского барьера. Во всем актуальном диапазоне  $E$  эта величина изменяется на  $1.5 \div 2$  единицы.

Обработка результатов экспериментов по сечениям термоядерных реакций является трудной проблемой по двум причинам. Во-первых, термоядерные эксперименты чрезвычайно сложны; случайные и систематические ошибки в них очень велики. Данные разных источников могут расходиться до 6 раз, в то время как требуемая точность результата составляет лишь несколько процентов.

Во-вторых, на данный момент еще не предложено надежных формул, описывающих качественный вид кривой  $S(E)$ . Известные методы в таких условиях работают неудовлетворительно. В диссертации разработан новый метод обработки экспериментальных данных. Он основан на регуляризации метода двойного периода.

Метод двойного периода, предложенный Н. Н. Калиткиным и Л. В. Кузьминой<sup>9</sup>, состоит в следующем. Пусть аргумент  $x = \lg E$  линейно преобразован так, чтобы  $\min x_i = -\pi/2$ ,  $\max x_i = \pi/2$ . Возьмем следующие гармоники Фурье для отрезка  $[-\pi/2, \pi/2]$ : нулевую гармонику и  $N$  пар синус-косинус. Дополним их  $M$  нечетными гармониками удвоенного периода  $[-\pi, \pi]$  (они не являются гармониками основного периода). Эти гармоники подключаются в расчет по одиночке, так что  $M$  может быть любой четности. Аппроксимируем  $u = \lg S$  суммой гармоник основного и двойного периода

$$u(x) \approx \sum_{n=0}^{2N+M} a_n \varphi_n(x). \quad (20)$$

Отыскание решения сводится к минимизации среднеквадратичного отклонения по коэффициентам  $a_n$ .

Метод двойного периода разработан для аппроксимации гладких непериодических функций либо функций, вычисленных с высокой точностью на равномерной сетке. Чтобы применить его к данным с большими погрешностями  $\delta_i$  на сильно неравномерных сетках  $x_i$ , надо провести регуляризацию.

В диссертации обоснован выбор регуляризатора А. Н. Тихонова второго порядка (интеграл от квадрата второй производной). Это позволяет подавить нефизичные осцилляции, получить хорошую точность, используя высокие гармоники, и легко проводить обработку при наличии участков, где экспериментальных данных мало или они вовсе отсутствуют. Этот регуляризатор применим к широкому кругу задач.

Для рассматриваемой частной задачи добавим также слагаемое, ограничивающее  $u'$  на левой границе (поскольку по формуле Гамова  $S \approx \text{const}$  при низких энергиях). В итоге постановка метода наименьших квадратов имеет следующий вид:

$$\sum_{i=1}^I \left( \frac{u(x_i) - u_i}{\delta_i} \right)^2 + \alpha \int_{-\pi/2}^{\pi/2} [u''(x)]^2 dx + \beta [u'(-\pi/2)]^2 = \min; \quad \alpha > 0, \beta > 0. \quad (21)$$

Подставляя сюда (20), получим задачу на минимум для коэффициентов  $a_n$ .

В отличие от традиционных методов, в данном подходе не требуется сведение регуляризованной задачи к дифференциальному уравнению или

<sup>9</sup>Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Аппроксимация и экстраполяция табулированных функций // ДАН. 2000. Т. 374, № 4. С. 464-468.

задание априорной формы кривой. Метод достаточно формализован и не требует специальных физических знаний, а также прост в реализации.

**Скорости термоядерных реакций.** С помощью предложенного метода получены аппроксимации  $S(E)$  для реакций  $D + D \rightarrow p + T$ ,  $D + D \rightarrow n + {}^3\text{He}$ ,  $D + T \rightarrow n + {}^4\text{He}$ ,  $D + {}^3\text{He} \rightarrow p + {}^4\text{He}$ . Они наиболее важны для УТС. Результаты расчета для первой из этих реакций приведены на рис. 6. Видно, что аппроксимирующая кривая имеет естественный вид и не содержит нефизических осцилляций несмотря на использование высоких гармоник.

