

Отзыв научного руководителя о диссертационной работе Пошивайло И.П. «Жесткие и плохо обусловленные нелинейные модели и методы их расчета», представленной к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Математики вплотную занимаются численными методами решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений с 1850-х гг. Вслед за методами Адамса и Рунге-Кутты появилось множество других. Ричардсон показал, как находить оценку точности этих методов.

Вплоть до 1940-х гг., в эпоху ручных расчетов, основное внимание уделялось понижению трудоемкости методов. С появлением компьютеров пришлось большее внимание уделять единообразному построению алгоритма и повышению надежности. Под надежностью подразумевалось правильное качественное поведение численного решения и отсутствие переполнений, сбоев и т.п. Эти свойства вышли на первый план при нынешних скоростях суперкомпьютеров.

Уже в 1950-е гг. возникло понятие жестких задач – задач, содержащих процессы с очень сильно различающимися скоростями. Первыми такими задачами оказались задачи химической кинетики. За ними последовало много других. Для них стали разрабатывать специальные методы, вводить понятия A - и L -устойчивости. Особые трудности представляли нелинейные задачи, где этих понятий недостаточно. Типичным примером таких нелинейных задач являлись разностные схемы для нелинейного уравнения теплопроводности с решениями типа бегущей тепловой волны.

Диссертация посвящена построению нового класса схем повышенной надежности. Схемы для жестких задач должны содержать существенные элементы неявности. В мировой литературе до сих пор наиболее перспективными были схемы Розенброка, особенно схема с комплексными коэффициентами. Эти схемы удивительно хорошо считали задачи линейной теплопроводности. Однако задачу бегущей тепловой волны они не могли рассчитать: в них появлялось принципиальное ограничение на шаг по времени. Бегущая тепловая волна не могла пробегать более одного пространственного интервала за временной шаг. При нарушении этого условия возникало явление ложной сходимости: при одновременном сгущении шагов по обеим переменным решение сходилось к пределу, но этот предел не являлся точным решением. Диссертация И.П.Пошивайло посвящена созданию схем, свободных от этих недостатков. В диссертации предложен новый класс неявных схем – оптимальные обратные схемы Рунге-Кутты. При числе стадий $s \leq 4$ эти схемы имеют порядок точности $p = s$, обладают Lp -устойчивостью, монотонны, а их трудоемкость

благодаря специфической рекуррентной форме записи функций эквивалентна трудоемкости всего одной стадии простейшей диагонально- неявной схемы Рунге-Кутты. В диссертации подробно исследованы и обоснованы свойства этих схем. Доказана их применимость к дифференциально-алгебраическим системам индекса 1, причем на этих системах схемы сохраняют свой порядок точности.

Исследовано получение апостериорной асимптотически точной оценки погрешности при расчете жестких задач этими схемами. Показано, что при сгущении сеток можно пользоваться методом Ричардсона, причем полученные оценки погрешности будут относиться к регулярным участкам решения. Погрешность в областях начального и внутренних пограничных слоев при этом не удается описать.

Для хорошего описания решения повсюду, включая пограничные слои, был применен прием перехода к новому аргументу – длине дуги интегральной кривой. Было показано, что в этом случае метод сгущения сеток по новому аргументу позволяет правильно получить оценку погрешности на всех участках решения. При этом в области регулярного решения эти оценки согласуются с теми, которые получались при естественном аргументе t .

В задачах химической кинетики и ряде других точное решение имеет линейные первые интегралы. Для химии они соответствуют балансам химических элементов при прохождении химических реакций. В диссертации доказаны теоремы о том, что построенные методы, а также любые методы Рунге-Кутты и схемы Розенброка точно сохраняют химические балансы. Это свойство важно для приложений.

Все построенные схемы апробированы как на методических задачах, так и на актуальных прикладных задачах. В методических расчетах показано, что переход к длине дуги тем более эффективен, чем больше жесткость задачи. Среди произвольных задач есть расчеты квазилинейного уравнения теплопроводности; расчетная бегущая волна может бежать с любой скоростью, всегда обеспечивая сходимость к точному решению при сгущении сеток. В задачах химической кинетики продемонстрирована исключительная надежность схем: они позволяют проводить расчеты при жесткости (отношению максимальной и минимальной скоростей) порядка 10^{10} . Даже при таких огромных жесткостях качественное поведение решения остается правильным. Такая высокая надежность позволяет рекомендовать построенные схемы для широкого применения.

Все предложенные схемы и алгоритмы доведены до четко написанных программ, образующих программный комплекс, предназначенный для работы в среде MATLAB. Это позволяет непосредственно применять результаты диссертации в любых организациях.

В процессе работы И.П.Пошивайло проявил много инициативы и самостоятельности. Все новые результаты, вынесенные на защиту, получены соискателем самостоятельно и опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК.

Диссертация удовлетворяет всем требованиям ВАК по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, а ее автор, Пошивайло Илья Павлович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель,
член-корреспондент РАН,
д.ф.-м.н., профессор

Зеленый

Н. Н. Калиткин

Подпись Н.Н.Калиткина заверяю:
ученый секретарь ИПМ им. М.В.Келдыша РАН
кандидат физико-математических наук



А. И. Маслов

«2» октября 2014 г.