

ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора физико-математических наук
Сушкевич Тамары Алексеевны
о диссертационной работе «Численное статистическое моделирование
кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных
частиц с использованием распределённых вычислений»,
представленной **Марченко Михаилом Александровичем**
на соискание учёной степени доктора физико-математических наук
по специальности 05.13.18 — математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ

1. Актуальность и исторический аспект темы исследования.

Диссертационная работа М.А. Марченко объективно является важной вехой в истории развития методов Монте–Карло (ММК) и параллельных вычислений и потому для объективной и адекватной оценки этой работы прежде всего необходимо напомнить об историческом процессе развития электронно–вычислительных машин (ЭВМ) и суперкомпьютеров и определить место ММК и результатов М.А. Марченко в сфере супервычислений и в перспективе развития науки в условиях постиндустриального информационного общества. В настоящем Отзыве, как обоснованное исключение, нет пересказа содержания диссертации по главам и параграфам, которое прекрасно изложено диссертантом, а предпочтение отдано историческому аспекту и оценке достижений. **Это первое исследование теории ММК с практикой реализации параллельных вычислений, включая параллельные генераторы псевдослучайных чисел**, которое продемонстрировало существенно **НОВЫЕ** перспективы расширения возможностей и сферы приложений ММК в супервычислениях и "цифровой цивилизации".

В середине XX-го века атомный и ракетно–космический проекты, содействующие созданию "ракетно-ядерного щита" для обеспечения безопасности и мира до нынешних времен, в которых противостояли и конкурировали СССР и США, способствовали изобретению ЭВМ и формированию новых научных направлений в математике (вычислительная математика, математическое моделирование, статистические и детерминированные численные методы, методы Монте-Карло, конечно–разностные и сеточные методы и т.д.) и новых дисциплин ("computer sciences", информационные и телекоммуникационные технологии).

XXI-й век — это век супервычислений, суперкомпьютеров и big data или, как уже признано не только философами, век "цифровой цивилизации". "Человек цифровой цивилизации" — это формирование нового типа смысловой ментальности человека современной информационной цивилизации в условиях достаточно резкого изменения многих привычных стереотипов, которые до этого времени казались незыблемыми; это формирование нового типа коммуникативного пространства; это формирование нового типа человеческого сознания. "Цифровая цивилизация" как современный этап развития информационного общества предполагает новые уровни развития науки, техники, технологий, общества, культуры, экономики, права и образования.

Возникновение, развитие и применение ММК как весьма универсального инструмента численного решения "сложных" и "больших" задач стало возможным только благодаря появлению ЭВМ и в век "цифровой цивилизации" существенно расширяется сфера приложений ММК — это задачи не только нейтронной и атомной физики, которые стимулировали формирование ММК, но и разнообразные задачи математической и теоретической физики, ядерной и лазерной физики, гидрооптики и атмосферной оптики, переноса излучения в искусственных и природных средах, радиофизики, аэродинамики, гидродинамики, магнитодинамики, электродинамики, фотоники, квантовой механики, астрофизики, химии, биологии, экологии, климата и эволюции Земли, медицины и фармакологии, социологии и демографии, безопасности технических объектов, теории катастроф и рисков и т.д. К разделам науки, где всё в большей мере используется ММК, следует отнести задачи теории массового обслуживания, задачи теории игр и математической экономики, задачи теории передачи сообщений при наличии помех и ряд других, допускающих теоретико-вероятностную трактовку и естественный параллелизм.

Не случайно в последние годы в мире наметилась тенденция к расщеплению общества на две страты: на тех избранных высокообразованных творческих специалистов высшей квалификации, которые создают интеллектуальные "цифровые продукты", и тех относящихся к основной массе общества, кто эти "цифровые продукты" потребляет с помощью разных "кнопочных технологий" или в разных практических приложениях. Такая тенденция — следствие либеральной глобализации и распределения труда в мире. Зачем тратить деньги и лучшие умы на дорогие разработки, когда "купить можно" ... Эпоха нового этапа развития вычислительной техники нового поколения совпала с кризисом 90-х годов в России, когда даже бесплатно передавали устаревшие зарубежные ком-

пьютеры и программные продукты, лишь бы русские не изобретали своё в России, при том что многие русские специалисты работали за рубежом.

Нечто подобное происходило в 40–50-ые годы XX-го века: несмотря на высочайшие достижения русских учёных в теории вероятностей и статистики, первые генераторы случайных чисел и алгоритмы **ММК как инструмент для прямого статистического моделирования были разработаны в США в рамках Манхэттонского проекта создания ядерного оружия**, в котором приняли участие ученые из разных стран. В целом теоретическая основа ММК была известна давно. Некоторые задачи статистики рассчитывались иногда с помощью случайных выборок, т.е. фактически ММК. Однако до появления ЭВМ этот метод не мог найти сколько-нибудь широкого применения, так как моделировать случайные величины вручную — очень трудоёмкая работа. При появлении первых ЭВМ стало ясно, что ни один существующий на тот момент генератор случайных чисел не обладает достаточным быстродействием для использования его в программах. Джон фон Нейман первым предложил использовать саму ЭВМ для генерации случайных чисел. В 1949 году Джон фон Нейман и Станислав Улам предложили первый алгоритм получения псевдослучайных величин, который впоследствии был назван ММК и послужил основой для развития методики генерации псевдослучайных чисел с использованием ЭВМ. Он был усовершенствован специалистами корпорации RAND и применялся при разработке технологии ядерного взрыва. **Разработка ММК и эффективность его применения всегда начинается с разработки генератора случайных или псевдослучайных чисел, который зависит от класса решаемых задач и конкретной структуры и архитектуры ЭВМ.**

