

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Пошивайло Ильи Павловича «**Жесткие и плохо обусловленные нелинейные модели и методы их расчета**», 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

В очень многих инженерных приложениях встречаются так называемые **мягкие** задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений. Для их решения применимы явные методы Рунге-Кутты.

Для остальных типов задач явные методы требуют неприемлемо малого шага интегрирования τ , и нужно рассматривать другие классы схем. В таких задачах точное решение является быстро затухающей функцией. Это так называемые **жесткие задачи**. Обычно они хорошо обусловлены. В других задачах, например, теплового взрыва, точное решение быстро возрастает. Это **плохо обусловленные задачи**, так как при небольшом изменении начальных данных интегральные кривые быстро расходятся. Существует большое количество и других важных примеров таких задач: цепочки химических реакций или процессы в сложных радиоконтурах. Таким образом, построение новых эффективных методов расчета жестких и плохо обусловленных нелинейных моделей является, безусловно, актуальной задачей.

Общая методология и методика исследования.

В основе диссертации лежит разработка полностью неявных L_p -устойчивых схем Рунге-Кутты порядка точности p от 1 до 4, допускающих экономичную реализацию по сравнению с классическими неявными схемами Рунге-Кутты.

Проведена автономизации исходной задачи методом перехода к длине дуги, причем для новой задачи оценка точности находилась по методу Ричардсона.

Был построен пакет программ, позволяющий проводить расчет модельных задач с использованием как существующих, так и разработанных в данной работе алгоритмов.

Разработанный пакет программ применен для моделирования бегущей тепловой волны, расчета транзисторного усилителя, расчета уравнения ван дер Пола и процесса горения метана в воздухе.

Степень обоснованности и достоверности

Основные результаты диссертационной работы связаны с доказательством положений, анализом численных результатов, тестированием используемых алгоритмов на модельных задачах. Следует отметить, что созданный программный комплекс вместе с ответом предоставляет пользователю апостериорную асимптотически точную оценку решения, а также возможность визуальной оценки достоверности полученного результата. Положения, выносимые на защиту, прошли апробацию на научных конференциях, опубликованы в 7 печатных работах в ведущих математических журналах, входящих в перечень ВАК.

Научная новизна полученных результатов

В области численных методов

- 1). _построен новый класс неявных схем для задачи Коши – оптимальные обратные схемы Рунге-Кутты с числом стадий $s \leq 4$. Доказано, что эти схемы L_s -устойчивы и сходятся с s -тым порядком точности. По сочетанию устойчивости, точности и экономичности они являются наилучшими среди всех схем типа Рунге-Кутты и эффективны для решения жестких и сверхжестких задач;
- 2). _показано, что для жестких задач возможно выполнение расчетов на сгущающихся сетках с получением апостериорной асимптотически точной оценки погрешности не только на регулярной части решения, но и в пограничных слоях. Показано, что автономизация жестких задач с помощью длины дуги улучшает расчет пограничных слоев и также позволяет вычислять апостериорную оценку погрешности;

3). _предложено усечение ньютоновских итераций, повысившее надежность решения систем нелинейных алгебраических уравнений; предложено ускорение сходимости ньютоновского итерационного процесса в случае кратных корней для уравнения одной переменной.

В области математического моделирования

Успешно решены следующие актуальные модели:

- 1). _проведен расчет известной задачи о бегущей тепловой волне. Сформулирована и доказана теорема об отсутствии сходимости к точному решению для безитерационных схем в случае быстро бегущей волны;
- 2). _проведен расчет транзисторного усилителя. Эта задача является известным тестом для решения дифференциально-алгебраических систем. Применялся набор оптимальных обратных схем, получен теоретический порядок точности;
- 3). _проанализирован фазовый портрет решения уравнения ван дер Пола. Показано, что при больших значениях параметра ϵ задача на одних участках - жесткая, на других - плохо обусловленная, на третьих в спектре якобиана возникают большие мнимые части;
- 4). _рассмотрена задача химической кинетики. В таких задачах обычно одновременно присутствуют как медленно, так и очень быстро протекающие химические реакции. Кроме того, обычно возникают задачи с системой уравнений большой размерности. Это сверхжесткая задача. Показано, что главная проблема – разномасштабность процессов. Решается только на довольно мелких сетках. Желательно привлечение более высокой разрядности вычислений (128 бит).

Создан программный комплекс,

который включает в себя новые методы решения жестких систем ОДУ:

- 1) оптимальные обратные схемы Рунге-Кутты, с 1 по 4 порядок точности, схемы снабжены подробными комментариями и автоматическими тестами;
- 2) приведена реализация интегратора по длине дуги.

Кроме того, приведена реализация известных методов:

- явные схемы Рунге-Кутты с 1 по 6 порядок точности;
- схемы Розенброка 2 и 4 порядка точности;

-полностью неявные схемы Рунге-Кутты с 1 по 4 порядка точности.

