

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

о диссертации

Стефонишина Даниила Александровича

на тему «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»

Диссертационная работа посвящена разработке и программной реализации эффективных алгоритмов организации вычислений для численного решения систем кинетических уравнений, описывающих процесс агрегации вещества при учете множественных столкновений частиц. Главным образом рассматриваемая кинетика относится к пространственно однородному процессу коагуляции в дисперсных системах, которому посвящена обширная библиография в течение ста лет. Процесс коагуляции оказывает воздействие на рост кристаллов в растворах, рост газовых пузырьков и пор в твердом теле. Серьезное влияние оказывает коагуляция продуктов горения топлива на тягу реактивных двигателей. Поэтому актуальность темы не вызывает сомнений.

Целью работы является: построение эффективных алгоритмов, снижающих сложность вычислений для моделирования процессов кратных слияний частиц, теоретическое исследование предложенных алгоритмов, реализация разностных методов на основе разработанного программного комплекса.

В плане решения данной задачи были разработаны новые алгоритмы, в том числе приводятся теоретические результаты, обосновывающие эффективность алгоритмов для ряда модельных задач многочастичной агрегации. Разностный метод с использованием разработанных алгоритмов реализован в виде комплекса программ. Точность разностного метода протестирована для модельной задачи с известным аналитическим решением. Для параллельной реализации разработанных алгоритмов приведены результаты вычислительных экспериментов на масштабируемость. Предложенные в работе эффективные алгоритмы организации вычислений позволяют качественно расширить круг задач, доступных для детального изучения методами математического моделирования. Разработанные методы основаны на эффективных реализациях операций: итерированных свёртки и умножения на вектор.

**В качестве основных результатов, выносимых автором на защиту, можно указать следующие.**

Основной результат — разработаны эффективные алгоритмы организации вычислений и программный комплекс для решения уравнений

математических моделей процессов агрегации, допускающих многочастичные столкновения.

В частности,

- обоснованы эффективные последовательные и параллельные алгоритмы, снижающие

сложность вычисления правой части для систем уравнений типа уравнений

Смолуховского, допускающих множественные взаимодействия агрегатов;

- разностные методы с использованием разработанных алгоритмов ускорения реализованы

в виде программного комплекса, проведён ряд численных экспериментов,

иллюстрирующих эффективность и точность таких методов;

- с применением программного комплекса получены новые результаты математического моделирования физических процессов многочастичной агрегации;

- проведено доказательство корректности постановки задачи Коши для уравнений многочастичной агрегации.

**Актуальность темы исследования.** В реальных физических процессах в очень плотных средах (например, при ядерных взрывах, при явлениях полимеризации в химических реакторах, при действии источников частиц в стационарных коагулирующих системах) могут иметь место одновременные соударения многих элементов системы. Эффект таких взаимодействий существенно сказывается на эволюции системы. В частности, в математическом плане это связано с разрывным поведением оператора столкновений частиц в норме сохранения, которое даже в случае бинарных слияний приводит к переходу соотношений сохранения в диссипацию. Поэтому тема диссертационного исследования Д. А. Стефонишина, несомненно, актуальна.

Основные результаты, представленные автором в научных публикациях, составляющих предмет исследований диссертационной работы, состоят в следующем:

1) Построен алгоритм ускорения численной схемы предиктор-корректор при использовании предопределённых канонических разложений для массивов кинетических коэффициентов в случае учёта одновременных трехчастичных соударений; разработана программная реализация вычислительной схемы с использованием этого алгоритма и проведены вычислительные эксперименты, подтверждающие возможность практических расчетов для задачи многочастичной агрегации.

2) Предложен алгоритм ускорения численной схемы предиктор-корректор при использовании тензорных аппроксимаций ТТ-разложением массивов кинетических коэффициентов, разработана программная реализация схемы и выполнены вычислительные эксперименты.

3) Предложена процедура вычисления главных рангов специальных полиномиальных матричнозначных отображений в связи с гипотезой о главном тензорном ранге трехмерных тензоров.

