

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Матвеева Сергея Александровича «Быстрые методы численного решения уравнения Смолуховского», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Уравнения Смолуховского представляют собой один из основных инструментов математического моделирования в области физической кинетики и ее приложений к самому широкому кругу задач физики сплошной среды, физической химии, биофизики и т.п. При этом современные проблемы, рассматриваемые данными отраслями науки, требуют работы с крайне большими массивами элементов моделируемых систем, что, естественно, вызывает необходимость разработки новых численных методов и реализующих их комплексов программ. Таким образом, поставленная в диссертации задача, безусловно, является весьма актуальной. Этот вывод подтверждается также неоднократным цитированием (согласно Web of Science) работы диссертанта, т.е. интересом к разработанным методам со стороны исследователей из разных стран.

В первой главе приведен обзор основных кинетических уравнений, описывающих процессы агрегации и дробления одно- и многокомпонентных систем частиц в рамках подхода Смолуховского в форме дифференциальных и интегро-дифференциальных уравнений, включая перечень основных точно решаемых случаев (что важно с точки зрения тестирования новых алгоритмов).

Вторая глава диссертации объединяет первую – обзорную – часть, относящуюся к известным численным подходам к решению систем уравнений Смолуховского и вторую, представляющую оригинальные результаты автора. Такая структура вполне оправдана изложением, так как

она представляет последовательную картину построения алгоритмов в ее развитии и дает справочные данные необходимые для оценки новизны предлагаемых подходов, как в смысле введения используемых обозначений и объектов, так и справки по быстрдействию существующих алгоритмов. Вторая половина главы описывает новый метод ускорения численного решения уравнений Смолуховского путем представления матриц в виде с разделяющимися переменными и специального матричного представления, ускоряющего вычисление интегралов методом трапеций для последующего применения схемы «предиктор-корректор». Интересной и важной особенностью предлагаемого подхода является единообразное представление линейного и нелинейного интегральных членов, важное, в частности, для параллелизации вычислений, что и продемонстрировано на ряде упрощенных модельных тестовых задач процессов агрегации и фрагментации. Весьма полезной стороной изложения соответствующих расчетов является то, что алгоритм пошагово прокомментирован, причем на различных уровнях описания – концептуально-словесном, математическом и алгоритмическом.

Третья глава посвящена теоретическим оценкам рангов разложений с разделенными переменными, которые являются основным преимуществом метода, представленного к защите. Для ряда распространенных в силу их практической важности получены как оценки числа операций, обобщенные в том числе и на многокомпонентные системы, а также оценка ранга для решения задачи Коши с константным ядром, которое верифицируется в силу существования известного точного аналитического решения. Следует положительно также отметить анализ практических закономерностей ранговых аппроксимаций, выходящих за рамки абстрактно-формальных точных оценок, что существенно важнее для будущего практического применения результатов диссертации.

Четвертая глава посвящена описанию разработанного программного комплекса и результатов проведенного с его помощью численного моделирования. Следует положительно отметить тот факт, что защищаемый

комплекс программ размещен в открытом доступе с использованием Git-технологии, т.е. доступен широкому кругу заинтересованных лиц, что должно способствовать популяризации этого, безусловно, перспективного подхода, а также то, что данный комплекс программ отлично документирован в начале этой главы. Вторая часть главы приводит непосредственно результаты численного моделирования с использованием этого комплекса программ на основе математических методов и моделей, представленных в предыдущих главах. Результаты для первой – упрощенной с физической точки зрения – тестовой модели убедительно показывают превосходство разработанного автором метода в скорости расчета при сохранении его точности, что продемонстрировано в явной форме таблицами со сравнениями с результатами аналитических и известных надежных (более медленных) вычислительных схем. Наиболее же интересными и важными результатами представляются расчеты локальной модели почвенной агрегации: во-первых, задача поставлена релевантно с физической и биологической точек зрения и смысл входящих в нее параметров адекватно обсужден (в первой главе), во-вторых, представленное в четвертой главе описание схемы исследования модели также разумно учитывает взаимодействие микробиологической и кинетической составляющих процесса и, наконец, представленные в работе результаты моделирования выглядят разумными и обоснованными с этих точек зрения. Завершающие главу результаты тестирования алгоритма для многокомпонентных моделей для исключительно большого числа частиц также производят большое впечатление в части ускорения процесса счета.

Вместе с этим, к представленному материалу имеется ряд вопросов, относящихся, в основном к постановке физических задач, моделирование которых проводится в данной работе:

- 1) модель, названная «моделью агрегации и агломерации в кольцах Сатурна» с физической точки зрения является чересчур переупрощенной (toy model в английской терминологии) с точки

зрения именно астрофизической задачи, так как микроструктура планетарных колец существенно зависит от комбинации гравитационных эффектов (кеплеровских орбит частиц, расстояний до планеты, самогравитации локальных облаков частиц и т.п.), конечности и размеров частиц, дифференциального вращения и нецентральности столкновений (см. Longaretti P.Y. *Icarus* **81** (1989) 53-71; Cuzzi J.N. *et al. Science* **327** (2010) 1470-1475) – эффектов, которые совершенно не учтены в решаемом уравнении Смолуховского, которое играет роль просто некоей абстрактной тестовой задачи;

- 2) ядро (3.1) названо не только баллистическим (что совершенно правильно, т.к. туда входят характерные скорости баллистического движения и выраженное через них сечение рассеяния), но и броуновским, что вызывает сомнения, так как в исследуемых задачах не рассматривается стохастическое случайное блуждание и его характеристики не входят в ядро;
- 3) интеграл (2.9) имеет вид свертки, которую можно вычислить с использованием быстрого преобразования Фурье (FFT), что в принципе дает ту же оценку $O(N \log N)$ – стоило бы подчеркнуть особенности разложения (2.10)-(2.14), которые дают преимущества для расчета.

Однако, эти вопросы носят частный характер и ни в коей мере не снижают общего весьма положительного впечатления от диссертационной работы, которая представляет собой научное исследование высокого уровня во всех трех компонентах специальности (математическое моделирование, численные методы и комплексы программ).

Основные результаты диссертации, соответствующие ее теме, изложены в научных статьях, число которых более чем соответствует требованиям ВАК РФ по отношению к кандидатским диссертациям, включая две статьи в *Journal of Computational Physics*, который относится к числу ведущих мировых научных журналов по данному научному направлению

(первый квартиль Web of Science); апробация результатов и выводов подтверждена представлением докладов на целом ряде научных конференций, включая международные, тематика которых полностью отвечает научному направлению диссертационной работы.

Автореферат адекватно и достаточно полно отражает содержание диссертации.

Таким образом, считаю, что данная диссертационная работа является законченным научным исследованием, представляющим решение сложной задачи в области математического моделирование и разработки программ, реализующих новые численные методы и содержит результаты, представляющие значительный теоретический и практический интерес. Работа полностью отвечает требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденном постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор, Матвеев Сергей Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент,

доктор физико-математических наук, доцент,
заведующий отделом теоретической физики
Научно-исследовательского центра физики
конденсированного состояния,
профессор кафедры физики и нанотехнологий
Курского государственного университета



Постников Евгений Борисович,

Подпись Постникова Е.Б. заверяю
Проректор по научно-исследовательской работе
и международным связям КГУ



Логинов Сергей Павлович

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Курский государственный университет" (ФГБОУ ВО "Курский государственный университет").

Почтовый адрес: ул. Радищева, 33, Курск, 305000

Телефон: +7 (4712) 51-04-69

Электронная почта: postnicov@gmail.com сайт: <http://rccmp.kursksu.ru/postnikov>