Так что создателями ММК считают американских математиков Дж. Неймана и С. Улама. Датой рождения ММК принято считать 1949 год, когда появился термин "метод Монте-Карло", отраженный даже в названии первой публикации математиков, привлеченных к работе в Лос-Аламосской лаборатории: Nicholas Metropolis, Stanislaw Ulam. The Monte Carlo method // J. Amer. statistical assoc. 1949. V. 44, No. 247. P. 335-341. В честь Николаса Метрополиса, который занимался разработкой первых ЭВМ и основ ММК, назван Вычислительный центр Лос-Аламосской национальной лаборатории «Nicholas C. Metropolis Center for Modeling and Simulation», где в настоящее время располагаются мощнейшие суперкомпьютеры планеты и до сих пор отдают предпочтение ММК.

В условиях строжайшей секретности русские изобрели ЭВМ (проектом создания ЭВМ с 1947 года руководил М.В. Келдыш; в 1953 году органи-

зовали Отделение прикладной математики МИАН им. В.А. Стеклова АН СССР — Институт Келдыша, в котором в том же 1953 году ввели в строй первую серийную ЭВМ "Стрела"). Для ЭВМ разработали уникальные детерминированные конечно-разностные методы и статистические численные алгоритмы ММК. Были заложены основы новых направлений в математике — вычислительной математики и математического моделирования — и даже создали научные школы, в которых теперь готовят специалистов для многих стран, вопреки давлению извне и не только. С тех пор в отечественной науке существуют и развиваются и детерминированные и статистические подходы к решению сложных и больших задач. Однако замечено, что сейчас в эпоху супервычислений преобладают ММК как следствие их простоты реализации (обманчивое представление потребителей — неспециалистов) и доступности готовых зарубежных "цифровых продуктов". Такая "доступность" — целевая установка мировых лидеров, чтобы все программные продукты держать под контролем и сдерживать развитие национальных научных центров, а также управлять мировым рынком информационных технологий и программ.

Представленные результаты научно-фундаментального исследования методов Монте-Карло, проведенного М.А. Марченко, — это не только эффективное основание для защиты докторской диссертации, но и **важный этап в качественно новом развитии и теоретическом обосновании ММК, создании отечественных "цифровых продуктов" и значительном расширении сферы приложений численного статистического моделирования с массовым параллелизмом, а также подтверждение наших приоритетов в мировой науке.**

Главная цель диссертационной работы М.А. Марченко — это разработка, исследование и обоснование возможностей и эффективности реализации ММК для математического моделирования и параметрического анализа вероятностных моделей стохастических процессов и динамических систем на высокопроизводительных вычислительных системах и суперкомпьютерах с распределенными параллельными вычислениями.

История "параллельных" вычислений насчитывает более 50 лет и достаточно полно представлена на сайте <https://parallel.ru/vvv/> и в обзорных монографиях, среди которых особое место занимает книга: Воеводин В.В., Воеводин Вл. Параллельные вычисления. — Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2002. 608 с. — это первое систематизированное изложение нового научного направления. Современные представления о технических возможностях содержатся в учебном пособии Радченко Г.И. Распределенные вычислительные системы / Южно-Уральский государ-

ственный университет. — Челябинск: Фотохудожник, 2012. 184 с. Известный факт: ММК занимают ведущее место в параллельных вычислениях с появлением первых же вычислительных систем, кластеров, суперкомпьютеров и даже web и грид-технологий. Однако отсутствуют издания с системным изложением проблем и обоснований применимости ММК для параллельных вычислений, а теоретический аспект отражен в единственной монографии: Ермаков С.М., Сипин А.С. Метод Монте-Карло и параметрическая разделимость алгоритмов. — Санкт-Петербург: Издательство С.-Петербургского университета, 2014. 248 с., изданной при поддержке РФФИ. **Так что диссертационная работа М.А. Марченко существенно восполняет этот пробел.**

Объектом исследований являются вероятностные модели для численного моделирования кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, когда ансамбли траекторий или частиц содержат по 10^7 — 10^{13} элементов. **Вероятностная модель** кинетического процесса — это такое конструктивное описание процесса с использованием случайных величин, которое позволяет построить численный алгоритм для компьютерного моделирования реализаций случайного объекта (значений случайной величины или случайного процесса), и при этом величины выборочных средних, вычисленных для выборки из реализаций такого объекта, должны давать адекватные оценки интегральных характеристик рассматриваемого кинетического процесса. Такие модели строятся на основе вероятностных представлений для уравнений математической физики — кинетических уравнений Больцмана, коагуляции, диффузии в достаточно общих пространственно-неоднородных постановках и с учетом разнообразных физико-химических процессов. **Численное решение подобных задач относится к классу супервычислений и на их примере продемонстрированы возможности и эффективность ММК для решения "больших" и "сложных" задач не только для расчета отдельных функционалов или оценок, но и для всего фазового объема задачи. Это важнейшее достижение, которое повышает конкурентность ММК с детерминированными конечно-разностными и сеточными методами.**

