

Отзыв официального оппонента

на диссертационную работу Морозова Александра Юрьевича «Моделирование динамических систем с интервальными параметрами», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертационная работа посвящена созданию новых подходов к моделированию динамических систем с интервальными параметрами, основанных на адаптивном разбиении области неопределенности в пространстве параметров. Полученные результаты представляют интерес для широкого класса прикладных задач, включающего задачи микроэлектроники, небесной механики, механики сплошных сред и другие приложения. Разработка эффективной вычислительной методики для моделирования динамических систем с интервальными параметрами, включающего решение как прямых задач, так и задач параметрической идентификации, обуславливает *актуальность* диссертационной работы.

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы.

Во введении описывается общая характеристика работы, актуальность темы исследования, цели и задачи диссертации, научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, методы исследования.

В первой главе дано описание интерполяционного подхода и основанного на нем алгоритма адаптивной интерполяции, использующего kd-дерево. Сначала сформулирована интервальная задача Коши для системы ОДУ, затем представлен алгоритм адаптивной интерполяции и доказаны утверждения относительно его условий применимости, сходимости и оптимальной, с позиции вычислительных затрат, степени используемого полинома. Выполнен анализ погрешности получаемых результатов. Приведены результаты тестирования разработанного алгоритма на ряде модельных задач разной размерности, содержащих различное количество интервальных параметров. Для наглядности выполнено сравнение с традиционными алгоритмами (с методом Монте-Карло).

Во второй главе описывается вариант алгоритма адаптивной интерполяции на основе разложения в тензорный поезд (ТТ-разложения). В представленном в первой главе классическом варианте алгоритма адаптивной интерполяции осуществляется работа с интерполяционными сетками, число узлов в которых экспоненциально зависит от количества интервальных параметров задачи, что ограничивает область его применения. За счет представления значений, содержащихся в узлах сеток, в виде ТТ-разложения имеется возможность преодолеть проклятие размерности при решении задач с большим количеством интервальных неопределенностей. Рассмотрена возможность параллелизации и реализации алгоритма ТТ-cross, который позволяет эффективно строить

ТТ-разложение, с применением технологии CUDA. С помощью разработанного варианта алгоритма успешно решена задача небесной механики, содержащая 18 интервальных параметров.

В третьей главе рассматривается вариант алгоритма адаптивной интерполяции на основе разреженных сеток, позволяющих снизить экспоненциальную сложность при решении задач с многомерной областью неопределенности параметров. Здесь используется иерархический базис. Выполнено построение квадратичного базиса и базиса четвертой степени. Сформулирована и доказана теорема относительно глобальной погрешности алгоритма. Решен ряд задач, содержащих до десяти интервальных параметров. Показано, что данный вариант алгоритма работает быстрее, чем классический вариант, описанный в первой главе. Выполнена программная реализация с применением OpenMP.

В четвертой главе рассмотрена возможность распараллеливания вычислений и реализация классического варианта алгоритма адаптивной интерполяции с применением технологии CUDA. Дано описание используемых структур данных и их особенностей в параллельном исполнении. Результаты вычислительных экспериментов продемонстрировали возможность эффективного распараллеливания алгоритма адаптивной интерполяции. Выполнен обзор наиболее распространенных библиотек, содержащих программы для моделирования динамических систем с интервальными параметрами, и проведен сравнительный анализ полученных автором результатов с результатами, полученными при помощи программных библиотек AWA, VNODE, COSY Infinity, RiOT, FlowStar и Verifyode. На примере тестовых задач показаны преимущества разработанных вариантов алгоритма с точки зрения точности и трудоемкости.

В пятой главе описан интервальный подход к решению задачи параметрической идентификации динамических систем, цель которого заключается в нахождении такой оценки области неопределенности параметров, при которой параметрические множества состояний динамической системы содержали бы в себе экспериментальные данные. Рассматриваются задачи как с точными экспериментальными данными, так и с интервальными. Сформулированы и доказаны две вспомогательные теоремы: относительно ширины получаемых интервальных оценок параметров и о переходе от интервальных экспериментальных данных к точечным данным. Задача параметрической идентификации сводится к задаче минимизации определенной целевой функции, для решения которой разработан алгоритм подвижного окна, относящийся к градиентным методам. Выполнена программная реализация представленного подхода с применением OpenMP.

