

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

**Марченко Михаила Александровича**

«Численное статистическое моделирование кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц с использованием распределенных вычислений», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Диссертационное исследование посвящено вероятностным диффузионным моделям, связанным с оценкой функционалов, определяемых маловероятными событиями, состоящими в достижении траекториями диффузионного процесса заданных областей фазового пространства. Такие задачи традиционно сложны для численного анализа, так как методы, основанные на прямом моделировании траекторий, как правило, требуют значительных вычислительных затрат. При использовании специальных методов уменьшения трудоемкости важно исследовать их эффективность в зависимости от параметров задачи и алгоритма, применяя распределенные вычисления и параллельно реализуемые генераторы псевдослучайных чисел на суперкомпьютерных системах.

Для численного анализа процессов коагуляции в дисперсных системах, в частности, при образовании атмосферных аэрозолей, пламенном синтезе наноразмерных частиц, успешно применяются вероятностные модели, основанные на рассмотрении эволюции многочастичных ансамблей. Необходимость использования хорошо сбалансированных методов распараллеливания. В этой связи возникает задача оценки эффекта от распараллеливания при одновременном увеличении числа процессоров и числа частиц. В настоящее время только начинают ставиться вопросы разработки экономичных численных методов для решения нелинейного уравнения коагуляции с учетом внешнего поля скоростей, зависящего от пространственной переменной и размера (массы) частиц, и пространственно-неоднородного ядра коагуляции.

Однако к настоящему времени вопросы эффективной параллельной реализации трудоемких алгоритмов моделирования траекторий ветвящихся процессов исследованы недостаточно полно.

В приложениях численного статистического моделирования необходимо использовать параллельные генераторы псевдослучайных чисел, эффективно реализуемые на многопроцессорных компьютерах, и применять методологию распределенных вычислений, позволяющую осуществлять параметрический анализ вероятностных моделей (т.е. исследовать их характеристики, такие как погрешность оценки и трудоемкость вычислений, в зависимости от параметров задачи и алгоритма); требуется также наличие стандартных распараллеленных программных инструментов.

Автором выделены основные цели и задачи диссертационной работы:

1. Создание и исследование вероятностных моделей и реализующих их экономичных параллельных алгоритмов численного статистического моделирования кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц.

2. Разработка параллельного генератора псевдослучайных чисел и методики распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем, обеспечивающих возможность проведения коррелированных расчетов и параметрического анализа реализуемых вероятностных моделей.

3. Создание пакета параллельных прикладных программ для решения задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, и стандартных библиотек для реализации распределенного численного статистического моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах с различными архитектурами.

**Положения, выносимые на защиту:**

1. Разработка и исследование эффективных алгоритмов распределенного численного статистического моделирования на основе методов расщепления и весового моделирования для прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов, таких как вероятность недостижения границы области траекториями за заданное время и полная концентрация траекторий в точке за заданное время.

2. Разработка и исследование вероятностной модели для численного моделирования процесса пространственно-неоднородной коагуляции, основанной на применении пространственной регуляризации ядра коагуляции и метода мажорантной частоты, и реализующего ее параллельного алгоритма.

3. Разработка и исследование вероятностной модели для численного моделирования процесса развития электронных лавин в газе, основанной на использовании ветвящихся процессов, и реализующего ее параллельного алгоритма.

4. Разработка и исследование длиннопериодных параллельных генераторов псевдослучайных чисел и методики распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем.

5. Разработка имитационной модели исполнения программ распределенного численного статистического моделирования с целью получения оценок их масштабируемости на большое число процессоров.

6. Разработка универсальных библиотек распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем и параллельных прикладных программ для решения задач диффузии, коагуляции, переноса заряженных частиц и численного анализа стохастических осцилляторов.

В диссертации применяются: уравнение Колмогорова, учитывающее эволюцию ансамбля частиц; ветвящиеся процессы; теория интегральных уравнений второго рода; методы расщепления и весового моделирования с использованием приближения к функции ценности; различные методики распараллеливания; распределительный способ получения псевдослучайных чисел; имитационное моделирование на основе мультиагентного подхода.