Выше изложенное подтверждает, что вне всяких сомнений тема диссертационной работы М.А. Марченко **актуальна** и в соответствии с Указом Президента РФ от 7 июля 2011 года отвечает **приоритетному направлению** развития науки, технологий и техники Российской Федерации "Информационно-телекоммуникационные системы" и **критическим технологиям** (Нано-, био-, информационные, когнитивные

технологии. Технологии и программное обеспечение распределенных и высокопроизводительных вычислительных систем), связанным с научно-фундаментальными исследованиями в вычислительной математике и параллельных вычислениях — высокопроизводительных вычислениях, которые в последние годы сформировались и признаны как отдельное направление в математическом моделировании на вычислительных системах и суперкомпьютерах с параллельными структурами разной архитектуры, а также приложениями в разных сферах приложений, в том числе в задачах, класс которых достаточно полно представлен в монографии: Артемьев С.С., Марченко М.А., Корнеев В.Д., Якунин М.А., Иванов А.А., Смирнов Д.Д. Анализ стохастических колебаний методом Монте-Карло на суперкомпьютерах / РАН, СО РАН, ИВМиМГ СО РАН. — Новосибирск: Издательство СО РАН, 2016. 294 с., только что изданной при поддержке Российского Фонда Фундаментальных исследований.

2. Научная новизна исследований и полученных результатов.

В диссертационной работе созданы научно-фундаментальные основы нового научного направления — параллельное статистическое моделирование кинетических процессов.

Почти 500 лет прошло от появления первых элементов "теории вероятностей" в XV-м веке до создания математического аппарата стохастических методов и практической направленности ММК в 1940-х годах, когда потребовалось выполнять расчеты атомных реакторов и атомного оружия в рамках Манхэттенского проекта. Одной из первых открыто опубликованных зарубежных работ, посвященных математическому обоснованию ММК, является доклад 1956 года: Albert G.E. A general theory of stochastic estimates of the Neumann series for the solution of certain Fredholm integral equations and related series // Sympos. on Monte Carlo Methods, ed. H. A. Meyer, Wiley. 1956. P. 37–46.

В отечественной литературе **первые работы по теории ММК так же принадлежат участникам атомного проекта, который в СССР выполнялся в режиме повышенной секретности**: В.С. Владимирову, И.М. Гельфанду, С.М. Ермакову, В.Г. Золотухину, Г.И. Марчуку (Ленинская премия в 1961 году), Г.А. Михайлову (Ленинская премия в 1962 году в возрасте 28 лет, закончил аспирантуру в Институте Келдыша под руководством И.М. Гельфанда и Н.Н. Ченцова), И.М. Соболю, Н.Н. Ченцову. Но были и открытые публикации, которые тоже относятся к 1950-м годам, т.е. работы по ММК в США и СССР шли одновременно. В 1955 г. вышли три открытые публикации о приложениях ММК: Чавча-

нидзе В.В. Метод случайных испытаний (метод Монте-Карло) // Труды Института физики АН Грузинской ССР. 1955. Вып. 3. С. 105; Чавчанидзе В.В. Применение метода случайных испытаний к расчету внутриядерного каскада // Известия АН СССР, серия физическая. 1955. Т. 19, № 6. С. 629–638; Шрейдер Ю.А. Метод статистических проб (Монте-Карло) и его использование в цифровых машинах // Приборостроение. 1955. № 7. С. 1–5. (соавтор учебников с математиком-кибернетиком Н.П. Бусленко)

В 1954-1956 гг. В.С. Владимиров принимал активное участие в разработке артиллерийского ядерного снаряда — малогабаритного атомного заряда. Задачи переноса нейтронов в цилиндрически-симметричных областях, с которыми ему пришлось иметь дело в этой работе, стимулировали его занятия ММК. В 1956 году Василием Сергеевичем открыто опубликована **первая в нашей стране теоретическая математическая работа по ММК**: Владимиров В.С. О применении метода Монте-Карло для отыскания наименьшего характеристического числа и соответствующей собственной функции линейного интегрального уравнения // Теория вероятностей и ее применения. 1956. Т. 1, № 1. С. 113-130.

Как признание заслуг мирового уровня в 1979 году Государственную премию СССР за работы по ММК получил коллектив под руководством Г.И. Марчука в составе: С.М. Ермаков, В.Г. Золотухин, Г.А. Михайлов, Н.Н. Ченцов. Оппонент лично знакома с перечисленными учеными и их работами, будучи последней ученицей профессора Е.С. Кузнецова — основателя в 1952 году математического отдела в ФЭИ, Обнинск, и в 1955 году отдела "Кинетические уравнения" в Институте Келдыша, в которых проводились работы по атомному проекту. Вышли из атомного проекта и в 60-ые годы XX-го века сложились **три отечественные научные школы по ММК** — Московская, Ленинградская, Новосибирская. В настоящее время сохранилась только Новосибирская научная школа, где продолжают работы и по теории и по практике применения ММК. На кафедре статического моделирования математико-механического факультета Санкт-Петербургского университета под руководством профессора С.М. Ермакова (сформировался как специалист по ММК в Обнинске, участвуя в работах по атомному проекту) на высочайшем уровне проводятся теоретические исследования, но без практической реализации. В Институте Келдыша сохранилось несколько групп специалистов, которые активно используют ММК для практических реализаций и решений отдельных сложных больших задач, в том числе на суперкомпьютерах разной архитектуры, но без теории.

