

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ
И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ГЕОФИЗИКИ
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИВМиМГ СО РАН)

Просп. Академика Лаврентьевса, 6, Новосибирск, 630090
Тел.: (383)330-83-53, факс (383)330-87-83, e-mail: director@sscc.ru
ОКПО 03533843, ОГРН 1025403656420, ИНН/КПП 5408100025/540801001

23.01.17 № 15301/8.1-03-34-1

На № _____ от _____

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук
член-корреспондент РАН

С.И. Кабанихин

23 января 2018 г.



ОТЗЫВ

ведущей организации о диссертации Матвеева Сергея Александровича «**Быстрые методы численного решения уравнений типа Смолуховского**», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Диссертационная работа Матвеева С.А. «Быстрые методы численного решения уравнений типа Смолуховского» посвящена созданию, исследованию, и численной реализации новых быстрых методов решения нелинейных уравнений коагуляции-фрагментации Смолуховского на основе малоранговых аппроксимаций функций многих переменных, тензорных и ТТ-разложений. Работа **соответствует специальности** 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, является **завершенным научным исследованием**, имеет **высокую научную ценность и практическую значимость**, является **чрезвычайно актуальной** в силу интенсивного

развития исследований в области новых материалов, где процессы коалесценции, нуклеации, агрегации-дезагрегации кластеров играют ключевую роль.

Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав и заключения. Во введении дается краткий обзор истории развития теории и приложений уравнения Смолуховского, из методов решения упоминаются разностные методы и методы Монте-Карло, и далее перечислена **научная новизна**, которую автор видит в предложенном им методе ускорения решения уравнения Смолуховского на несколько порядков, а также в получении оценок эффективности предложенного метода, и реализации алгоритмов в виде комплекса программ, и все это несомненно соответствует действительности. **Достоверность** метода и алгоритмических программ проверена на аналитических решениях, и сравнением со стандартными разностными методами, а также с методами Монте-Карло. Отмечена **практическая ценность** работы и перечислены основные результаты и положения, которые выносятся на защиту, и сделано это кратко, ясно, и убедительно. Перечислены также конференции и семинары, на которых были доложены основные результаты, входящие в диссертацию, а также отмечается, что по теме диссертации ее автор опубликовал 12 работ, среди которых 5 статей в изданиях, входящих в перечень ВАК. Это также в точности соответствует фактически выполненной работе.

В первой главе диссертации автор довольно подробно описывает модели коагуляции и фрагментации физических процессов, которые приводят к уравнениям типа Смолуховского, условиях разрешимости таких уравнений, рассматриваются важные классы ядер уравнений, которые либо обеспечивают однозначное решение, либо приводят к взрыву за конечный временной промежуток и связан с явлением желирования. Описан также и сложный случай многокомпонентной коагуляции, важный в применениях к моделированию процессов коагуляции аэрозольных частиц различного химического состава.

Вторая глава посвящена численным методам решения уравнений типа Смолуховского. Здесь в первом разделе (2.1) описываются основные положения малоранговых представлений матриц и многомерных массивов, с идеей применения таких приближений к решению уравнения Смолуховского. Собственно **новый метод решения** предложен в разделе 2.2, основанный на использовании малопараметрических представлений матриц и многомерных массивов. Иллюстрируется данный метод на применении его к решению уравнения коагуляции в непрерывной форме, и коагуляции-фрагментации в модели формирования колец Сатурна, а также локальной модели агрегации в профиле почвы. Здесь же описана идея параллелизации метода. Интересный случай рассмотрен в стационарном варианте уравнения Смолуховского, здесь на основе

метода простой итерации и схемы ускорения Андерсона предложена быстрая версия метода. Раздел 2.3 посвящен применению ТТ-разложений для ускорения конечно-разностной схемы решения уравнения для случая многокомпонентной коагуляции. Здесь используется вложенный вызов ТТ-крестового метода.

Третья глава посвящена важному вопросу оценки рангов конкретных классов ядер коагуляции и примерам аналитического решения. Здесь диссертантом получен ряд теорем о приближении практически важных ядер, в частности, многокомпонентных, с помощью разделенных переменных, и выведены оценки погрешностей.

