

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. Тема, выбранная автором для работы, представляется исключительно актуальной в силу того, что уравнение Смолуховского может быть использовано для решения самых различных процессов, носящих случайный характер. В частности, в самом начале оно было сформулировано для кинетики столкновения атомов и молекул с образованием сложных молекулярных комплексов и частиц. С тех пор, уже более ста лет, для описания образования дисперсной фазы было предложено множество подходов - термодинамические, механико-статистические, кинетические. Эти подходы отличались как физическим смыслом, так и теми результатами, которые при этом были получены. Следует упомянуть схемы Сцилларда – Фаркаша, которые заложили основу создания теории нуклеации и алгоритмов расчёта. Затем Френкель и Зельдович существенно усовершенствовали эти подходы и получили результаты, которые были более близки к реальным ситуациям. В шестидесятых годах прошлого столетия появился подход Лоте и Паунда,

который внёс ещё больший разброс в теорию нуклеации. Таким образом удовлетворительной теории образования частиц из парообразного состояния до сих пор нет. Предлагаемые теории могут описывать процессы образования частиц только в узком диапазоне условий, не обладают универсальностью. Поэтому приходится возвращаться к истокам теории, где исходят из частоты столкновения между мономерами и частицами, учитывая при этом эффективность столкновения. Этому посвящена настоящая работа.

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) описывается общая структура диссертации и приводятся общие сведения о работе.

Во второй главе приведена классическая постановка задачи в виде бесконечной системы дифференциальных уравнений. Также рассмотрены уже известный алгоритм быстрого вычисления оператора агрегации на основе классических быстрых алгоритмов для свёрток, и обобщение алгоритма на случай билинейного оператора.

В третьей главе рассматривается алгоритм Ньютона-Крылова для задачи поиска стационарного распределения в модели агрегации с дроблением. Автором предложены алгоритм вычисления произведения матрицы Якоби оператора на вектор и предобуславливатель для означенной матрицы для использования в контексте Крыловских методов решения линейной системы; приведены численные эксперименты.

В четвёртой главе для той же задачи предлагается алгоритм на основе идеи тензоризации и тензорных разложений. Приведены общие сведения об используемых тензорных разложениях, аналитически получено представление такого рода для скелета оператора агрегации, приведены численные эксперименты.

В пятой главе рассматривается вопрос построения решения рассматриваемой системы дифференциальных уравнений в специально подобранных маломерных подпространствах и их построения. На численных примерах показано ускорение вычислений в такой постановке, предложен жадный алгоритм для построения подпространств.

В шестой главе те же идеи рассматриваются в контексте уравнения агрегации с переносом. Предложен метод пересчёта базиса подпространства и коэффициентов разложения решения по нему.

Седьмая глава представляет собой заключение, в котором кратко описаны основные результаты.

Научная новизна. Для матрицы Якоби оператора агрегации автором предложены алгоритм вычисления произведения её на вектор и предобуславливатель. Получено представление оператора агрегации в виде тензорного произведения. Показано существование содержащего решение маломерного пространства и возможность осуществления расчётов в нём в пространственно однородном и неоднородном случаях.

Практическая значимость. Для ряда связанных с моделированием агрегации частиц задач предложены численные алгоритмы, позволяющие в отдельных случаях получать решения существенно быстрее ранее известных методов.

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.

Автором представлены новые численные алгоритмы для ряда задач, связанных с моделированием агрегации частиц, а также некоторые вспомогательные эмпирические и теоретические наблюдения о свойствах их решений, которые существенным образом могут ускорить их получение и контролировать точность.

Замечания. Автор предлагает в своей работе решение систем дифференциальных уравнений с линейной шкалой размеров образующихся частиц. Это обеспечивает контролируемую точность полученных решений, в то же время этот подход представляется достаточно затратным. Следует заметить, что существует иной подход к решению проблемы – использовать логарифмическую шкалу размеров, что позволяет существенно сократить количество решаемых уравнений. Это позволяет на порядки сократить время нахождения решений и ресурсы. В таком подходе, конечно, имеется недостаток, связанный с потерей точности решения. Поэтому для того, чтобы убедиться в том, что выбранный автором подход имеет преимущества, необходимо было сравнить эти разные подходы к решению проблемы. Система, которую рассматривает автор, предполагает термодинамический предел – количество частиц и объём системы стремятся к бесконечности, а их отношение – концентрация остаётся конечной. В то же время существует подход, в котором число частиц может быть конечным, этот случай также не рассмотрен в литературном обзоре. Кроме этого, в литературном обзоре следовало бы больше внимания уделить имеющимся аналитическим решениям и асимптотикам.

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 общей физики
института общей профессиональной подготовки
ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский ядерный университет
„МИФИ“»

ЗАГАЙНОВ Валерий Анатольевич

Дата подписания 07.05.2022

подпись

Контактные данные:

тел.: +7(499)2371553, +7(903)7209853,

e-mail: vazagaynov@mephi.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом
защита диссертация:

02.00.04 — физическая химия

Адрес места работы:

115409, г. Москва, Каширское шоссе, д. 31,

ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский ядерный университет
„МИФИ“», институт общей профессиональной подготовки

Тел.: +7(499)2371553,

e-mail: vazagaynov@mephi.ru

Подпись сотрудника НИЯУ «МИФИ»

В. А. Загайнова удостоверяю:



Подпись удостоверяю
Заместитель начальника отдела
документационного обеспечения
НИЯУ МИФИ

В. М. Саломорова