М.А. Марченко достойно представляет Новосибирскую научную школу и, как в середине XX-го века, демонстрирует отечественные разработки и достижения, конкурирующие, а в теоретическом аспекте даже превосходящие все зарубежные, тем самым содействуя безопасности и суверенитету отечественного информационно-математического обеспечения в условиях навязывания западной гегемонии и превосходства там, где "компьютеры решают судьбы мира" .

Из-за технической простоты распараллеливания алгоритмов ММК абсолютное большинство вычислителей и пользователей либо используют метод Монте-Карло, исходя из простых эвристических представлений, не задумываясь о вычислительных проблемах, либо исследуют и приспособливают частные задачи к имеющемуся в распоряжении или в доступности компьютеру, либо без размышлений вслепую используют чужие "программные продукты" или программы из электронных библиотек типа "Mathematica", преимущественно зарубежных.

Диссертационная работа М.А. Марченко — это ПЕРВОЕ научно-фундаментальное комплексное исследование и обоснование параллельных алгоритмов метода Монте–Карло. Диссертант не ставит перед собой проблему решить некоторые конкретные прикладные задачи. Важным достоинством настоящей диссертации является методический подход к решению сложнейших проблем, в котором на примере трех сложных "больших" задач, описывающих пространственно-неоднородные кинетические процессы диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, системно рассматриваются теория методов и алгоритмов ММК и практика их реализации в формате не просто программ, а также параллельных генераторов псевдослучайных чисел, библиотек, средств обработки данных, управляющих программ и т.д., т.е. все этапы создания "цифрового продукта" . Успех исследования предопределен высокой квалификацией М.А. Марченко в теории методов и алгоритмов Монте-Карло и большим опытом практической работы в технологиях параллельных реализаций.

Сразу было замечено (возможно, впервые на это указал Метрополис), что очень много машинного времени тратится на разыгрывание траекторий частиц, которые не вносят существенного вклада в значение рассчитываемой величины. Для устранения этого недостатка разрабатываются разнообразные методы оптимизации, среди них отдельной группой являются весовые методы и методы зависимых испытаний, которым уделено должное внимание в диссертационной работе. Важно отметить: разраба-

тываются и исследуются параллельные реализации алгоритмов ММК с разными приемами оптимизации, которые накоплены в научной школе и доступны для реализации каждому сотруднику лаборатории, а не простые алгоритмы прямого статистического моделирования, которые наиболее массово распространены на разных вычислительных платформах! Диссертант избегает анализа физических моделей и процессов, который проводят специалисты прикладной области, и это нормально, т.к. находится в рамках "вычислительной математики", "математического моделирования" и информационных технологий. **Таких специалистов не только в России, но и в мире сейчас единицы!**

Совсем недавно "параллельные вычисления" и "суперкомпьютеры" вошли в образовательные программы ведущих университетов. Это направление развивается настолько быстро, а сами технологии настолько сложны, что в настоящее время происходит разделение специалистов на тех, кто методы и алгоритмы разрабатывает, и тех, кто занимается реализацией на компьютерах. Кстати, нечто подобное было на этапе становления ЭВМ до начала 60-х годов XX-го века, когда появились первые специалисты по математическому моделированию (к ним относится оппонент). В США до сих пор разделена работа "математика", который не имеет доступа на суперкомпьютер, и "программиста", который пишет программы и проводит работы на суперкомпьютере.

Успех диссертационной работы обусловлен единством теории и практики: Михаил Александрович Марченко — ученик крупнейшего УЧЕНОГО в мире — специалиста по всем аспектам ММК член-корреспондента Геннадия Алексеевича Михайлова и представитель единственной в мире и до настоящего времени признанной научной школы по ММК, — со студенческих лет приобрел фундаментальные знания по теории методов и алгоритмов ММК, свободное владение которыми позволило далее в течение 15 лет с 2001 года сосредоточиться на освоении вычислительной техники и компьютеров нового поколения с распределенными вычислениями и развивать теоретические основы параллельных вычислений для математического моделирования стохастических процессов и динамических систем методом Монте-Карло. Приходилось использовать все доступные средства. Впервые считали свои задачи на самодельной "Грид-системе" из персоналок на работе в ИВМиМГ СО РАН (с использованием разработанной библиотеки MONC) в 2001 г., затем на кластере МВС-1000 (достался из МСЦ РАН) и на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН, далее на кластере МВС-10П в МСЦ РАН.