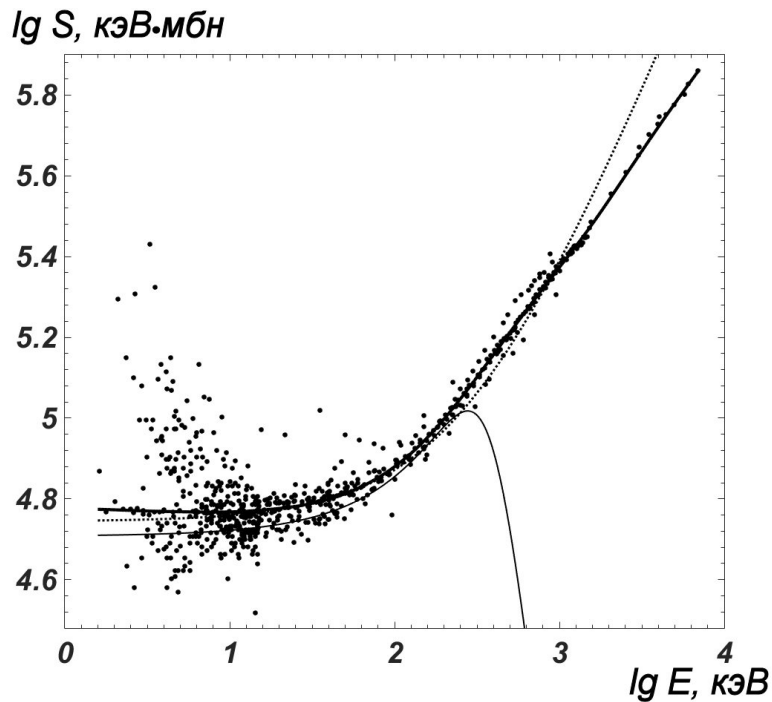


Рис. 6: S-фактор для реакции  $D + D \rightarrow p + T$ ; точки – экспериментальные значения, жирная линия – предложенная аппроксимация, тонкая сплошная линия – формула Козлова, пунктир – аппроксимация Брауна.

На рис. 6 приведены также известные аппроксимации Козлова<sup>10</sup> и Брауна<sup>11</sup>. Видно, что при  $E \leq 300$  кэВ формула Козлова хорошо согласуется с экспериментами и нашей кривой, но при больших энергиях быстро теряет точность. Аппроксимация Брауна хорошо работает при  $E \leq 1$  МэВ. Наша аппроксимация работает до  $E \leq 10$  МэВ (то есть везде, где есть экспериментальные данные).

По найденным аппроксимациям для сечений были рассчитаны таблицы скоростей указанных реакций  $K(T)$ . Скорость термоядерной реакции определяется сверткой  $\sigma(E)\sqrt{2E/m}$  с функцией распределения  $f(E)$ . Процессы горения являются неравновесными, однако  $f(E)$  можно разумно приблизить максвелловским распределением (в предположении, что в среде есть

<sup>10</sup>Козлов Б. Н. Скорости термоядерных реакций // Атомная энергия. 1962. Т. 12, № 3. С. 238-240.

<sup>11</sup>Brown R. E., Jarmie N. Differential cross sections at low energies for  ${}^2\text{H}(d, p){}^3\text{H}$  and  ${}^2\text{H}(d, n){}^3\text{He}$  // Phys. Rev. C. 1990. Vol. 41, № 4. P. 1391-1400.

термодинамическое равновесие). Поэтому

$$K(T) = \frac{\pi}{\sqrt{m}} \left( \frac{2}{\pi T} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \sigma(E) E \exp \left\{ -\frac{E}{T} \right\} dE. \quad (22)$$

Интеграл брался численно по квадратурам высокой точности с подстановкой Фурье-аппроксимации (20). Для полученных  $K(T)$  были построены приближенные выражения, удобные в газодинамических приложениях.