Четвертая глава называется «Результаты численных экспериментов», однако содержание ее гораздо шире. Здесь вообще следует сказать, что диссертант **проделал очень большую работу** по созданию программного комплекса, который может использоваться для моделирования широкого класса процессов коагуляции-фрагментации. Тщательно проведена **валидация** разработанных методов с помощью сравнения с точными решениями, а для демонстрации эффективности этих методов приводятся сравнения с другими методами, в частности, с популярным методом Ганса Бабовского «Mass flow MC». Что касается программного комплекса, то он написан в современном модульном виде (см. описание директорий с модулями программного комплексного, таблицы 4.1 и 4.2). Результаты уже конкретных численных экспериментов приведены в разделе 4.2. Здесь подробно анализируются результаты моделирования для конкретных ядер коагуляции- фрагментации, в частности, в кольцах Сатурна. Получены впечатлительные результаты по ускорению алгоритмов более чем в 1000 раз. Красивый результат представлен в случае осциллирующей плотности, он ясно демонстрирует высокую точность метода, см. раздел 4.2.3. Здесь интерес представляет использование ускорения по методу Андерсона. Не совсем ясно и не полно описано исследование локальной модели почвенной агрегации, раздел 4.2.4. Упоминание некоторых параметров, которые должны получаться из модели биологического цикла (не описанной в диссертационной работе), не очень разъясняет суть дела. Краткий вывод из сделанных расчетов о том, что при насыщении почвы минеральными примесями распределение частиц по размерам становится более узким является интересным, однако требует более глубокого анализа.

Диссидентантом проведено тщательное сравнение предложенных методов с другими, в частности, с методом Монте-Карло и справедливо делается вывод, что предложенный им метод существенно выигрывает, когда необходимо получить решение с высокой точностью. Здесь правда следует заметить, что существуют эффективные модификации методов Монте-Карло, где моделирование частот столкновений производится очень

экономно с использованием подобранных мажорант, однако общий вывод о точности остается тем же.

В целом, диссертационная работа написана ясным математическим языком, все утверждения строго доказаны. Замечания, сделанные по ходу изложения отзыва, лишь говорят о тщательности работы диссертанта. Еще одно замечание, которое можно было сделать, это то, что диссертант ограничился пространственно однородными задачами, и далее можно было бы добавить, что это умаляет значение работы. Однако это не так. Диссертант сосредоточился на однородных задачах, и объем проделанной им работы впечатляет. Неоднородные задачи конечно более реалистичны, они представляют замечательное и необозримое поле для дальнейших исследований автора по распространению предложенных им методов на такие задачи.

Содержание диссертационной работы опубликовано в научной печати в достаточной мере: диссертант опубликовал 12 работ, среди которых 5 статей в изданиях, входящих в перечень ВАК. Результаты докладывались на многих научных семинарах ведущих научных центров и на целой серии российских и международных конференциях. Работа докладывалась и на семинаре ведущей организации, где получила поддержку.

Автореферат правильно отражает содержание диссертации. Сделанные замечания не влияют на общий вывод о том, что представленная диссертация Матвеева С. А. является самостоятельной и законченной научной работой, имеющей несомненно высокое теоретическое и практическое значение в чрезвычайно широком классе физических, химических и биологических процессов коагуляции и фрагментации, а также процессов формирования кластеров в технологии эпитаксиального выращивания новых наноразмерных полупроводниковых материалов.

На основании изложенного можно сделать вывод о том, что представленная диссертация является законченным научным исследованием и удовлетворяет п.9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением правительства РФ от 24.09.2013 N 842, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18.

Настоящий отзыв обсужден и одобрен на Объединенном семинаре Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, кафедры вычислительной математики Новосибирского государственного университета, и семинара по методам Монте-Карло Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН 23 января 2018 г. (протокол N 1 от 23.01.2018).

Главный научный сотрудник
Института вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск
д.ф.-м.н., профессор  Сабельфельд

Сабельфельд Карл Карлович

Главный научный сотрудник
Института вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск

Ильин Валерий Павлович

Подпись Сабельфельда Карла Карловича и Ильина Валерия Павловича удостоверяю:
Ученый секретарь ИВМ и МГ СО РАН

д. ф.-м. н., профессор
ГИДРОГЕОФИЗИЧЕСКОЙ БЮЛЛЕТЕНЬ
СИБИРСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
* ОГРН 1055500000000

Куликов Игорь Михайлович



Полное наименование организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук.

Адрес: 630090, Новосибирск, Проспект Лаврентьева 6,

ИВМИМГ СОРАН

Телефон (383) 330 76 90,

Факс (383) 330-87-83

E-mail: secretary@sscc.ru