ПРИМЕЧАНИЕ. Оппонент оценивает достижения диссертанта на основе личного огромного 55-летнего опыта "программирования" и решения "больших" кинетических задач, начиная с ЭВМ "Стрела" в 1961 году. Ровно 50 лет назад, осенью 1966 года, в ВЦ СО АН СССР состоялась первая конференция по ММК и с тех пор продолжалось наше постоянное сотрудничество. Зарождение распределенных вычислений произошло в начале 60-х годов XX-го века, когда на больших по тем временам ЭВМ ввели мультипрограммный режим решения задач. Оппонент лично участвовала в разработке и освоении первых распределенных вычислений ещё в 1963–1964 гг. на ЭВМ "Весна", в 1966–1967 гг. на ЭВМ "БЭСМ-6" и т.п., а с 1989 года по настоящее время на самых разных вычислительных платформах. Важно помнить, что **разработчики параллельных алгоритмов зависят от технических средств, которые им доступны, — это дорогие информационные технологии!** Так что от работ, которые выполняются в МГУ имени М.В. Ломоносова, имеющего лучшие в России суперкомпьютеры мирового уровня, можно и нужно требовать больше, чем от работ, выполненных на вычислительных ресурсах Новосибирского Академгородка, когда значительная часть работы носит аналитический и поисковый характер. Как и в 40–50-ые годы XX-го века, в нынешнее время в стране имеет место отставание в технике, которая стремительно развивается, потому чрезвычайно важно создать научно-теоретический и информационно-технологический базис для преодоления отставания на уровне решаемых задач и обеспечения задач будущего, суверенитета и безопасности государства в сфере "computer sciences" и "цифровой цивилизации".

Исследования проводились по пяти направлениям.

Введение в полном формате отражает все необходимые пункты и положения, предусмотренные требованиями к оформлению диссертаций.

В Главе 1 представлен содержательный обзор методов численного статистического моделирования кинетических процессов и способов их распараллеливания, в котором чётко отражены известные результаты и сформулированы подходы к теоретическим и практическим исследованиям вычислительной трудоёмкости параллельных алгоритмов, реализующих новые математические модели. Поставлены вопросы предсказания производительности суперкомпьютерных вычислительных систем путем решения типичных представителей классов прикладных задач.

Для теоретических исследований и практических реализаций, включая проведение тестовых и методических расчетов и обработку результатов

с визуализацией характеристик развития процессов, выбраны три сложные трудоемкие задачи с кинетическими процессами диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц.

Первое направление (Введение, Гл. 1, 2) связано с развитием теории и алгоритмов ММК для численного статистического моделирования при решении диффузионных задач с использованием распределенных вычислений.

Пусть m -мерный диффузионный процесс $y(\cdot)$ задан автономной системой стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) в смысле Ито:

$$dy(t) = a(y(t))dt + b(y(t))dw(t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad y(0) = y_0,$$

где $a(y)$ — m -мерная векторная функция сноса, $b(y) = \{b_{ij}(y)\}$ — матричная функция диффузии размерности $m \times m$, $w(t)$ — m -мерный винеровский процесс, y_0 — случайный вектор. Предполагается, что для СДУ выполнены условия существования и единственности решения.

Результаты многостороннего исследования приводят к выводу: разработанные алгоритмы методов расщепления и весового моделирования рекомендуется использовать для прецизионного решения практических диффузионных задач, связанных с моделированием маловероятных событий; при их реализации для уменьшения трудоемкости целесообразно применять разработанную в диссертации методику распределенных вычислений, что важно также для проведения параметрического анализа задач.

Второе направление (Введение, Гл. 1, 3) связано с вероятностной моделью и численным статистическим моделированием процесса пространственно неоднородной коагуляции с использованием распределенных вычислений.

Рассматривается задача Коши для системы нелинейных уравнений, описывающих процесс пространственно неоднородной коагуляции частиц:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1}{\partial t} + \operatorname{div}(v_1 c_1) &= -c_1 \sum_{j=1}^{\infty} K(x; 1, j) c_j, \\ \frac{\partial c_i}{\partial t} + \operatorname{div}(v_i c_i) &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K(x; i-j, j) c_{i-j} c_j - c_i \sum_{j=1}^{\infty} K(x; i, j) c_j, \quad i \geq 2, \\ c_i(0, x) &= c_i^0(x), \quad i = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Уравнение коагуляции рассматривается в пространственно-временной области $\Omega \times (0, T]$, где $\Omega \subset R^3$, $T < \infty$. В уравнении функция $c_i = c_i(t, x)$, $i = 1, 2, \dots$ есть концентрация i -меров в момент времени t в пространственной точке x , $v_i = v_i(x)$ — пространственно неоднородное поле скоростей, $K(x; i, j)$ — ядро коагуляции в точке x для частиц с размерами i и j , $c_i^{(0)}(x)$, $i = 1, 2, \dots$ — концентрация i -меров при $t = 0$.

Рассматриваются следующие функционалы от решения уравнения коагуляции:

$$\varphi_i(T) = \int_G c_i(T, x) dx, \quad G \subseteq \Omega.$$

Результаты исследований отражены в выводах: разработанные вероятностную модель пространственно неоднородной коагуляции и реализующий ее параллельный алгоритм рекомендуется использовать для решения практических задач коагуляции; при исполнении алгоритмов на многопроцессорных вычислительных системах рекомендуется применять предложенную методику выбора их параметров совместно с разработанной автором методикой распределенных вычислений.

Третье направление (Введение, Гл. 1, 4) посвящено численному статистическому моделированию процесса переноса заряженных частиц и процесса развития электронных лавин в газе с использованием распределенных вычислений.

Рассматривается открытая система с внешним электрическим полем, напряженность которого $E = (0, 0, -E_z)$ считается постоянной, в трехмерном координатном пространстве. Пространство заполнено газом (азот N_2) с концентрацией N и давлением p . Расстояние между электродами равно d . В ходе моделирования с катода из точки $r = (x, y, z) = (0, 0, 0)$ в момент времени $t = 0$ происходит эмиссия n_0 электронов с нулевыми энергиями. Моделируются и прослеживаются траектории движения каждого из электронов либо до достижения времени t_{max} , либо до достижения уровня $z = d$; шаги Δt по времени выбираются одинаковые.

