* **Проект на тема „Апроксимации, числени методи и приложения“ с ръководител гл. ас. д-р Тихомир Иванов (договор № 80-10-215/06.05.2020)**

Резюме

Проектът е продължение на предхождащи изследвания на научния колектив по темата в следните посоки:

* Неравенства от тип на Туран;
* Дефинитни квадратурни формули от нечетен ред, в т.ч. с равноотдалечени възли, и оценка на грешката;
* Екстремални задачи за полиноми и сплайн-функции, включително алгоритми за намирането на екстремалната функция;
* Симплектични явни и неявни числени методи за уравнения от молекуярната динамика;
* Числени алгоритми, съобразени със спецификата на конкретни математически модели на реални процеси, като последните са изследвани числено;
* Математически модели на невромускулна активност и числено решаване на последните.

Работата по проекта доведе до резултати в тези направления, които резюмираме по-долу.

* Уточнено е и е подобрена областта на валидност на неравенството на Туран за ултрасферичните полиноми.
* Получени са редица нови резултати за „най-гладко“ интерполиране със свободни възли *x*0, *x*1,…, *xN*+1 от интервал [*a*,*b*] на данни *y*0, *y*1,…, *yN*+1 с функции от пространството на Соболев *W* 32[a,b].
* В сътрудничество с български и унгарски учени са получени резултати за актуални математически проблеми за решаване на нелинейни диференциални уравнения, като е приложен нов метод. Разработеният нов метод е изследван и са получени много добри числени резултати.
* Алгоритмично и програмно са реализирани симплектични явни и неявни числени схеми с трети ред на аппроксимация относно стъпката на интегриране за решаване уравненията за движение на молекулярната динамика. Резултатите, получени по тази задача са важни, тъй като по-нататъшното сравнение на явния симплектичен числен метод с трети ред на точност с методите на Верле ще покаже дали е целесъобразно в пакетите програми за молекулярна динамика (например LAMMPS) последните да бъдат заменени с явния симплектичен метод от трети ред. Ако се потвърди че той е по-ефективен, това би имало голямо значение при решаване на големи по размерност реални задачи на молекулярната динамика.
* Получени са резултати за ролята на коефициента на дифузия в модел на множествена склероза. В частност са получени нови, качествено различни демиелизационни структури при наличието на нелинеен коефициент на дифузия.
* Построен е робастен числен метод за симулиране на процеса на адсорбция в карбонови филтри при наличието на множество микрозамърсители.
* Получени са нови мултифизични симулации на процеса на невромускулна активност.

Част от резултатите по проекта бяха представени в 5 ръкописа, които следва да бъдат предложени за публикуване в списания, реферирани в международните бази данни. Като резултат от работата по проекта беше и изготвянето и защитаването с отлична оценка на дипломна работа на член на колектива.