В шестой главе приведено описание разработанного программного комплекса и полученных с его помощью результатов решения ряда научно-технических задач из небесной механики, механики сплошных сред, вычислительного материаловедения

и микроэлектроники. Выполнено сравнение полученных результатов с данными других авторов.

В заключении сформулированы основные положения диссертационной работы, выносимые на защиту.

В диссертации присутствуют **оригинальные результаты** одновременно из трех областей: математического моделирования, численных методов и комплексов программ.

1) В области математического моделирования:

- Разработана математическая модель химических превращений с учетом неопределенности значений констант скоростей реакций. Выполнено совместное решение интервальных уравнений химической кинетики и газовой динамики. Показано, что неопределенности оказывают влияние на ключевые характеристики неравновесных смесей.
- Представлены интервальные модели элементов энергонезависимой памяти (мемристоров). По экспериментальным данным для мемристивных элементов на основе оксида гафния и ниобата лития выполнена интервальная параметрическая идентификация построенных моделей.
- Предложена интервальная модель процесса аномальной диффузии, содержащая дробно-дифференциальные уравнения с интервальными параметрами в показателях производных.

2) В области численных методов:

- Предложен интерполяционный подход к моделированию динамических систем с интервальными параметрами, который в сочетании с адаптивным разбиением области неопределенности позволяет получить параметрическое множество решений в явном виде с контролируемой точностью.
- Разработаны алгоритмы адаптивной интерполяции на основе разреженных сеток и тензорных поездов, которые с использованием древовидных структур данных позволяют преодолеть проклятие размерности при решении задач с большим количеством интервальных параметров.
- Сформулированы и доказаны утверждения относительно сходимости и погрешности алгоритмов. Показано, что глобальная погрешность прямо пропорциональна высоте полученных в вычислительном процессе деревьев. Предложен практический способ определения бифуркаций и хаоса в динамических системах с интервальными параметрами по нарастающей плотности адаптивной сетки.
- Предложен интервальный метод решения задач параметрической идентификации динамических систем. Сформулированы и доказаны две

теоремы: первая — о ширине получаемых интервальных оценок параметров, вторая — о переходе от интервальных экспериментальных данных к вершинам соответствующего бруса. Разработан алгоритм подвижного окна для параметрической идентификации динамических систем с прямоугольными и эллипсоидными областями неопределенности параметров, который позволяет избежать разрастания границ решения.

3) В области комплексов программ:

- Создан программный комплекс, включающий в себя последовательную и параллельную реализации разработанных алгоритмов решения задач моделирования и параметрической идентификации динамических систем с интервальными параметрами на многоядерных CPU и GPU.

Научная новизна работы заключается:

- в разработке интерполяционного подхода к решению задач моделирования динамических систем с интервальными параметрами, а также алгоритмов адаптивной интерполяции на основе разреженных сеток и тензорных поездов;
- в разработке интервального метода решения задач параметрической идентификации и алгоритма подвижного окна для параметрической идентификации динамических систем с прямоугольными и эллипсоидными областями неопределенности параметров;
- в формулировке и доказательстве сопутствующих утверждений и теорем;
- в разработке интервальных вычислительных моделей, которые позволяют решить ряд актуальных практических задач из различных областей;
- в разработке систем компьютерного и имитационного моделирования (программный комплекс с использованием CUDA и OpenMP).

Практическую значимость представляют результаты решения ряда прикладных задач, возникающих в авиационных, ракетно-космических и других приложениях, при помощи разработанных алгоритмов моделирования динамических систем с интервальными параметрами.

Достоверность и обоснованность полученных результатов подтверждается известными теоретическими и экспериментальными данными, а также корректным использованием предложенного математического аппарата, который включает комбинации традиционных методов, с успехом применявшихся ранее в других приложениях. Разработанные параллельные алгоритмы и программные решения верифицированы на широком круге модельных и прикладных задач.

