

УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального  
государственного бюджетного  
учреждения науки

Института Проблем Безопасного  
Развития Атомной Энергетики  
Российской Академии Наук,

д.ф.-м.н. Матвеев Л. В.

« 27 » марта 2019 года



### ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Стефонишина Даниила Александровича «Тензорные разложения и их применение к решению систем кинетических уравнений с учетом множественных столкновений частиц», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

#### **Актуальность темы диссертационной работы**

Диссертационная работа посвящена разработке и программной реализации эффективных алгоритмов организации вычислений для численного решения систем кинетических уравнений типа уравнений Смолуховского, описывающих процесс агрегации вещества при учете множественных столкновений частиц. Такие уравнения описывают математические модели процессов взаимодействия огромного числа хаотически движущихся частиц сложной пространственно-однородной физической системы и применяются для описания различных природных явлений и технологических процессов: динамики аэрозолей в атмосфере, описания процессов агрегации и фрагментации вещества в планетных кольцах, роста полимеров, кинетики белков-прионов и других. В указанных моделях обычно учитываются только бинарные столкновения частиц. Указанное приближение справедливо, поскольку одновременное столкновение сразу нескольких частиц не только значительно усложняет алгоритм моделирования, но и во многих случаях действительно является редкими.

Однако в реальных физических процессах, тем не менее, могут иметь место и одновременные соударения сразу многих элементов системы. Эффект таких взаимодействий сказывается на эволюции системы, например, когда продукты множественных столкновений являются существенно более стабильными, чем в результате бинарных столкновений. При этом если свойства систем двухчастичных кинетических уравнений достаточно хорошо изучены, то существенно нелинейный вид многочастичных систем затрудняет их исследование. При учете множественных взаимодействий частиц прямое применение классических разностных методов представляется невозможным в связи с экспоненциальным

ростом сложности шага при росте числа задействованных уравнений, что объясняет актуальность задачи построения эффективных алгоритмов организации вычислений.

### **Цель диссертации**

Основная цель – построение эффективных алгоритмов организации вычислений при численном решении задач Коши для многочастичных кинетических уравнений типа уравнений Смолуховского. Указанные алгоритмы основаны на использовании малоранговых аппроксимаций многомерных матриц, а также быстрых алгоритмов линейной алгебры. Также целью работы является доказательство корректности постановки рассматриваемой задачи Коши для обоснования применимости конечно-разностных методов. Кроме того, целью работы является теоретическое исследование предложенных алгоритмов, реализация разностных методов с их использованием в виде комплекса программ моделирование реальных физических процессов, допускающих множественные столкновения частиц, при помощи разработанного программного комплекса.

### **Содержание диссертации**

Во **введении** сформулированы актуальность темы диссертации, цели и задачи исследования, научная новизна, практическая и теоретическая значимость работы.

В **первой главе** излагаются предположения о рассматриваемых физических процессах. Приводится постановка задачи об эволюции системы для неупругих сталкивающихся частиц, допускающих множественные взаимодействия. В связи с отсутствием известного аналитического решения в общем случае рассматриваются конечно-разностные методы решения указанной задачи. Обсуждается сложность численного решения в приведенной постановке и методы ее снижения.

Во **второй главе** доказывается корректность постановки задачи Коши для многочастичных кинетических уравнений агрегации типа уравнений Смолуховского при ограниченных элементах массивов кинетических коэффициентов. Также приводятся утверждения о наличии свойств аппроксимации и устойчивости разностной схемы Рунге-Кутты второго порядка, гарантирующие сходимость ее решения к решению задачи Коши.

В **третьей главе** приводятся необходимые сведения из теории малоранговых тензорных аппроксимаций. Описываются разработанные последовательные и параллельные эффективные алгоритмы ускорения вычислений в разностной схеме предиктор-корректор на основе применения малоранговых тензорных аппроксимаций массивов кинетических коэффициентов и быстрых алгоритмов линейной алгебры. Также, третья глава содержит теоретические оценки рангов канонических разложений и разложений в формате тензорного произведения для некоторых модельных массивов кинетических коэффициентов.