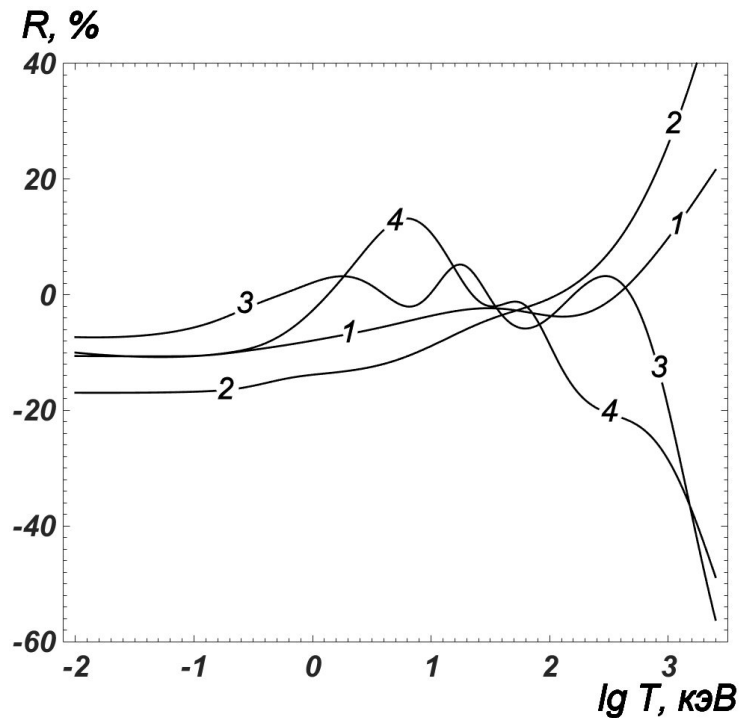


Рис. 7: Отношение формул Козлова для  $K(T)$  к предложенной аппроксимации; 1 –  $D + D \rightarrow p + T$ , 2 –  $D + D \rightarrow n + {}^3\text{He}$ , 3 –  $D + T \rightarrow n + {}^4\text{He}$ , 4 –  $D + {}^3\text{He} \rightarrow p + {}^4\text{He}$ .

Сравнение этих формул с известными результатами проводилось на примере формул Козлова для  $K(T)$ , которые широко используются в расчетах термоядерных мишеней. На рис. 7 показано отношение формул Козлова к предлагаемым аппроксимациям скоростей  $K(T)$  для всех 4 реакций. Видно, что предлагаемые аппроксимации превосходят по точности известные ранее формулы на  $7 \div 20\%$  в актуальном диапазоне температур.

Предложен метод нахождения дисперсии аппроксимирующей кривой. Уклонения экспериментальных точек от аппроксимирующей кривой  $S(E)$  рассматриваются как чисто случайные и варьируются с дисперсиями, равными экспериментальным погрешностям. Для новой реализации “экспериментальных” точек вычисляется среднее  $S(E)$  и  $K(T)$ . Такая процедура повторяется достаточное число раз, и вычисляется дисперсия полученного набора кривых  $K(T)$ . Она разумно оценивает погрешность исходной  $K(T)$ .

Для скорости реакции  $D + T$  этот метод дает погрешность в 4.5% при  $T < 1$  кэВ; при повышении температуры погрешность резко падает и состав-

ляет  $\sim 0.2\%$  для  $T > 1$  кэВ. Для остальных реакций качественное поведение погрешности аналогично, а ее максимальное значение не превышает  $2.5\%$ . Такой точности достаточно для моделирования процессов в мишенях УТС.

**Прецизионное вычисление квадратур.** Для расчета таблиц  $K(T)$  требовалось вычислять квадратуру (22) с высокой точностью. В диссертации исследован вопрос прецизионного вычисления квадратур. Получены рекуррентные формулы для коэффициентов Эйлера-Маклорена на основе квадратурных формул трапеций, средних и Симпсона. Исследованы свойства этих коэффициентов и, в частности, найдены их асимптотики при стремлении номера к бесконечности. Приведены выражения первых 12 коэффициентов в виде отношения целых чисел (их достаточно для практических вычислений).

**Глава 6. Пакеты программ.** На основе предложенных методов разработаны 3 пакета прикладных программ на языке Matlab. Во всех пакетах решение вычисляется одновременно с апостериорным асимптотически точным значением погрешности. Проведено большое количество тестовых расчетов, которые позволили верифицировать работу предложенных вычислительных технологий (численного метода и его программной реализации), а также продемонстрировать их высокую эффективность. Для всех программ приводятся исходные коды, подробные описания и контрольные тесты.

**Пакет *Kinetic*** представляет собой реализацию одно- и двухстадийных химических схем в аргументах  $t$  и  $l$ . В него входит 4 подпрограммы, соответствующие разным решателям. Из них пользователь может выбрать нужную. Пакет включает подпрограмму, содержащую единую методику сгущения сеток и получения решения вместе с асимптотически точным значением погрешности.

Пакет апробируется на задаче с кубической правой частью, имитирующей химические реакции со столкновением 3 одинаковых частиц. Также с использованием этого пакета проведены расчеты кинетики 4 термоядерных реакций, протекающих в дейтериевых мишенях.

**Пакет *SiDiaG*** реализует метод автоматической диагностики сингулярностей систем ОДУ. Программа находит численное решение и параметры его сингулярности с апостериорным асимптотически точным значением погрешности. В пакет входят две подпрограммы для диагностики степенного и логарифмического полюсов, а также подпрограмма оценки погрешности решения и характеристик сингулярности. Ранее подобное математическое обеспечение не предлагалось.