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

Существовавшие ранее схемы не позволяли рассчитать бегущую волну типа Самарского – Соболя с высоким порядком точности. Так, в комплексных схемах Розенброка, 2 порядка точности и Широкова, 4 порядка точности возникало принципиальное ограничение на шаг по времени τ . То есть схемы оказывались условно устойчивыми. В неявной схеме с полусуммой счет «разваливался», что, по-видимому, связано с отсутствием у нее L-устойчивости.

В диссертации впервые предложены схемы, сочетающие высокий порядок точности с таким же порядком Lp-устойчивости и не имеющие ограничений на шаг τ . Это позволяет решать гораздо более широкий класс нелинейных жестких и плохо обусловленных математических моделей.

Пакет программ, разработанный в диссертации, можно применять для численного решения практических задач, а также использовать в процессе подготовки специалистов по математическому моделированию и вычислительной математике. Построенные методы использовались для моделирования задач из физики плазмы, химической кинетики и теории электрических цепей. Однако они могут быть применены и для более широкого круга задач, сводящихся к решению задачи Коши для жесткой или плохо обусловленной системы уравнений.

Внутреннее единство структуры работы

Во **введении** описана область исследования и приведены примеры модельных задач. Все модели сводятся к решению задачи Коши для системы ОДУ. Дается классификация трудностей решения этих систем. Далее сформулированы цель работы, научная новизна, достигнутые результаты и их значимость. Приводится обзор научной литературы по теме работы.

Первая глава посвящена построению нового подкласса разностных схем для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений – обратных схем Рунге –Кутты.

Вторая глава посвящена методу Ричардсона оценки погрешности численного решения задачи Коши и его применению при переходе в качестве аргумента интегрирования к длине дуги интегральной кривой.

Третья глава носит вспомогательный характер. В ней рассматриваются некоторые обобщения метода Ньютона решения нелинейных уравнений, направленные на расширение области сходимости метода. Также для классического метода Ньютона построен алгоритм определения кратности корня в ходе вычислений. Для случая уравнений с кратными корнями разработан алгоритм, ускоряющий сходимость метода Ньютона.

В четвертой главе приведены результаты расчета ряда моделей, отобранных из различных прикладных областей. Приведены решения задач о бегущей тепловой волне, транзисторном усилителе, уравнении ван дер Пола, химической кинетике. В каждой из решенных задач получены новые результаты.

В пятой главе приведено описание и часть исходного кода пакета прикладных программ, который был создан в процессе разработки и отладки численных методов, представленных в диссертации. Комплекс включает в себя набор численных методов для интегрирования жестких и плохо обусловленных систем ОДУ и дифференциально-алгебраических систем, а также необходимые вспомогательные подпрограммы.

Таким образом, следует отметить, что диссертационная работа хорошо структурирована: первые три главы посвящены разработке **новых численных методов**, четвертая глава – расчету ряда актуальных моделей на основе этих методов, т.е. **математическому моделированию**, а в заключительной, пятой главе приведено описание **пакета прикладных программ**, построенных на основе новых численных методов из глав 1-3.

Замечания по диссертационной работе

1). В диссертации не уделяется внимания автоматике выбора шага интегрирования при численном решении задачи Коши.

(Все считают, что равномерные сетки слишком трудозатратны. Но непонятно, как гарантировать нужную погрешность при автоматике выбора шага).

Эта проблема осталась за пределами работы.

2). В диссертационной работе предложено новое решение нескольких достаточно актуальных жестких задач. Однако к недостатку работы следует отнести тот факт, что не все модели являются многомерными. Например, квазилинейное уравнение теплопроводности можно было бы попытаться рассмотреть в 2D-3D варианте. Многомерность, несомненно, привносит дополнительную специфику в решение жестких задач.

3а). В диссертации создан пакет программ для решения жестких систем ОДУ, приведено его подробное описание и тестирование. Однако к недостатку комплекса следует отнести отсутствие сравнения с известными комплексами программ MATLAB, MATHEMATICA.

3б). Отсутствует регистрация программного комплекса.

Заключение

В целом, диссертация Пошивайло И.П. **Жесткие и плохо обусловленные нелинейные модели и методы их расчета** является законченным научным исследованием. Научная новизна основных результатов значительная.

Считаю, что отмеченные выше первое и второе замечания носят характер пожеланий, а последние два замечания имеют более редакционный характер и принципиально не влияют на общую положительную оценку работы. Диссертация Пошивайло И.П. посвящена актуальным вопросам математического моделирования, численных методов и связанных с ними комплексов программ, выполнена на высоком научном уровне. Автореферат правильно отражает содержание диссертации.

Рецензируемая диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям. Ее автор, Пошивайло Илья Павлович, 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, доцент
профессор Национального исследовательского
университета «МИЭТ»

В.А. Гончаров

Подпись В.А. Гончарова удостоверяю

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

Н.М.Ларионов

Ф.И.О.: Гончаров Виктор Анатольевич
Ученая степень: доктор физико-математических наук
Специальность: 01.04.07 Физика конденсированного состояния
Ученое звание: доцент
Почтовый адрес: 124498, Москва, Зеленоград, пл. Шокина д.1
Телефон: (499)720-87-38
Адрес электронной почты: vaгонч@gmail.com
Наименование организации: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники»
Должность: профессор