

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Подрыги Виктории Олеговны  
«Многомасштабное численное моделирование течений газа в каналах  
технических микросистем», представленной на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 –  
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертация В.О. Подрыги посвящена разработке многомасштабного математического подхода, созданию численных алгоритмов и комплексов программ для численного моделирования течений смеси газов в микроканалах технических систем и для исследования свойств материалов микро- и наносистем на молекулярном уровне. В работе развивается многомасштабный двухуровневый подход, сочетающий макроскопическое описание течений многокомпонентных газовых сред на основе квазигазодинамических (КГД) уравнений с микроскопическими описаниями молекулярной динамики (МД). Подход представлен впервые, применяется к расчетам реальных газов и покрывает весь диапазон чисел Кнудсена. В диссертации В.О. Подрыги представлены результаты, которые позволяют проводить моделирование газодинамических процессов в системах с реальной микрогеометрией с нужной степенью детализации, приведены исследования характеристик течений газа в микро- и наноканалах, а также исследования свойств твердых материалов технических микросистем, выполненные на молекулярном уровне. Среди основных результатов диссертационного исследования можно выделить следующие:

1. Разработан многомасштабный двухуровневый подход для моделирования течений газовых смесей в микроканалах технических систем.
2. Разработаны параллельные вычислительные алгоритмы, а также численные алгоритмы для реализации различных вариантов многомасштабного подхода.
3. Созданы комплексы программ, реализующие разработанные алгоритмы, для суперкомпьютерных расчетов течений газовых смесей в микроканалах технических систем, а также для расчета свойств материалов технических микро- и наносистем на основе метода молекулярной динамики.

Полученные результаты открывают широкие перспективы для исследования нелинейных процессов транспортировки газовых смесей через микроканалы технических систем.

Имеется следующее замечание:

- в автореферате на стр. 9 говорится о невысокой эффективности параллельных версий коммерческих пакетов программ, но оценки эффективности параллельных реализаций алгоритмов, разработанных автором, не приведены в автореферате (в тексте диссертационной работы они имеются).

Указанное замечание не умаляет ценность работы и носит, скорее, рекомендательный характер.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации. Диссертационная работа В. О. Подрыги является законченным научным исследованием, выполнена на высоком научном уровне, отвечает всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к докторским диссертациям, а автор работы, Подрыга Виктория Олеговна, несомненно, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Губайдуллин Ирек Марсович  
с.н.с. лаборатории математической  
химии Федерального государственного  
бюджетного учреждения науки  
Института нефтехимии и катализа  
Российской академии наук (ИНК РАН),  
доктор физико-математических наук,  
доцент

И.М. Губайдуллин

« 29 » мая 2017 г.

Почтовый адрес: 450075, РБ, г. Уфа  
Октября проспект 141, офис 21,  
ИНК РАН

Тел. +7 (347) 284-27-50  
E-mail: irekmars@mail.ru

Подпись Губайдуллина И.М. заверяю:



Ученый секретарь ИНК РАН, к.х.н.

А.Ю. Спивак

« 29 » мая 2017 г.