Работа пакета, реализующего данную вычислительную технологию, продемонстрирована на следующих тестовых задачах. **1<sup>o</sup>** Система неавтономных уравнений с “возмущенными” сингулярностями (то есть умноженными на некоторую сильно меняющуюся функцию). **2<sup>o</sup>** Скалярное уравнение со

смешанной особенностью  $(t_0 - t)^{-q} \ln(t_0 - t)$ , не входящей в стандартный набор особенностей. В зависимости от соотношения между параметрами главным будет логарифмический либо степенной множитель, и программа диагностирует соответствующий полюс. 3<sup>o</sup> S-режим нелинейного горения. Уравнение в частных производных сводится методом к системе ОДУ большого порядка.

**Пакет *SuFaReC*** реализует решение задачи Дирихле для двумерного и трехмерного обобщенного уравнения Гельмгольца на сетках, сгущающихся по пространству, с вычислением погрешности по методу Ричардсона. Пользователь может выбрать адаптивные сетки либо задать собственные.

На каждой пространственной сетке решение ищется счетом на установление по эволюционно-факторизованной схеме с линейно-тригонометрическим набором шагов. Для итерационного процесса вычисляется апостериорное асимптотически точное значение погрешности решения сеточной системы (то есть оценка “недоитерированности”).

Пакет включает две подпрограммы для решения эллиптических уравнений при разном числе пространственных измерений, а также подпрограммы для построения оценок погрешности. Эффективность данной технологии моделирования демонстрируется на двумерной и трехмерной сингулярно возмущенных задачах.

## Основные результаты

1. Разработаны и реализованы экономичные численные алгоритмы решения задач кинетики, диффузии и эффективный метод численного обнаружения и диагностики сингулярностей в ОДУ, работающий в автоматическом режиме. Разработан и успешно применен метод обработки экспериментальных данных с нахождением дисперсии аппроксимирующей кривой.
2. Разработан простой итерационный метод решения многомерных эллиптических уравнений с логарифмической сходимостью, что является теоретическим пределом. Одновременно с решением метод вычисляет асимптотически точную оценку погрешности. Метод позволяет эффективно решать сингулярно возмущенные уравнения.
3. Создано три пакета прикладных программ для решения указанных выше задач. Эффективность пакетов подтверждена численными экспериментами.
4. Разработаны новые математические методы моделирования основных ядерных реакций синтеза изотопов водорода, получены наиболее точные на настоящий момент аппроксимации сечений и скоростей реакций.



## Публикации автора по теме диссертации

1. А.А. Белов. Численное обнаружение и исследование сингулярностей решения дифференциальных уравнений // ДАН. 2016. Т. 468, № 1. С. 21-25.
2. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин. Обработка экспериментальных кривых регуляризованным методом двойного периода // ДАН. 2016. Т. 470, № 3. С. 266-270.
3. Н.Н. Калиткин, А.А. Белов. Аналог метода Ричардсона для логарифмически сходящегося счета на установление. // ДАН. 2013. Т. 452, № 3. С. 261-265.
4. А.А. Белов. Численная диагностика разрушения решений дифференциальных уравнений // ЖВМиМФ. 2017. Т. 57, № 1. С. 91-102.
5. А.А. Белов. О коэффициентах квадратурных формул Эйлера-Маклорена // Матем. моделирование. 2013. Т. 25, № 6. С. 72-79.
6. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин, Л.В. Кузьмина. Моделирование химической кинетики в газах // Матем. моделирование. 2016. Т. 28, № 8. С. 46-64.
7. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин. Численное моделирование задач с пограничным слоем // Матем. моделирование. 2015. Т. 27, № 11. С. 47-55.
8. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин, Л.В. Кузьмина. Сравнение высокоустойчивых форм итерационных методов сопряженных направлений // Матем. моделирование. 2015. Т. 27, № 9. С. 110-136.
9. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин. Сверхбыстрый метод с гарантированной точностью для эллиптических уравнений в прямоугольной области // Матем. моделирование. 2015. Т. 27, № 7. С. 37-43.
10. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин. Эволюционная факторизация и сверхбыстрый счет на установление. // Матем. моделирование. 2014. Т. 26, № 9. С. 47-64.
11. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин. Сеточные методы решения задач с пограничным слоем // Известия РАН. Серия физическая. 2015. Т. 79, № 12. С. 1655-1659.

12. *А.А. Белов*. Программы SuFaReC для сверхбыстрого расчета эллиптических уравнений в прямоугольной области // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2015. № 44. 12 с.

<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-44>

13. *А.А. Белов, Н.Н. Калиткин*. Эволюционная факторизация и сверхбыстрый счет на установление // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2013. № 69. 32 с.

<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-69>

Также по результатам работы опубликовано 14 трудов в материалах международных и Всероссийских конференций.