Предложена и реализована уникальная вероятностная модель процесса развития электронных лавин с использованием аппарата "деревьев". Разработанная модель и параллельный алгоритм рекомендуется применять для решения практических задач переноса заряженных частиц; исполнение параллельных алгоритмов можно производить на гибридных вычислительных системах с применением разработанной методики распределенного численного статистического моделирования и проведения параметрического анализа вероятностных моделей.

Четвертое направление (Введение, Гл. 1, 5) связано с ключевыми проблемами, без которых невозможно реализовать параллельные супервычисления методом Монте–Карло, — это распределительный способ получения псевдослучайных чисел и методика распределенного численного статистического моделирования. Проведены исследования и разработаны генераторы и управляющие программы для двух типов вычислительных систем с распределенными вычислениями:

1) **массивно-параллельная вычислительная система** — это однородная (из одинаковых процессоров или вычислительных ядер) система с распределенной памятью, где у каждого процессора (вычислительного ядра) своя оперативная память; процессоры при этом обычно объединены в вычислительные узлы, причем в самой вычислительной системе вычислительные узлы могут иметь различную производительность;

2) **гибридная вычислительная система** — это система, состоящая из вычислительных узлов, на каждом из которых расположены основные процессоры (CPU) и многоядерные сопроцессоры (например, Intel Xeon Phi или Nvidia GPU).

При распределении псевдослучайных чисел учитываются особенности параллельного алгоритма и тип используемой вычислительной системы:

- массивно-параллельные вычислительные системы для случая, когда моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо на разных процессорах (вычислительных ядрах);
- массивно-параллельные вычислительные системы для случая, когда моделирование каждой реализации осуществляется совместно на нескольких процессорах;
- гибридные вычислительные системы для случая, когда моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо как на вычислительных ядрах основного процессора, так и на вычислительных ядрах сопроцессора;
- гибридные вычислительные системы для случая, когда моделирование каждой реализации осуществляется совместно на вычислительных ядрах основного процессора и на вычислительных ядрах сопроцессора.

Важное по значимости достижение — это разработка и реализация имитационной модели исполнения программ распределенного численного статистического моделирования и оценки масштабируемости задач.

Разработанные параллельный генератор и методика распределенных вычислений рекомендуются для решения практических задач на современных и перспективных суперкомпьютерах, в частности для параметрического анализа вероятностных моделей; предложенная имитационная модель исполнения программ может применяться для оценки масштабируемости конкретных задач на реальных вычислительных системах и настройки соответствующих параметров параллельных расчетов.

Пятое направление (Введение, Гл. 1, 6, Приложения 1, 2) — это разработка и описание библиотек PARMONC, PARMONC-PC, MONC и параллельной программы AMIKS — созданного инструментария для реализации распределенного численного статистического моделирования.

Результаты работы в этом направлении относятся к разработке и реализации "комплекса программ" и "программного обеспечения" и блестяще оформлены и представлены в содержании диссертации с ориентацией на профессионалов в программировании и пользователей. Эти результаты невозможно словами кратко описать — нужно текст почитать. Впечатляет высокая культура и стиль оформления таких рутинных материалов, которыми отличались советские программисты, но которые потеряны в нынешние времена. Изложение материала свидетельствует о кропотливой доскональной работе над программами и их описаниями с глубоким пониманием тех задач, на численное решение которых нацелены программы и библиотеки, и тех проблем, с которыми сталкиваются пользователи. Уважение к своей работе проявляется в уважении к будущим пользователям, для которых создан такой мощный инструментарий.

В Приложении 2 представлены описания и Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ, подтверждающие практическую значимость результатов.

Вывод: разработанные универсальные библиотеки PARMONC, PARMONC-PC, MONC и программу AMIKS можно рекомендовать для решения широкого круга практических задач методом Монте–Карло с массово-распределенными вычислениями и с использованием современных и перспективных суперкомпьютеров.

3. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации.

Основным научным достижением диссертации является разработка новых вероятностных моделей кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц на основе использования многочастичных ансамблей и реализующих их экономичных методов численного статистического моделирования с применением методики распределённых вычислений, обеспечивающей возможность параметрического анализа. На примере этих трех "больших" задач проведено исследование параллельных вычислений ММК, имеющее фундаментальное значение для расширения практики внедрения ММК на суперкомпьютерах.

Это первое комплексное научно-фундаментальное исследование теории и практики применения ММК, в котором представлены все этапы и все компоненты разработки современного "цифрового продукта" на высочайшем уровне, учитывающем мировые достижения с первых шагов появления ММК как аппарата решения сложнейших задач атомного проекта в середине XX-го века. Такое стало возможно только потому, что диссертант — ученик Г.А. Михайлова (участника атомного проекта) и работа выполнена в Новосибирской Научной школе по ММК, в которой более чем за 50 лет накоплен, сохранен и развит колоссальный научный потенциал, не имеющий аналогов ни в одной стране мира.