Замечания:

- 1) В работе отсутствует чёткое определение разрабатываемого алгоритма. В частности, на странице 9 диссертации сказано: «Ранее соискателем был разработан и теоретически обоснован алгоритм адаптивной интерполяции [89–91], который предназначен для

моделирования динамических систем с интервальными неопределенностями и удовлетворяет большинству вышеперечисленных требований». Необходимо явно указать классы решаемых задач, сформулировать количественные требования к разрабатываемым алгоритмам и указать их ожидаемые свойства. Цель работы, определённая на странице 11 как «разработка эффективных алгоритмов и их соответствующих программных реализаций для задач моделирования и параметрической идентификации динамических систем с интервальными параметрами», является слишком расплывчатой и затрудняет сравнительный анализ полученных результатов. Как следствие, выводы носят сугубо качественный характер и затрудняют позиционирование диссертационной работы относительно других работ в данной проблемной области. Например, основные положения, выносимые на защиту (пункт 5, страница 29 автореферата): «Разработан алгоритм подвижного окна для параметрической идентификации динамических систем с прямоугольными и эллипсоидными областями неопределенности параметров, который позволяет избежать разрастания границ решения». Есть ли аналоги у данного алгоритма, предложенные другими авторами? В чём состоят преимущества алгоритма подвижного окна, представленного в диссертации, по сравнению с аналогичными алгоритмами других авторов? Есть ли количественные оценки?

2) Термины «эффективность алгоритма» и «сложность алгоритма» в работе использованы без предварительного определения. Например, п 1.7. диссертации «Оценка сложности многомерной интерполяции» (страница 49) заканчивается словами «Полученные в этом разделе оценки (1.16), (1.17) и (1.18) понадобятся далее для оценки количества операций в алгоритме адаптивной интерполяции». Когда речь заходит о подсчёте элементарных арифметических операций уместнее говорить о трудоёмкости алгоритма.

3) Помимо задачи о моделировании одномерного химически неравновесного течения в сопле жидкостного ракетного двигателя, интересно рассмотреть моделирование турбулентности в приближении RANS с многопараметрическим замыканием и интервальным заданием констант модели турбулентности.

4) В представленных алгоритмах адаптивной интерполяции используется кусочно-полиномиальная интерполяция. Каковы требования к гладкости глобального интерполянта? Что в исходной задаче влияет на выбор и свойства глобального интерполянта?

5) Можно ли в алгоритме адаптивной интерполяции, описанном в первой главе, использовать адаптивные сетки, отличные от прямоугольных?

Заключение

Диссертационная работа А. Ю. Морозова является самостоятельным завершённым научным исследованием в области математического моделирования, численных методов, алгоритмизации и создания компьютерных программ, выполненным автором на высоком научном уровне. В работе предложены, обоснованы и реализованы новые алгоритмы

моделирования и параметрической идентификации динамических систем с интервальными параметрами. Основные результаты, приведенные в диссертации, получены впервые и лично автором. Основные положения диссертации докладывались на научных семинарах, всероссийских и международных конференциях и опубликованы в 21 работе в журналах, рекомендованных ВАК РФ (в том числе 14 статей опубликованы в журналах, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science). Кроме этого, получено два свидетельства о регистрации программы для ЭВМ и опубликована одна рецензируемая монография. Совокупность научных положений, полученных в диссертации, можно квалифицировать как крупное научное достижение. Автореферат диссертации полностью отражает содержание диссертации. Отмеченные выше замечания не снижают общей высокой оценки результатов диссертации.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертация А. Ю. Морозова «Моделирование динамических систем с интервальными параметрами» соответствует требованиям ВАК Российской Федерации (п.п. 9–14 «Положения о присуждении ученых степеней»), предъявляемым к докторским диссертациям по специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», а ее автор А. Ю. Морозов заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук.

Доктор физико-математических наук,
специальность докторской диссертации — 05.13.18
(«Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ»),
ведущий научный сотрудник лаборатории № 8 —
физического моделирования двухфазных течений
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Объединенный институт высоких
температур Российской академии наук (ОИВТ РАН)

Мартыненко С.И.



01 марта 2024 года

Почтовый адрес: 125412, Москва И-412, Ижорская ул.,
д. 13, стр. 2;
адрес электронной почты: ok-oivt@ihed.ras.ru;
адрес официального сайта: <https://jiht.ru>;
телефон: +7 (495) 484-2300.

Подпись Мартыненко Сергея Ивановича заверяю,
г.н.с. лаб. № 8 ОИВТ РАН,
чл.-корр. РАН



Бараков А.Ю.