**Содержание диссертации.** Диссертационная работа состоит из введения, 4 глав, заключения и списка литературы.

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе излагаются предположения о рассматриваемых физических процессах. Приводится постановка задачи об эволюции системы неупруго сталкивающихся частиц, допускающих мгновенные многократные аддитивные слияния сталкивающихся масс, кратных некоторой минимальной положительной величине. Такие процессы слияния (коагуляции или агрегации), могут быть описаны эвристической бесконечномерной системой обыкновенных дифференциальных уравнений, аналогичных классической модели теории коагуляции Смолуховского для дискретных масс (1916 г.)

$$\frac{d\mathbf{n}(t)}{dt} = \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{n}](t),$$

$$\mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{n}] \equiv \{\mathcal{P}^{(d)} + \mathcal{Q}^{(d)}\}[\mathbf{n}], \quad 2 \leq d \leq D,$$

где операторы рождения и гибели частиц заданы следующими соотношениями на основе гипотезы локального хаоса:

$$\mathcal{P}_k^{(d)}[\mathbf{n}] := \frac{1}{d!} \sum_{|i_d|=k} C_{i_d}^{(d)} \cdot n_{i_1} \cdot n_{i_2} \cdot \dots \cdot n_{i_d},$$

$$\mathcal{Q}_k^{(d)}[\mathbf{n}] := -\frac{n_k}{(d-1)!} \sum_{i_{d-1}>0} C_{i_{d-1},k}^{(d)} \cdot n_{i_1} \cdot n_{i_2} \cdot \dots \cdot n_{i_{d-1}},$$

$$k \in \mathbb{N}, \quad 2 \leq d \leq D.$$

Рассматривается конечно-разностный метод решения указанной задачи на основе конечномерной разностной схемы предиктор-корректор, формально имеющей второй порядок аппроксимации на решениях исходной задачи Коши класса  $C^{(3)}$ . При этом сеточная функция

$$\mathbf{n}_N^{(\alpha)} := \left[ n_1^{(\alpha)}, n_2^{(\alpha)}, \dots, n_N^{(\alpha)} \right]^T$$

определяется соотношениями

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{n}_N^{(0)} = [n_1^{(0)}, n_2^{(0)}, \dots, n_N^{(0)}]^T, \\ \mathbf{n}_N^{(\alpha+1/2)} = \mathbf{n}_N^{(\alpha)} + \frac{\Delta t}{2} \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{n}_N^{(\alpha)}], \\ \mathbf{n}_N^{(\alpha+1)} = \mathbf{n}_N^{(\alpha)} + \Delta t \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{n}_N^{(\alpha+1/2)}]. \end{array} \right.$$

Параметр  $d \leq D$  характеризует кратность мгновенных слияний частиц, задаваемых операторами столкновений  $\mathcal{S}^{(d)}$ . Оценивается экспоненциальная сложность вычисления правой части этих равенств и способы снижения сложности вычислений.

Во второй главе доказываемся корректность постановки задачи Коши для кинетических уравнений, постулированных автором в первой главе. Предполагается неотрицательность и ограниченность интенсивностей слияния частиц, а также неотрицательность и ограниченность нормы начальных данных в пространстве  $l_1$  (с различными весами). Для этих входных данных задача корректна по времени «вперед» за счет локальной Липшиц-непрерывности правой части кинетического уравнения, наследующегося свойства неотрицательности решения и априорной оценки нормы, ограниченной в силу свойств сохранения и диссипации оператора столкновений.

Аккуратно исследован класс конечномерных («усеченных») задач, для которых в условиях выделенного класса корректности бесконечномерной задачи доказываемся сходимость метода «предиктор-корректор». Обоснована сходимость в норме непрерывных отображений  $t \mapsto l_1$  конечномерных аппроксимаций к решению исходной бесконечномерной задачи на основе единственности решения исходной задачи Коши и принципа компактности для семейства непрерывных отображений (теоремы Арцела).

Третья глава посвящена теории малоранговым тензорным аппроксимациям, связанным с вычислениями операторов для модели многократных слияний частиц. Основную сложность в вычислении правой части рассматриваемой автором разностной схемы «предиктор-корректор» составляют затраты на вычисление компонент оператора рождения частиц  $\mathcal{P}k$  для всех значений  $k$ , не превосходящих величины  $N$ . Описываются разработанные последовательные и параллельные эффективные алгоритмы ускорения вычислений в разностной схеме «предиктор-корректор» на основе применения рассмотренных малоранговых тензорных аппроксимаций массивов кинетических коэффициентов и быстрых алгоритмов линейной алгебры. Установлено, что одновременно для всех  $D-1 \leq k \leq N$  значение  $k$ -й компоненты оператора рождения при слиянии  $D$  частиц вычисляется в ходе

последовательного по  $\lambda$  применения дискретных сверток по модовому индексу  $i_\lambda$  и суммирования полученных результатов вдоль рангового индекса  $r_\lambda$ . Указанный вычислительный процесс реализуется за  $O(DN \log N R^2)$  арифметических операций. Автором получены теоретические оценки рангов канонических разложений и разложений в формате тензорного произведения для ряда модельных массивов интенсивностей слияний частиц (кинетических коэффициентов). Полученные теоретические оценки подтверждают эффективность разработанных методов организации вычислений и возможность их применения для приближенного решения рассматриваемого в диссертации Д.А.Стефонишина класса задач.

