



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное  
бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования**  
«Удмуртский государственный университет»  
(ФГБОУ ВО «УдГУ», УдГУ, ФГБОУ ВО  
«Удмуртский государственный университет»)

РОССИЯ ФЕДЕРАЦИИЫСЬ ТОДОСЪЯ НО ВЫЛИ  
ДЫШЕТОНЪЯ МИНИСТЕРСТВО

«Удмурт кун университет»  
Вылӧ дышетонъя федерал  
коньдэтэн возиськись кун  
дышетон ужьюрт

Университетская ул., д.1, г. Ижевск, 426034 тел. (3412) 68-16-10; факс 68-58-66; ОКПО 02069651; ОГРН 1021801503382; ИНН/КПП 1833010750/184001001; e-mail: [rector@udsu.ru](mailto:rector@udsu.ru); [www.udsu.ru](http://www.udsu.ru)

28 ДЕК 2022 № 5567-12483/30

На № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_

Г \_\_\_\_\_ Г \_\_\_\_\_



УТВЕРЖДАЮ  
Ректор ФГБОУ ВО «УдГУ»,  
д.и.н., профессор Г.В. Мерзлякова

\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

## ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу Тарасова Никиты Игоревича «Разработка численных алгоритмов и параллельных программ для моделирования некоторых задач промышленной экологии», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертационная работа Тарасова Н.И. посвящена математическому моделированию процессов тонкой фильтрации водной и воздушной сред, проводимой после грубой механической и/или химической очистки.

**Актуальность** данной темы обусловлена с одной стороны возрастающими экологическими стандартами, с другой - непосредственными требованиями промышленности, заключающимися в необходимости использования особо чистых веществ с предсказуемыми физико-химическими свойствами (теплоноситель в ядерной промышленности, растворители в фармацевтике, обеспечение беспылевых зон и др.). Применение методов математического моделирования для задач промышленной экологии может решить ряд критических вопросов, включающих: создание цифровых двойников эксплуатирующихся фильтров; разработка и подбор очистных систем, соответствующих актуальным требованиям производства, а также их оптимизация; установление циклов обслуживания в целях обеспечения

требований технологий замкнутого цикла. На сегодняшний день решение перечисленных вопросов во многом основано на применении эмпирических методов и полуэмпирических моделях, не предусматривающих возможности подробного разрешения распределений в исследуемой области и предоставляющих по большей части интегральные параметры фильтра.

Представленная диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованных источников и содержит 139 страниц, в том числе 71 рисунок. Список источников включает 129 позиции.

**Во введении** устанавливается актуальность диссертации для чего приводится описание промышленной экологии и объектов ее исследования. В качестве основного направления работы выбирается моделирование процессов тонкой фильтрации. Ставятся основные цели и задачи исследования, включающие разработку комплексной многомасштабной модели, ее вычислительного алгоритма и программной реализации.

**В первой главе** устанавливается набор основных физических процессов и их моделей, требуемых для отражения эффектов на которых основаны рассматриваемые фильтрационные устройства. Для этого на основе расщепления по физическим процессам конструируется многомасштабный подход, состоящий из двух размерных уровней - микро- и макромасштабного.

Основой микромодели являются методы молекулярной динамики, посредством анализа результатов которых формируется набор коэффициентов, используемых далее в макроподходе. При этом, применять микромодель предлагается локально (истинный многомасштабный подход), либо проводить серию предварительных расчетов, результаты которых формируют табличные зависимости искомых параметров (упрощенный многомасштабный подход).

Макромасштабные модели представлены методами механики сплошной среды и включают в себя:

- квазигидродинамическую систему уравнений для расчета основных параметров течения - скоростей и давления;
- уравнение теплопроводности для отражения тепловых эффектов;
- уравнения конвекции-диффузии для моделирования эволюции концентрации;
- систему уравнений электростатики для моделирования процессов, проходящих при электромагнитной очистке.

Модели механики сплошной среды дополняются необходимыми граничными и начальными условиями, включающие захват гранулами сорбента и стенками нагревательного элемента микрочастиц загрязнителя.

В завершении главы формируется набор базовых задач, состоящий из задач верификации (установление течения Пуазейля, конвекционно-диффузионный перенос концентрации примеси, распределенный по пространству в соответствии с функцией Гаусса и конвективное движение в каверне) и валидации, а также задачи промышленной экологии, в том числе очистка жидкости электромагнитным способом, сорбционная фильтрация воздуха, формирование и удаление накипи на нагревательном элементе.

**Вторая глава** посвящена построению вычислительного алгоритма сформированной комплексной модели, а также его параллельной программной реализации.

Для моделирования микромасштаба использовано свободно распространяемое стороннее программное обеспечение, к которому предусмотрен интерфейс у разработанного программного комплекса.

Вычислительный алгоритм моделей механики сплошных сред или макромоделей для аппроксимации пространственных производных использует метод конечного объема. Временные производные аппроксимированы явно. Предложенные разностные схемы предусматривают использование неструктурированных вычислительных сеток.

Программная реализация вычислительного ядра алгоритма получена на языке программирования С++ с применением библиотек OpenMP и OpenMPI. Параллельность достигается посредством разбиения расчетной сетки на подобласти и последующем многопроцессорном счете.