Не случайно для "математической приемки" и международного тестирования и рейтинга суперкомпьютеров используют алгебраические задачи. Под руководством академика Валентина Васильевича Воеводина — выдающегося алгебраиста и одного из первых теоретиков параллельных вычислений — с первых шагов освоения и внедрения параллельных алгоритмов в начале 80-х годов XX-го века были проведены фундаментальные исследования и обоснования супервычислений в алгебре. Ведь к алгебраическим системам большого порядка сводятся многие конечно-разностные и сеточные методы. Перспективы развития вычислительной техники и технологий параллельных вычислений специалисты обсуждали на ежемесячном Межведомственном семинаре в ГКНТ СССР на государственном уровне под руководством академика Г.И. Марчука — вице-преьера правительства и министра науки СССР в 1980–1986 гг. В те годы вышли первые публикации Воеводина В.В., показывающие нетривиальность перехода к параллельным вычислениям, и это был сигнал всей мировой общественности о целях СССР в области инноваций: Воеводин В.В. Некоторые машинные аспекты распараллеливания вычислений // ВИНТИ (Препринт № 22), Москва, 1981. 10 с.; Воеводин В.В.

Математические проблемы освоения супер-ЭВМ // Наука, Вычис. проц. и сист., вып. 2, 1984. 10 с.; Воеводин В.В. Параллельные структуры алгоритмов и программ // ОВМ АН СССР (Препринт № 73), Москва, 1985. 24 с.; Воеводин В.В. Математические вопросы отображения алгоритмов на параллельные системы // ОВМ АН СССР (Препринт № 94), Москва, 1985. 64 с.

СССР и США фактически одновременно начали работы по созданию высокопроизводительных компьютеров нового поколения, радикально отличающихся от всех предыдущих "больших" машин, возможности которых уже через несколько лет были реализованы в персональных компьютерах. Но позже русские отстали, однако не по вине ученых. И тем более значимы достижения М.А. Марченко, которые благодаря высокому научному потенциалу обеспечивают паритет и показывают готовность русских решать любые "большие" и "сложные" задачи даже на тех технических вычислительных ресурсах, которые есть, и тем более на перспективных суперкомпьютерах.

Разработки М.А. Марченко по ММК можно рекомендовать для "математической приемки" и тестирования суперкомпьютеров.

4. Достоверность научных положений, выводов и рекомендаций.

Материалы диссертации представлены в 63 печатных работах и свидетельствах о регистрации программ для ЭВМ. Опубликовано 19 статей в журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий ВАК, четыре работы в изданиях, индексируемых Scopus и Web of Science. Сделаны доклады на многочисленных международных и всероссийских научных мероприятиях. Данные публикаций оформлены чётко.

Достоверность научных положений, выводов и рекомендаций в диссертационной работе М.А. Марченко подтверждается самой логикой и практикой развития ММК на протяжении почти 70 лет и критериями оценки научной работы в академической научной среде не только на стадии защиты диссертации, но и в течении всего периода выполнения исследований.

Достоверность численных результатов, полученных с использованием разработанных вероятностных моделей, подтверждается их сравнением с известными численными и экспериментальными данными при решении аналогичных задач; достоверность эффективности параллельных алгоритмов, библиотек и прикладных программ подтверждается их практи-

ческим применением с использованием распределённых вычислений на высокопроизводительных вычислительных системах.

Научно-исследовательская работа, результаты которой вошли в докторскую диссертацию, подготовленную автором по инициативе, а не по планам, проводилась при частичной финансовой поддержке следующих конкурсных грантов и проектов, каждый из которых проходил многократную экспертизу:

- грантов Президента РФ по государственной поддержке ведущих научных школ НШ-4774.2006.1, НШ-1307.2008.1, НШ-5111.2014.1;
- инициативных проектов РФФИ № 06-01-00586, 09-01-00639, 12-01-00727, 15-01-08988 под руководством автора;
- гранта Президента РФ по поддержке молодых ученых – кандидатов наук № 587.2008.1;
- гранта Фонда содействия отечественной науке;
- гранта INTAS № 05-109-5267;
- интеграционных проектов СО РАН № 39, 47, 126;
- проекта «Суперкомпьютерное статистическое моделирование переноса излучения с учетом различных трехмерных и, в том числе, стохастических функциональных характеристик радиационной модели среды» по программе Президиума РАН I.33П «Фундаментальные проблемы математического моделирования. Фундаментальные проблемы факторизационных методов в различных областях. Алгоритмы и математическое обеспечение для вычислительных систем сверхвысокой производительности»;
- государственного контракта от 19 августа 2011 г. № 07.514.11.4016 в рамках Федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технического комплекса России на 2007-2013 годы», проект «Исследования и разработка методов имитационного моделирования функционирования гибридных экзафлопсных вычислительных систем».

Диссертант — руководитель четырех трехлетних инициативных научных проектов по тематике диссертации, которые получили финансовую поддержку Российского фонда фундаментальных исследований, а это значит что было проведено более 30 экспертиз ведущими специалистами (заявка не менее 3-х экспертиз, каждый ежегодный отчет не менее 2-х экспертиз, завершённый проект — это не менее 9-ти экспертиз), которые

дали высокие оценки работе (очень жёсткий конкурс РФФИ):

№ 06-01-00586 Разработка экономичных методов Монте-Карло для решения нелинейного уравнения пространственно неоднородной коагуляции

№ 09-01-00639 Разработка, оптимизация и адаптация к параллельным ЭВМ методов Монте-Карло для решения нелинейного уравнения коагуляции и других задач математической физики

№ 12-01-00727 Разработка и исследование масштабируемых параллельных алгоритмов статистического моделирования для решения ряда задач естествознания и оценка эффективности их выполнения на перспективных экзафлопсных суперкомпьютерах

№ 15-01-08988 Разработка и качественный анализ методов численного статистического моделирования случайных процессов и полей, исследование погрешности алгоритмов, их эффективная параллельная реализация на суперкомпьютерах с целью решения ряда актуальных естественнонаучных задач.