В **четвертой главе** излагается описание и результаты тестирования программного комплекса, реализующего разработанные в настоящей работе эффективные методы организации вычислений в схеме предиктор-корректор. Производительность новых алгоритмов, включающих тензорные разложения для ускорения схемы предиктор-корректор, продемонстрирована в сравнении с наивной реализацией разностной схемы. Кроме того, представлены результаты тестирования параллельной версии алгоритмов на масштабируемость. Помимо этого, приводится ряд результатов для моделирования процесса агрегации вещества.

В **заключении** перечисляются основные результаты работы, а также направления, в которых могут быть продолжены проведенные исследования.

Общий объем диссертационной работы составляет 92 страницы, включая 8 описаний алгоритмов, 10 рисунков, 12 таблиц и список литературы из 71 наименования.

**Теоретическая ценность** работы заключается в построении и оценке сложности эффективных алгоритмов организации вычислений для численного решения задач Коши для систем кинетических уравнений типа уравнений Смолуховского, допускающих множественные, в частности тройные, столкновения частиц.

**Практическая ценность** работы состоит в программной реализации разностных методов с предложенными эффективными алгоритмами организации вычислений на языке C/C++ с использованием технологий параллельного программирования *OpenMP* и *MPI*.

#### **Замечания по диссертации**

1. Возможно, что материал главы 4 следовало бы изложить более подробно в части примеров для ядер агрегации, например, континуального, с целью показать применимость предложенного метода для широкого класса прикладных задач.
2. Из текста диссертации, к сожалению, явно не следует применимость предлагаемого метода для решения задач агрегации для многокомпонентных частиц, когда число уравнений определяется фактором  $N^M$ , где  $N$  число мономеров в частице и  $M$  число возможных компонентов в составе частиц.
3. Подписи к некоторым рисункам представляются не совсем удачными. Например, на рисунке 3 автореферата приведено обозначение «тернарная» агрегация, что по смыслу соответствует термину на русском «тройная» агрегация.

Однако, отмеченные недостатки не снижают научной и практической значимости полученных результатов и общей положительной оценки работы.

#### **Заключение ведущей организации**

В работе Д.А. Стефонишина предложены эффективные вычислительные алгоритмы, позволяющие осуществлять сопоставимо меньшее количество вычислений на каждом шаге разностной схемы по сравнению с лобовым использованием разностных схем. Содержание работы полностью соответствует паспорту специальности (05.13.18), так как в работе разработаны новые алгоритмы для численного решения задач многочастичной агрегации частиц и их программная реализация, а также реализовано математическое моделирование процессов агрегации. Результаты диссертации могут быть использованы, например, при моделировании поведения аэрозолей продуктов деления в помещениях и окружающей среде.

**Стиль и оформление.** Диссертация написана грамотным языком, снабжена достаточным количеством таблиц и рисунков.

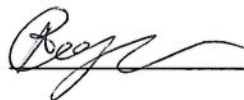
**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в 3 печатных работах, из них 2 в журналах из перечня ВАК и 1 статья в журнале, индексируемом в международной системе цитирования Scopus.

Содержание автореферата в полной мере отражает основные положения, выводы и результаты диссертации.

Работа является законченным научным исследованием, выполнена автором самостоятельно и удовлетворяет требованиям ВАК, включая пп. 9–14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней ВАК». Соискатель Стефонишин Д.А. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18.

Отзыв на диссертацию подготовлен на основании заключения, сделанного в результате обсуждения диссертации и автореферата на заседании отделения «Разработка программного обеспечения для анализа безопасности АЭС» ИБРАЭ РАН, который включает в себя отделы «Моделирования физических процессов» и «Интегрированных программных комплексов», протокол заседания № 3 от 21 марта 2019 года.

Сорокин Андрей Александрович  
кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник ИБРАЭ РАН



Подпись Сорокина Андрея Александровича заверяю

Ученый секретарь ФГБУН ИБРАЭ РАН, к.т.н. Калантаров В. Е.

к.т.н. Калантаров В. Е.



**Полное наименование организации:** Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук

**Адрес:** 115191, Москва, Большая Тульская, д. 52.

**Телефон:** +7 495 955-22-86

**Сайт организации:** <http://www.ibrae.ac.ru>

**Электронная почта:** [pbl@ibrae.ac.ru](mailto:pbl@ibrae.ac.ru)