

ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
Тимохина Ивана Владиславовича
на тему: «Матрицы специального вида и быстрые алгоритмы при
численном решении уравнений типа Смолуховского»
по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ»

Актуальность темы исследования. Потребность в моделировании процессов агрегации частиц возникает в широком классе задач; особую сложность в этом контексте представляет моделирование систем с большим диапазоном масс частиц, поскольку классические методы предполагают в данном случае решение крайне больших систем дифференциальных уравнений. Таким образом, актуальной является задача построения приближенных численных методов для задач такого рода крайне высокой размерности.

Структура и содержание диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Общий объём диссертации составляет 108 страниц, включая 14 рисунков, 7 таблиц и список литературы из 53 наименований.

В первой главе (введении) приведена общая структура диссертации и обосновывается актуальность темы диссертации.

Во второй главе обсуждается классическая модель агрегации Смолуховского в виде формально бесконечной системы дифференциальных уравнений, а также описаны известный алгоритм быстрого вычисления правой части в конечной системе и его обобщение на билинейный вариант оператора.

В третьей главе предлагаются алгоритм вычисления произведения матрицы Якоби оператора агрегации и предобусловливатель для неё в

контексте метода Ньютона-Крылова для поиска стационарного распределения частиц по массам.

В четвёртой главе в том же контексте рассматривается применение к задаче тензорных методов; для скелета оператора агрегации получено представление в виде тензорного произведения. Приведены численные эксперименты.

В пятой главе автором описывается жадный алгоритм поиска подпространства малой размерности, содержащего траекторию решения системы, и продемонстрировано существенное ускорение вычислений за счёт использования найденного подпространства для аппроксимации решения.

В шестой главе схожая идея применяется для пространственно-неоднородной модели агрегации с переносом. Построен метод построения базиса, содержащего решение маломерного пространства параллельно с построением самого решения, эффективность которого показана на численных примерах.

В седьмой главе (заключении) описаны основные результаты работы.

Научная новизна. Для поиска стационарного состояния системы слипающихся частиц предложены алгоритм вычисления произведения матрицы Якоби оператора агрегации на вектор и предобуславливатель для неё. Для поиска траектории решения предложен жадный алгоритм поиска содержащего её маломерного подпространства в пространственно-однородном случае и алгоритм одновременного пересчёта содержащего решение маломерного подпространства и самого решения в пространственно-неоднородной ситуации.

Практическая значимость. Представленные алгоритмы для связанных с моделью агрегации частиц задач показывают в отдельных случаях существенное ускорение по сравнению с ранее известными.

Апробация. По теме диссертации опубликовано 4 работы в рецензируемых изданиях. Представлено 6 докладов на конференциях.

Выводы. Диссертация Тимохина И. В. представляет собой законченную работу, выполненную на высоком научном уровне.

Для некоторых связанных с агрегацией частиц задач автором предложены новые численные алгоритмы, а также получены некоторые вспомогательные наблюдения о характере решений.

Замечания.

1. В триаде А.А. Самарского «модель – алгоритм - программа», послужившей основой специальности 05.13.18, автор основной акцент ставит на численном методе, который, конечно же, является сердцевинной вычислительного эксперимента, однако важнейшая роль принадлежит также и «модели», «хорошая задача рождает метод». Во введении приводится содержательный обзор интересных приложений рассматриваемых математических формализаций, но какой – то конкретной нетривиальной задачи не описывается, работа содержит большое число модельных расчётов, в основном, для ядер с элементами вида $C_{ij} = (i/j)^a + (j/i)^a$, хотелось бы видеть физическую интерпретацию такого выбора, а также объяснения того, почему ядра эти – малоранговые, что является важным условием для экономичности развиваемых методов.
2. Пространственно–неоднородные задачи на порядок сложнее, что подчёркивает автор и начинает подход к ним с простого случая заданных скоростей, не имеющего, возможно, непосредственной физической интерпретации, но позволяющего ввести перенос в круг рассматриваемых явлений. Выбор делается в пользу традиционных конечно–разностных аппроксимаций, что, на мой взгляд, уступает применению методов частиц, особенно, в контексте микроскопических постановок, откуда и появляется уравнение Смолуховского как описание неупругих столкновений.

3. Развитие вычислительной техники требует распараллеливаемости и простоты алгоритмов, поэтому изощрённость представленных методов вызывает некоторые опасения.
4. В автореферате следовало бы, на мой взгляд, изложить основные результаты работы более лаконично и агрессивно.
5. Подкупает высокое литературное качество текста диссертации. Правда, нельзя не указать на некоторые огрехи редакционного характера: хотелось бы видеть более ясное изложение раздела 1.3; в 1.4 в 7-ой строке вместо «задаче» следует написать «задачи»; в 1.10 п.5 в «(не стационарной задаче)» закрывающую скобку надо сдвинуть на слово вперёд; в 2.2 и далее неудачно выражение «ядро C_{ij} »; в 3.2 якобиан обозначен через «J» - так же, как и источник частиц в уравнениях Смолуховского; на стр.33 даётся название итерационного метода GMRES без расшифровки; после формулы (4.9с) написано « $O(N^3)$ памяти».

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Таким образом, соискатель Тимохин Иван Владиславович 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,
профессор кафедры вычислительных методов
факультета вычислительной математики и кибернетики
ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени
М.В.Ломоносова»

Богомолов Сергей Владимирович

04.05.22

Контактные данные:

тел.: +7(495)939 2195, e-mail: bogomo@cs.msu.su

Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:

05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ»

Адрес места работы:

119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 52, факультет ВМК
ФГБОУ «Московский государственный университет имени
М.В.Ломоносова», факультет вычислительной математики и кибернетики
Тел.: +7(495)939 2195, e-mail: bogomo@cs.msu.su