Нет сомнений в достоверности научных положений, выводов и рекомендаций, потому что защищается репутация единственной в России Научной школы по ММК, признанной в мире! Есть мелкие **недостатки и опечатки** — бывает в большой работе, их отметят в других отзывах, но писать о них на фоне такого фундаментального исследования не считаю нужным — они не снижают ни научного уровня ни достоинств диссертации. С позиции огромного опыта моя **главная задача** — **оценить достижения, место и перспективы метода Монте-Карло в контексте будущего "цифровой цивилизации" и супервычислений.**

5. Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней.

Диссертация Марченко Михаила Александровича представляет собой законченную научно-исследовательскую работу. Работа содержит научно обоснованные теоретические, алгоритмические и программные решения, внедрение которых в виде информационно-математического и программного обеспечения способно внести значительный вклад в теорию и практику статистического математического моделирования стохастических кинетических процессов в практически важных приложениях. Работа обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, и свидетельствует о личном вкладе автора диссертации в фундаментальную науку. В ра-

боте также содержатся рекомендации по практическому использованию научных выводов.

Представленная диссертационная работа полностью удовлетворяет всем критериям, которые в соответствии с "Положением о порядке присуждения ученых степеней от 24 сентября 2013 года № 842" предъявляются ВАК к диссертациям на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 — математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Автореферат достоверно отражает основное содержание диссертации. Соискатель Михаил Александрович Марченко безусловно заслуживает присуждения ему учёной степени доктора физико-математических наук.

Личное мнение Т.А. Сушкевич — официального оппонента порядка 50 диссертаций: диссертационная работа М.А. Марченко — редкое в последние десятилетия явление — это **ОБРАЗЦОВО-ПОКАЗАТЕЛЬНАЯ диссертационная работа**, при близком знакомстве производящая потрясающее впечатление! Это показатель соответствия научного потенциала и работ Новосибирской Научной школы по методам Монте-Карло высочайшему уровню академической науки в России, история которой насчитывает практически 300 лет!

СВЕДЕНИЯ

об официальном оппоненте

Сушкевич Тамара Алексеевна — физик, окончила кафедру математики (заведующий академик А.Н.Тихонов) физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова по специальности "Теоретическая и математическая физика"; один из первых специалистов по математическому моделированию с опытом работы в Институте Келдыша Академии Наук с компьютерами более 55 лет с июля 1961 года, начиная с ЭВМ "Стрела", далее на всех типах и поколениях вычислительной техники, а с 1989 года на всех типах вычислительных систем и платформ суперкомпьютеров с параллельными вычислениями; с 1961 года знакома с Г.И. Марчуком, когда он работал ещё в Обнинске, и около 55 лет стаж знакомства с работами по методу Монте-Карло и их разработчиками; более 50 лет сотрудничала с Лабораторией методов Монте-Карло, основанной в ВЦ СО АН СССР (ныне ИВМиМГ СО РАН) член-корреспондентом Г.А.Михайловым в 1965 году; оппонировала около 20 диссертаций по методам и алгоритмам Монте-Карло

и их приложениям; диссертацию на соискание учёной степени доктора физико-математических наук (секретная) защитила в 1989 году на диссертационном совете в ВЦ СО АН СССР; заслуженный деятель науки РФ; лауреат премии правительства РФ в области науки; эксперт "Федерального списка экспертов научно-технической сферы РФ" с 2001 года; в списке научных трудов более 600 публикаций, включая монографии и энциклопедии; "Ветеран Института Келдыша" — с 1961 года вся научная деятельность прошла в Институте Келдыша от дипломника, стажера-исследователя, младшего научного сотрудника, старшего научного сотрудника, ведущего научного сотрудника отдела 7 "Кинетические уравнения", основанного профессором Е.С.Кузнецовым в 1955 году, до главного научного сотрудника отдела 3 "Динамические системы" с 2008 года.

Официальный оппонент:


Сушкевич Тамара Алексеевна, доктор физико-математических наук, специальности: 01.01.03 — теоретическая и математическая физика и 05.13.18 — математическое моделирование, численные методы и комплексы программ; главный научный сотрудник отдела 3 "Динамические системы" Федерального государственного учреждения "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук" (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

E-mail: tamaras@keldysh.ru

Адрес: 125047, Москва, Миусская пл., д. 4

Телефон: +7(495)433-16-23

http://www.keldysh.ru

 Т.А. Сушкевич

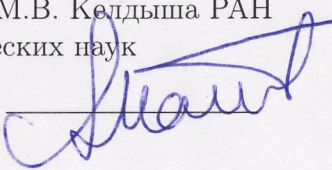
Дата: 12.01.2017

Подпись официального оппонента Сушкевич Тамары Алексеевны, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника отдела 3 "Динамические системы" ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

удостоверяю

Ученый секретарь ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

кандидат физико-математических наук

Маслов Александр Иванович 

Дата: 12.01.2017

МП

