

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию **Тарасова Никиты Игоревича** «Разработка численных алгоритмов и параллельных программ для моделирования некоторых задач промышленной экологии», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

В настоящее время проблемы экологии в промышленности стоят как никогда остро. Взаимное влияние человека и природы достигло столь высокого уровня, что исследование подобных вопросов оформилось в отдельную научную отрасль – промышленную экологию. Особое место занимает глубокая очистка воздушных и водных масс. Это связано с высокой потребностью машиностроения, медицины и др. в воде особого уровня чистоты, недостижимого стандартными физико-химическими методами. Для повышения уровня очистки применяются так называемые «тонкие фильтры», в основе которых лежит электромагнитное или термическое взаимодействие для обработки жидкостей и гранулированная фильтрация для газов.

Очевидно, что для многих производств необходимо получать материалы с заранее известными свойствами. С этой целью, для прогнозирования процесса фильтрации применяется математическое моделирование. Современный уровень развития вычислительной техники позволяет проводить масштабные эксперименты с высокой степенью достоверности, однако для детального исследования необходимо разработать адекватные математические модели, что возможно только при синтезе математических методов и лабораторных экспериментов. Это обуславливает **актуальность настоящей работы.**

Диссертационное исследование посвящено разработке методики моделирования процессов фильтрации водной и воздушной сред от загрязняющих мелкодисперсных примесей. В основе разрабатываемой методики лежат принципы механики сплошных сред в сочетании методами молекулярной динамики. При разработке математических моделей анализ адекватности проводился с использованием расщепления по физическим процессам – каждая часть модели представляет собой отдельную начально-краевую задачу, для которой проведена оценка корректности и адекватности. Для разработанных математических моделей построены эффективные вычислительные алгоритмы с использованием суперкомпьютерных технологий. Результаты моделирования показали высокую степень соответствия практическим экспериментам. Совокупность разработанных моделей и реализованных вычислительных алгоритмов оформлена как полноценная цифровая платформа для обеспечения полного цикла компьютерного моделирования процессов «тонкой» фильтрации.

В настоящее время не существует комплексных моделей и программных продуктов для детального исследования процессов «тонкой» фильтрации. В связи с этим стоит отметить высокую теоретическую значимость представленной работы. Реализация математических методов в форме цифровой платформы обуславливает практическую ценность. Таким образом, заявленная работа обладает высоким уровнем научной новизны, а используемые при моделировании классические математические методы позволяют говорить об обоснованности авторской методики. Кроме того, проведенные верификация и валидация подтверждают адекватность используемых методов и подходов.

Работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, изложенных на 139 страницах, включая 71 рисунок.

Во **введении** дана характеристика промышленной экологии как науки, содержится подробный обзор современных проблем очистки водных и воздушных масс. Особое внимание уделено технологиям замкнутого цикла,



повышающим экономичность и экологичность производств. Актуальность исследования раскрыта с точки зрения теоретических и практических проблем, возникающих при разработке систем очистки. Отмечено, что разработанная методика найдет свое применение за пределами круга практических задач, освещенных в диссертации.

**Первая глава** посвящена обзору разработанной автором исследования методики моделирования фильтрационных процессов. Проведен выбор базовых математических моделей многомасштабного подхода, отмечена роль расщепления по физическим процессам при разработке моделей. Приведены задачи, позволяющие проанализировать адекватность разработанного подхода к исследованию актуальных задач промышленной экологии. Также в первой главе отмечена многофакторность исследуемых в диссертации процессов и важность учета физических, электро- и термохимических эффектов при моделировании. Указано, что учет подобных процессов необходимо вести на двух уровнях: макро (с использованием механики сплошных сред) и микро (с использованием молекулярной динамики).

Для учета течения среды автор использует квазигидродинамическую систему уравнений, обеспечивающую устойчивость вычислительных алгоритмов на достаточно подробных сетках. Система дополнена уравнениями для учета температурных эффектов, конвекционно-диффузионного движения примесей и силы Лоренца для электромагнитных фильтров. Граничные условия описывают входное и выходное отверстия, стенки области, стенки гранулированных сорбентов и нагревательных элементов, а начальные условия соответствуют условиям покоя. Учет микроявлений проводится с использованием методов молекулярной динамики. В работе отмечена необходимость использования различных методов для описания процессов в газах и жидкостях.

**Вторая глава** посвящена построению вычислительных алгоритмов для разработанных математических моделей, приведено описание используемых численных методов. В основе разработанных сеточных алгоритмов

макроскопического уровня лежит метод конечных объемов. Для программной реализации столь сложных моделей необходимо применение особых компьютерных технологий. Здесь же приведен анализ подходов к использованию параллельных вычислений при решении подобных задач. Выбор сделан в пользу геометрического параллелизма при разбиении расчетной сетки. Приведен сеточный аналог уравнений, входящих в разработанные математические модели. Стоит отметить наличие рисунков, иллюстрирующих расчет сеточных величин, облегчающих понимание функционирования вычислительных алгоритмов и параллельных технологий.

Разработанные вычислительные алгоритмы реализованы на языке программирования C++ с применением библиотек OpenMP и OpenMPI и использованием объектно-ориентированного и шаблонного подхода.

Вычислительные алгоритмы микроскопического уровня представлены в диссертации сторонними кодами, с которыми разработан интегрирующий файловый интерфейс, позволяющий реализовать многомасштабный подход.

