

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

кандидата физико-математических наук Сорокина Андрея Александровича
на диссертационную работу 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 С. А. Матвеева “Быстрые методы численного решения уравнений типа Смолуховского” посвящена разработке и реализации быстрых методов численного решения уравнений математических моделей процессов коагуляции и дробления, записанных в классе уравнений типа Смолуховского. Предложенные алгоритмы базируются на новых идеях применения малоранговых матричных аппроксимаций и быстрых алгоритмов линейной алгебры для ускорения расчетов по времени для классических разностных схем. В работе проведено достаточное количество численных экспериментов, демонстрирующих возможности применения новых численных методов для решения актуальных задач математического моделирования в различных областях прикладных исследований.

Актуальность работы. Процессы коагуляции и дробления вещества лежат в основе широкого класса физических явлений и целого ряда физических процессов. К сожалению, лишь в очень немногих случаях известны аналитические точные решения уравнений, используемых для описания данных процессов. В остальных случаях необходимо использование надежных и эффективных численных методов получения приближенных решений рассматриваемых задач. Использование классических разностных схем, как правило, ограничено их высокой алгоритмической сложностью даже в случае исследования задачи Коши для однокомпонентного уравнения Смолуховского. В результате, во многих случаях используются стохастические методы Монте Карло, особенно для многокомпонентных аэрозолей. Однако эти методы, в свою очередь, требуют больших затрат машинного времени, что часто не позволяет находить численные решения с приемлемой точностью.

Предложенные автором алгоритмы позволяют вернуть конкурентоспособность в этой области моделирования классическим разностным методам, а также дают исследователям дополнительный инструмент численного исследования для рассматриваемого класса задач, в особенности, для уравнений динамики многокомпонентных объектов.

Научная новизна. Результаты, полученные в диссертационной работе, являются новыми. Представленный метод решения является первым в России для рассматриваемого класса задач агрегации и фрагментации полидисперсных частиц. Он также применим и для более широкого класса задач, в которых рассматривается взаимодействие большого числа локализованных объектов с различными свойствами. Кроме того, разработанный в данной работе математический аппарат и численный алгоритм может быть полезен и при решении больших систем классических разностных уравнений для сопряженных задач многомерной тепло и гидродинамики с физико-химическими превращениями.

Практическая значимость. Автором разработан программный комплекс, с помощью которого получены численные решения систем уравнений для всех задач, рассмотренных в работе. Эффективность программной реализации показана на результатах проведенного тестирования на современном суперкомпьютере. Разработанные численный алгоритм и программный код позволяют проводить численные эксперименты по исследованию поведения многомасштабных (multi-scale) физических моделей для полидисперсных систем, которые было бы затруднительно выполнить с использованием обычного приближения метода фракций. Например, для следующих задач математического моделирования из очень разнонаправленных прикладных областей:

1. Определение механизмов образования планетарных колец Сатурна и других планет солнечной системы,
2. Моделирование поведения многокомпонентных аэрозолей продуктов деления в защитной оболочке АЭС и прогнозирование источника и состава радионуклидов при непредвиденных авариях на АЭС,
3. Динамика распространения и прогнозируемое изменение свойств различных антропогенных объектов в земной атмосфере,
4. Обоснование радиационной безопасности работ при обращении с радиоактивными отходами и отработавшим ядерным топливом,
5. Развитие новых технологий в таких отраслях как химическая и электронная промышленность, порошковая металлургия,
6. Моделирование биохимических процессов на уровне клетки, где процессы коагуляции и спонтанного деления играют определяющую роль,
7. Моделирование неравновесной кинетики больших химических систем с сотнями и тысячами элементов, для которых образование молекул («коагуляция мономеров») и их диссоциация («фрагментация на несколько элементов») составляет основное содержание химического процесса,
8. Наконец, прогнозирование поведения отдельных социальных групп в масштабах макросистемы и многофакторное недетерминированное взаимодействие различных экономических объектов, где образование больших корпораций («коагуляция») и банкротство отдельных фирм («фрагментация») являются основными элементарными актами эволюции экономической системы.

Содержание работы. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и списка публикаций автора. Общий объем диссертации 117 страниц, включая 16 рисунков, 18 таблиц и список литературы из 88 наименований.

Во введении раскрывается актуальность научной темы, формулируются цели и задачи работы, представляются научная новизна и практическая значимость работы, сообщается о публикациях и докладах по теме диссертации.

В первой главе диссертации приводится подробный обзор уравнений рассматриваемых моделей, приводятся известные аналитические решения и известные сведения о разрешимости поставленных задач.

Во второй главе диссертации приводится краткий обзор сведений о малоранговых матричных и тензорных разложениях, а также анализ нескольких существующих методов численного решения уравнений рассматриваемых моделей. Далее в этой главе автором предлагается новая эффективная реализации схемы предиктор-корректор решения задачи Коши для непрерывного уравнения коагуляции Смолуховского, эффективная схема численного решения уравнений модели процессов агрегации и фрагментации в кольцах Сатурна, локальной модели процессов агрегации в профиле почвы, процесса необратимой коагуляции и высокоэффективная схема численного решения многокомпонентного уравнения Смолуховского.

В третьей главе приводятся новые теоремы с оценками малоранговых разложений нескольких классов ядер коагуляции, а также одного класса аналитических решений задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с постоянным ядром коагуляции. Эти доказывают существование широкого класса задач, для решения которых эффективность предложенных методов будет очень высокой.