**В третьей главе** приводится описание разработанной в рамках исследования программной платформы. Предложенный сервис представляет из себя клиент-серверное решение, решающий задачу обеспечения графическим пользовательским интерфейсом полного цикла вычислительного эксперимента на удаленном вычислительном ресурсе, в том числе:

- подготовку исходных кодов и формирование исполняемых файлов на удаленном вычислительном ресурсе;
- подготовка конфигурационных файлов, параметров и исходных данных;
- запуск, управление и слежение за прохождением пользовательского задания;
- анализ выходных данных прикладных приложений;
- формирование базы данных проведенных расчетов.

Посредством данного веб-приложения и встроенного в него вычислительного ядра были проведены модельные расчеты целевых задач.

**В четвертой главе** приведены и проанализированы результаты моделирования поставленных в первой главе рассматриваемых задач. В рамках верификационных задач показана общая корректность разработанного вычислительного алгоритма и его программной реализации. Валидация показала применимость предложенного многомасштабного подхода для моделирования задач фильтрации.

Представленные результаты моделирования для задач промышленной экологии показал хорошее соответствие с теоретическими представлениями о характере процессов фильтрации.

**Заключение** содержит резюме проведенного исследования, список основных результатов и перспективы дальнейшего развития.

**Основными результатами** работы являются:

- 1) разработанные комплексные математические модели, предназначенные для решения некоторых задач промышленной экологии;

- 2) разработанные вычислительные алгоритмы используемых макромоделей, основанные на методе конечного объема, предназначенные для вычислений на неструктурированных сетках;
- 3) параллельную программную реализацию вычислительных алгоритмов;
- 4) цифровую программную платформу, предназначенную для проведения полного цикла вычислительного эксперимента при моделировании задач промышленной экологии.

В рамках диссертационной работы предложены **оригинальные** комплексные модели фильтрации, вычислительные алгоритмы макромоделей и их программная реализация, посредством которой получены **новые** результаты математического моделирования ряда задач промышленной экологии.

**Теоретической значимостью** исследования можно отметить разработку комплексных моделей для решения задач промышленной экологии.

**Практической ценностью** диссертационной работы является разработанное вычислительное ядро и цифровая платформа, его интегрирующая, предназначенная проведения вычислительных экспериментов на удаленных суперкомпьютерах. Предложенные решения формируют в совокупности полноценное программное обеспечение, предназначенное для моделирования процессов фильтрации.

**Достоверность** обуславливается использованием широко применяемого метода расщепления по физическим процессам при конструировании комплексных моделей фильтрации, а элементы, их составляющие, являются корректными постановками начально-краевых задач, основанных на классических моделях механики сплошных сред и молекулярной динамики.

Основные результаты диссертации докладывались на всероссийских и международных конференциях, а также опубликованы в 13 статьях, в том числе 10 из списка ВАК, 9 проиндексированы в базах Web of Science и Scopus.

К работе имеется ряд **замечаний**:

1. Обзор современного состояния исследований по многомасштабным моделям и их распределенной программной реализации не приводится.
2. При представлении микромасштабной модели, использующей уравнения классической динамики Ньютона не приводятся виды граничных условий и реализуемых статистических ансамблей и их обоснование.
3. Непонятен окончательный выбор в работе: это комбинация «упрощенного» и «истинного» многомасштабных подходов. Какой подход используется и зачем приводится повторно «истинно» многомасштабный подход (ИМП) стр. 51.
4. Используемая терминология не всегда понятна и рассматриваемые постановки и алгоритмы прежде всего соответствуют сопряженным задачам с использованием двух уровней (масштабов).
5. Постановка рассматриваемых приведена задач на стр 38-44, а результаты на стр.102. Описание результатов стр. 103-... для какого метода, алгоритма, сетки, затраты на предобработку и вычисления и т. д.?
6. К сожалению не представлено результатов сравнение используемых многомасштабных моделей и моделей механики сплошных сред и известными данными из работы [74].


7. Заключение не содержат конкретных выводов с описанием достигнутых новых результатов исследований по сравнению с ранее полученными результатами (вычислительные затраты, точность, параллельная эффективность и т.п.).

Изложенные замечания не влияют на общую **положительную** оценку работы Тарасова Н.И.

Диссертационная работа Тарасова Н.И. является законченным научным исследованием, является актуальной и обладает научной новизной, теоретической значимостью и практической ценностью. Автореферат соответствует содержанию диссертационной работы. Диссертационная работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям, выполненным по специальности 1.2.2 - Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ и соответствует критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. №842, а ее автор достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Отзыв ведущей организации на диссертацию обсужден на заседании научного семинара кафедры вычислительной механики, протокол заседания № 5 от 2 декабря 2022 г.

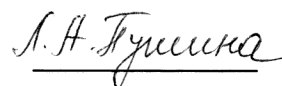
Отзыв подготовил  
заведующий кафедрой вычислительной  
механики ИМИТиФ ФГБОУ ВО «УдГУ»,  
д.ф.-м.н., профессор

  
С.П. Копысов

Подпись С.П. Копысова заверяю

Учёный секретарь  
Ученого совета ФГБОУ ВО «УдГУ»





**Полное наименование организации:** Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Удмуртский государственный университет»

**Адрес:** 426034, Удмуртская Республика, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

**Телефон:** 8(3412) 68–16–10

**Сайт организации:** <https://www.udsu.ru/>

**e-mail:** rector@udsu.ru