**В третьей главе** описана методика реализации полного цикла вычислительного эксперимента для разработанных моделей. Программное обеспечение реализовано в форме цифровой платформы. При расчетах задействованы кластеры и суперкомпьютерные технологии. Цифровая платформа обеспечивает самостоятельное функционирование всех частей программного обеспечения: отправку и сборку данных для удаленных ресурсов, инициализацию параметров запуска и файлов, непосредственный запуск и контроль вычислительной части, анализ результатов математического моделирования. Для функционирования цифровой платформы реализован веб-сервер.

**Четвертая глава** посвящена анализу результатов проведенного моделирования на некоторых задачах, пригодных для верификации и валидации разработанного подхода. В качестве апробации расчетов характеристик различных явлений используются известные задачи: установление течения Пуазейля, процесс переноса примесей, обессоливание



воды безмембранным способом. Адекватность результатов расчетов позволила сделать вывод о правомочности применения разработанной авторской методики моделирования и корректной работе используемых методов.

Для анализа функционирования программного комплекса в целом исследованы задачи промышленной экологии: электромагнитная очистка жидкости, фильтрация воздушной среды сорбционными фильтрами и образование накипи на тепловыделяющем элементе с последующей очисткой. Анализ результатов компьютерного моделирования показал высокую степень соответствия теоретическим исследованиям в области промышленной экологии.

К основным результатам работы, формирующим **научную новизну** диссертационного исследования следует отнести:

1. Разработка масштабных математических моделей в области промышленной экологии на основе законов механики сплошных сред и молекулярной динамики с использованием расщепления по физическим процессам для учета процессов различной природы.

2. Разработка эффективных вычислительных алгоритмов на неструктурированных сетках для построенных моделей, в основу которых положен метод конечных элементов; их программная реализация с использованием современных компьютерных технологий.

3. Разработка цифровой платформы, включающей в себя вычислительное ядро, содержащее разработанные модели и программные средства для реализации полного цикла вычислений с использованием параллельных технологий и распределенных вычислений.

4. Подробный анализ полученных результатов моделирования: используемые методы апробированы на известных задачах, а цифровая платформа применена для ряда практических задач промышленной экологии.

Такое подробное комплексное исследование актуальных задач, возникающих в области промышленной экологии, основанные на известных

физических законах и математических методах, несомненно стоит отнести к достоинствам работы, равно как и высокий профессиональный уровень описания и разработки полноценной современной цифровой платформы с использованием суперкомпьютерных технологий.

По диссертационной работе имеются следующие замечания:

1. Во введении указано, что отсутствие комплексных исследований процессов очистки связано в том числе с «большим объемом предварительных исследований необходимых для принятия тех или иных вычислительных моделей и компьютерных технологий». Однако, в настоящей работе тоже используются результаты предварительных исследований. Автору следовало отметить преимущество своей работы в части снижения объема предварительных исследований.

2. В диссертационном исследовании не описано, как в разработанном вычислительном алгоритме для решения нестационарных задач выбирается шаг по времени, является ли он постоянным или адаптивным.

3. Из диссертации не ясно, проводилось ли исследование фактического порядка точности разработанного численного метода на задачах, имеющих эталонное решение, или на последовательности сгущающихся сеток.

4. В главе 4 приведены размерности расчетных сеток, но не приведен шаг интегрирования по времени и примерное расчетное время каждой из задач. Указанные данные были бы полезны при оценке времени расчета практических задач.

Указанные замечания не снижают общую **положительную** оценку работы Тарасова Н. И. Диссертационная работа носит характер законченного исследования, последовательно изложенного на высоком научном уровне. Обилие графических материалов существенно повышает уровень понимания работы. Все основные результаты работы являются обоснованными и корректно сформулированными.



Автореферат диссертации полностью соответствует содержанию диссертации. По материалам диссертации опубликовано 13 научных работ, из них: 10 статей в центральных научных журналах, входящих в перечень изданий, рекомендуемых ВАК РФ, 9 статей в изданиях, индексируемых в базах Web of Science и Scopus. Результаты представлены на нескольких международных научных конференциях.

Диссертационная работа соответствует специальности 1 ?.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ:

п. 1 «Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений» (разработаны новые математические модели процессов фильтрации);

п. 2 «Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий» (разработаны эффективные вычислительных алгоритмы с применением современных компьютерных технологий);

п. 3 «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента» (разработана цифровая платформа для полного цикла вычислительного эксперимента с использованием современных технологий).

Таким образом, диссертация Тарасова Никиты Игоревича является научно-квалификационной работой, в которой изложены новые научно-обоснованные математические модели для процессов фильтрации жидкости и газа, на основе которой решены актуальные задачи промышленной экологии. Разработанная методика моделирования может найти свой применение в задачах, связанных с проблемами моделирования многофакторных процессов на макро и микроуровнях, а разработанная цифровая платформа является самостоятельным программным продуктом, обеспечивающим проведение вычислительных экспериментов для подобных задач.

Диссертационная работа Тарасова Никиты Игоревича «Разработка численных алгоритмов и параллельных программ для моделирования некоторых задач промышленной экологии» по актуальности, научной новизне и практической значимости основных результатов соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор – Тарасов Н. И. заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Согласен на включение персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

Доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий лабораторией  
математической химии, ведущий научный  
сотрудник Института нефтехимии и катализа—  
обособленного структурного подразделения  
Федерального государственного бюджетного  
научного учреждения Уфимского федерального  
исследовательского центра Российской  
академии наук (ИНК УФИЦ РАН)

 Губайдуллин Ирек Марсович

Дата « 29 » ноября 2022 г.

Адрес: 450075, г.Уфа, проспект Октября,141.  
Тел.: +7(347) 284-27-50. E-mail: irekmars@mail.ru

Подпись Губайдуллина И.М. заверяю:

учёный секретарь ИНК УФИЦ РАН к.х.н.



 З. С. Кинзябаева