В четвертой главе приводится описание созданного программного комплекса, а также результаты большого количества тестовых численных экспериментов. В частности, в этой главе приведены результаты подробного сравнения эффективности и точности предложенных алгоритмов с их исходной обычной реализацией, а также с одним из известных стохастических методов Монте Карло. Проведенные расчеты подтвердили эффективность разработанных методов решения, в частности, для рассмотренных задач показано увеличение

скорости счета в тысячу раз без потери точности решения. Отметим в этой связи, что в последние 10 лет усилия многих научных коллективов направлены на развитие эффективных методов расчета с использованием алгоритмов параллельных вычислений. Поэтому отличительной особенностью результатов этой главы является доведение разработанных математических методов до практической реализации в виде расчетных алгоритмов и программного модуля, адаптированного для реализации параллельных алгоритмов расчетов на современных суперкомпьютерах.

В заключении формулируются основные результаты диссертационной работы.

Степень обоснованности и достоверности научных положений и выводов диссертационной работы подтверждается использованием строгих математических выводов со ссылками на статьи других авторов, сопоставлением полученных результатов с результатами расчетов с использованием других методов, а также и результатами многочисленных вычислительных экспериментов для тестовых задач. Результаты исследования представлены в 5 работах, удовлетворяющих требованиям ВАК: 2 из которых входят в перечень ВАК, а 3 статьи опубликованы в журналах, индексируемых в международных системах цитирования Scopus и Web of Science. Результаты диссертационной работы докладывались на российских и международных конференциях.

Новые научные результаты, полученные автором, следующие:

1. Предложен и разработан новый численный метод решения кинетических уравнений коагуляции и фрагментации для однокомпонентных частиц на основе малоранговой аппроксимации многомерной матрицы (главы 2 и 3);
2. Предложен комбинированный метод решения многомерных уравнений коагуляции с одновременным использованием малоранговой аппроксимации ядра коагуляции и явной разностной схемы предиктор-корректор для решения в формате тензорного произведения с целью ускорения решения по временному шагу и приведена оценка уменьшения сложности выполнения одного шага интегрирования по времени (глава 2);
3. Проведена теоретическая оценка рангов ТТ-разложений для типичных ядер коагуляции однокомпонентных и двухкомпонентных частиц и показана эффективность предлагаемого метода для широкого класса физических задач (глава 3);
4. Предложена схема распараллеливания быстрого алгоритма решения уравнений коагуляции для однокомпонентных моделей с целью ее использования в программном коде при расчетах на кластерах (глава 4);
5. Проведено сравнение численных результатов с использованием новых методов решения с результатами, полученными для метода Монте-Карло и обычной разностной схемы и показано увеличение эффективности расчетов до тысячи раз для рассмотренных примеров (глава 4);
6. С прикладной точки зрения, основным результатом является доказанная в диссертации возможность решения очень больших систем кинетических уравнений (более десятка миллионов) за разумное время и с прогнозируемой точностью, что дает возможность использовать в дальнейшем предложенные методы и алгоритмы для моделирования поведения многокомпонентных частиц, а также сопряженных многомасштабных задач (главы 2, 3 и 4).

Соответствие содержания диссертации специальности. Содержание и результаты работы полностью соответствуют паспорту специальности 05.13.18 – “Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ”, поскольку основные результаты работы получены для математической модели взаимодействия полидисперсных частиц с разработкой и апробацией нового численного алгоритма, подтвержденного результатами расчетов с использованием разработанного автором диссертации оригинальным программным кодом с применением методов распараллеливания для расчетов на современных суперкомпьютерах и кластерах.

Замечания по работе. По содержанию работы и обоснованности полученных результатов существенных замечаний нет. Однако представленная на отзыв работа не свободна от некоторых, по мнению оппонента, недостатков, в частности:

1. Возможно материал главы 3 следовало бы изложить более подробно и с большим количеством примеров, в частности, для континуального ядра коагуляции, «турбулентного» или столкновения заряженных частиц с целью показать применимость предложенного метода для действительно широкого класса прикладных задач.
2. Результат сравнения со стохастическим подходом сильно зависит от используемого для сравнения метода Монте-Карло и типа рассматриваемой для этого физической задачи. Более того, применение метода Монте-Карло не ограничивается только функцией расчета, а скорее направлено на моделирование таких качественных особенностей физического процесса, которые не «улавливаются» детерминистическими подходами.
3. Недостаточно четко в диссертации отражена линия, что достоинство нового метода решения состоит не только в возможности быстро и точно решать большие системы обыкновенных дифференциальных уравнений (как, например, для коагуляции и фрагментации), а также в эффективном методе решения больших матричных уравнений. А значит и применимости предложенных методов «быстрой алгебры» для решения различных трехмерных задач с физико-химической кинетикой на стадии разностных уравнений, когда основной массив элементов матрицы связан с пространственной сеткой, а не с количеством динамических переменных. Хотя, возможно, это только частное мнение оппонента.

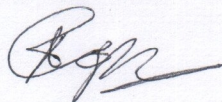
Общая оценка работы. Отмеченные недостатки носят частный характер и не снижают ценности работы и обоснованности выводов и защищаемых положений. Автореферат соответствует содержанию диссертации. Соискатель продемонстрировал высокий уровень квалификации, глубокие знания предмета исследования и научной литературы.

Диссертационная работа Матвеева С.А. является законченным научным исследованием и удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям, выполненным по специальности 05.13.18 – “Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ”, соответствует критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Официальный оппонент:

Кандидат физико-математических наук (01.02.05 – “Механика жидкостей, газа и плазмы”), старший научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки “Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской Академии Наук” (ФГБУН ИБРАЭ РАН)
Адрес организации: 115191, Большая Тульская ул., 52, Москва
E-mail: sorokin@ibrae.ac.ru

7 февраля 2018 г.



Сорокин Андрей Александрович

Личную подпись к. ф.-м. н. Сорокина Андрея Александровича заверяю

Ученый секретарь ФГБУН ИБРАЭ РАН

к.т.н.



Калантаров В. Е.