В диссертационной работе М.А. Марченко разработаны и исследованы новые алгоритмы и программные средства суперкомпьютерного статистического моделирования кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, а именно:

- алгоритмы численного статистического моделирования на основе метода расщепления и весового моделирования с использованием приближения к функции ценности для прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов;
- вероятностная модель для численного моделирования процесса пространственно-неоднородной коагуляции, основанная на пространственной регуляризации ядра коагуляции и методе мажорантной частоты, и реализующий ее экономичный параллельный алгоритм;
- вероятностная модель для численного моделирования процесса развития электронных лавин в газе на основе ветвящихся случайных процессов и реализующий ее параллельный алгоритм для вычислительных систем с массивно-параллельной и гибридной архитектурами;
- распределительный способ получения базовых псевдослучайных чисел и методика распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем, обеспечивающие возможность проведения коррелированных расчетов и параметрического анализа реализуемых вероятностных моделей;
- имитационная модель исполнения программ распределенного численного статистического моделирования на многопроцессорных вычислительных системах с учетом их архитектуры;
- универсальные библиотеки PARMONC, PARMONC-PC и MONC для реализации распределенного численного статистического моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах, а также программный комплекс параллельных генераторов PARGENER-MC;
- пакет параллельных прикладных программ BOUNDARY-MC, COAGULATION-MC, CONCENTRATION-MC, ELSHOW и AMIKS для решения задач диффузии, коагуляции, переноса заряженных частиц и численного анализа стохастических осцилляторов.

Разработанные вероятностные модели кинетических процессов могут применяться при создании и обосновании методов численного решения прикладных задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц; созданные библиотеки и пакет программ могут быть использованы для практической реализации вероятностных моделей. Предложенная имитационная модель исполнения программ распределенного численного статистического моделирования может применяться для оценки масштабируемости прикладных программ и настройки необходимых параметров параллельных расчетов на современных вычислительных системах.

Основные научные результаты диссертационной работы, полученные автором:

- построение, обоснование и верификация вероятностных моделей для численного моделирования кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, а также реализующих их экономичных параллельных алгоритмов численного статистического моделирования;
- создание и исследование параллельных генераторов псевдослучайных чисел и методики распределенного численного статистического моделирования на

высокопроизводительных вычислительных системах с реализацией возможности параметрического анализа вероятностных моделей;

– формирование имитационной модели исполнения параллельных программ статистического моделирования на многопроцессорных высокопроизводительных вычислительных системах.

– разработка универсальных библиотек численного статистического моделирования и пакета прикладных программ.

Основные результаты полностью опубликованы и своевременно представлены автором научной общественности.

В качестве замечания отмечу отсутствие сравнительного анализа полученных результатов численного моделирования пространственно-неоднородной коагуляции с расчетами, основанными на иных принципах моделирования коагулирующих систем.

Диссертационное исследование, представленное Михаилом Александровичем Марченко, является законченной научной работой, выполненной автором самостоятельно, которая заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Валерий Алексеевич Галкин

628412, Ханты-Мансийский автономный округ - Югра, г. Сургут, проспект Ленина, 1,  
бюджетное учреждение высшего образования Ханты-Мансийского автономного округа –  
Югры «Сургутский государственный университет», Политехнический институт,  
Директор Политехнического института,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
05.13.18 – «математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»,  
тел.: +7 (3462) 76 31 01,  
эл. почта: [val-gal@yandex.ru](mailto:val-gal@yandex.ru)

628412, Ханты-Мансийский автономный округ - Югра, гор. Сургут, пр. Ленина, 1,  
бюджетное учреждение высшего образования Ханты-Мансийского автономного округа –  
Югры «Сургутский государственный университет»,  
тел. +7 (3462) 76 29 00, факс +7 (3462) 76 29 29,  
эл. почта: [rector@surgu.ru](mailto:rector@surgu.ru)  
сайт: <http://www.surgu.ru>

Подпись Галкина Валерия Алексеевича заверяю  
Учёный секретарь, профессор  
Н.В. Кузьмина



«2» декабря 2016 г.