В четвертой главе излагается описание программного комплекса, реализующего разработанные автором методы организации вычислений в схеме «предиктор-корректор». Приводятся результаты вычислительных экспериментов для модельных задач, в том числе для задачи, описывающей процесс роста металлических наночастиц, в модели с так называемым «баллистическим» ядрам слияния. Для этих ядер приводятся значения максимальных рангов ТТ-аппроксимаций. Указанные ранги соответствуют теоретическим оценкам из главы 3 диссертационной работы.

Проведено сравнение скорости трехчастичных столкновений по сравнению с двухчастичными для характерных значений физических характеристик частиц. Выявлено, что вклад трехчастичных столкновений существенно возрастает с увеличением размера частиц. алгоритмы реализованы при использовании параллельной версии быстрого дискретного преобразования Фурье ClusterFFT из библиотеки Intel MKL.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

**Практически и теоретическая значимость 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. Разработанный программный комплекс позволяет проводить расчёты решения задачи Коши для кинетических уравнений, описывающих различные модели процесса многочастичной агрегации.

**Обоснованность и достоверность результатов диссертации.** Все положения и выводы диссертации достоверны и научно обоснованы. Обоснованность результатов подтверждена апробацией на международных научных конференциях, а также публикациями результатов исследования в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ. Достоверность полученных результатов основывается на использовании строгого математического аппарата, обеспечивается верификацией разностных схем в численных экспериментах на модельных задачах и близостью к результатам других исследований.

**Основные публикации.** Материалы диссертации опубликованы в 3-х печатных работах, 2 из которых входят в Перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК РФ для опубликования основных научных результатов диссертаций, 1 работа входит в международные базы данных и системы цитирования Scopus, Web of Science. Опубликовано 1 работа в сборниках тезисов и трудов конференций.

**Замечания.**

- 1) В работе не указаны ссылки на публикации, в которых представлены материалы главы 2.
- 2) В определении 1 на стр. 15 требование выполнения закона сохранения представляется излишним, т.к. для широкого класса задач, описывающих явление спонтанной полимеризации — это условие не выполняется, но корректность задачи имеет место.
- 3) В определении 10 на стр. 36, посвященном понятию устойчивости разностной схемы, странной выглядит зависимость коэффициента  $C$  от шага по времени. Обычно требуется равномерная ограниченность этой величины для шагов, не превосходящих некоторой положительной величины.
- 4) Второй порядок аппроксимации для схемы «предиктор-корректор» строго обоснован автором для конечномерных аппроксимаций, но для предельной бесконечномерной задачи этот вопрос в диссертации не обсуждается.

**Заключение о диссертации.** Данная диссертация представляет собой целостное научное исследование на актуальную тему, в котором получен ряд новых результатов по математическому моделированию. Результаты, полученные в диссертации Стефонишиным Даниилом Александровичем, являются результатами высокого научного уровня и представляют собой научную ценность.

Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации.

На основе вышеизложенного считаю, что диссертационная работа Стефонишина Даниила Александровича на тему «Тензорные разложения и их применение к решению систем кинетических уравнений с учетом множественных столкновений частиц» удовлетворяет всем требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

наук по специальности 05.13.18 -«математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

**Официальный оппонент -  
доктор физико-математических наук  
(специальность 05.13.18 - «математическое моделирование, численные  
методы и комплексы  
программ»), профессор**

**В.А.Галкин**

628412, Ханты-Мансийский автономный округ, гор. Сургут, пр.  
Ленина, 1, бюджетное учреждение высшего образования Ханты-  
Мансийского автономного округа – Югры «Сургутский государственный  
университет», профессор кафедры прикладной математики  
тел. (3462) 76 29 00, факс(3462) 76 29 29  
e-mail: val-gal@yandex.ru

**Подпись Галкина Валерия Алексеевича заверяю**

**Учёный секретарь, профессор**



**Н.В.Кузьмина**

**«01» апреля 2019 г.**