## ОТЗЫВ

официального оппонента 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»

Актуальность. Промышленная экология представляет собой область науки, исследующей вопросы влияния человеческой деятельности на Существенное увеличение окружающую среду. последние промышленных мощностей и сельскохозяйственных угодий, а также появление новых технологических направлений все больше актуализирует вопросы рационального и бережливого использования природных ресурсов. Одним из путей решения этой проблемы служит переход к технологиям безотходного или замкнутого цикла. Не менее важным является также фактор обратного влияния окружающей среды на промышленные установки и сельхозугодия. Например, использование жесткой воды в трубопроводах может привести к образованию известкового налета или накипи, что существенно уменьшает свободный просвет труб и повышает в них давление. Это может привести к авариям и загрязнению множества технологических устройств. Подобные проблемы особенно актуальны в атомной энергетике, на химических производствах, в медицинской и пищевой промышленности. Другим примером служит проблема сохранения природной окружающего воздуха. Для ее решения на промышленном производстве и на транспорте прибегают к организации сложных очистных систем. В итоге, промышленная очистка водной и воздушной сред является в современной ситуации одним из магистральных направлений устойчивого развития промышленности и хозяйства.

При разработке технологий промышленной очистки водной и воздушной сред в современной ситуации на первый план выходят детальные теоретические исследования процессов загрязнения и их купирования различными методами. В этом направлении возникает острая необходимость математического моделирования аппарата И программного эффективной реализации инструментария современных на для его компьютерных системах. В настоящее время актуальность такого развития обусловлена повышением требований к детализации анализа математических задач экологической направленности, в том числе за счет усложнения математических моделей и учета в них все большего количества физических факторов.

В диссертационной работе Тарасова Н.И. предлагается многомасштабный математический подход для моделирования физических процессов на этапе тонкой фильтрации водной и воздушной сред,

следующем за механической и химической их очисткой. В качестве моделируемых процессов в диссертации рассматриваются электромагнитная фильтрация воды, фильтрация воздуха гранулированными сорбентами, а также процессы образования накипи на нагревательных элементах очистных Многомасштабный подход заключается масштабных уровней математического описания процессов загрязнения и Микроскопическая модель макроскопическом. микро-И предназначена для анализа процессов осаждения загрязнений на стенках очистной системы, в том числе на ее активных элементах типа гранул сорбентов и тэнов (тепло-электронагревательных элементов). Она базируется на уравнениях молекулярной динамики. С ее помощью рассчитываются параметры граничных условий и уравнений состояния среды, используемые в рамках макромодели. Макроскопическая модель использует приближение механики сплошных сред и описывает процессы течения многофазной многокомпонентной среды через фильтры, эволюцию концентраций вредных твердых примесей, электромагнитные и температурные эффекты, связанные с режимами работы очистной системы. С ростом производительности современной компьютерной техники разработка подобных многоуровневых многомасштабных моделей представляется актуальной темой исследования.

**Содержание работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, изложенных на 139 страницах и содержит 71 рисунок.

Во введении обсуждается актуальность проведенного исследования, научная новизна, теоретическая и практическая значимость.

физических процессов, рассмотрению посвящена глава происходящих при тонкой фильтрации сред, для которых определяется набор двумасштабный формирующий подход. уравнений, для микроуровневой модели используется стороннее Отмечено, программное обеспечение. Основой же макромасштабного подхода при выступила квазигидродинамическая моделировании течений уравнений, уравнения конвекции-диффузии эволюции примеси, а также моделирования электростатики теплопроводности ДЛЯ И фильтрационных эффектов. В заключении главы приводится список задач верификации и валидации.

Вторая глава описывает разработанный для моделей механики сплошных сред вычислительный алгоритм, приводятся необходимые разностные выражения. Основой для сконструированной разностной схемы допускающий использование объема, метод конечного являлся описания лучшего сеток для неструктурированных фильтрационных устройств. Временные производные аппроксимированы явно. Кроме того, вполне подробно изложена разработанная в рамках исследования параллельная программная реализация вычислительного алгоритма.

В третьей главе приведено описание архитектуры и реализации цифровой платформы, функциональное назначение которой заключается в

проведении полного цикла вычислительного эксперимента В интегрального веб-сервиса на удаленных вычислительных pecypcax. Представленное решение обеспечивает поддержку подготовки приложений к формирование исходных данных прикладных приложений, слежение и управление пользовательскими заданиями, а также анализ результатов математического моделирования.

В четвертой главе анализируются результаты вычислительных экспериментов, постановки которых представлены в первой главе. Проведенные верификационные расчеты хорошо соотносятся с аналитическими решениями, также наблюдается сеточная сходимость.

В заключении приводятся основные результаты исследования.

В качестве **основных результатов** можно выделить следующие положения:

- 1) набор комплексных моделей макроуровня, предназначенных для математического моделирования задач промышленной экологии;
- 2) вычислительный алгоритм моделей макроуровня, использующий метод конечного объема;
- 3) параллельная программная реализация вычислительного алгоритма;
- 4) цифровая платформа для проведения вычислительных экспериментов на удаленных вычислительных ресурсах, а также результаты математического моделирования, полученные с ее помощью.

Обоснованность. Обоснованность результатов диссертационной работы заключается использовании классических подходов математическому моделированию, в том числе методов механики сплошной среды, метода расщепления по физическим процессам и молекулярной динамики. Базовый динамический численный алгоритм, положенный в основу большинства разработанных в рамках диссертации расчетных процедур, построен на основе широко применяемого сеточного метода конечных объемов, адекватность которого подкрепляется представленными в работе верификационными и валидационными вычислениями.

Научная новизна. Результаты, полученные в диссертационной работе являются новыми. В том числе новой является комбинация моделей макроскопического и микроскопического уровней, а также методы их сопряжения, реализующие многомасштабный подход. Новыми являются вычислительные алгоритмы и программные реализации, относящиеся к интегрированию квазигидродинамической и квазигидродинамической систем уравнений при описании течений водной и воздушной многокомпонентных сред на трехмерных нерегулярных сетках. В совокупности с уравнениями конвекции-диффузии для концентраций примеси и уравнениями для потенциала электрического поля эти системы дают новую информацию о моделируемых физических процессах. Также новизной и оригинальностью обладает предложенная архитектура и программная реализация вебплатформы, предназначенной для решения выбранного класса задач.

**Теоретическая и практическая значимость.** Предложенные в рамках диссертации комплексные многомасштабные модели являются достаточно общими и представляют теоретический интерес, не исчерпывающийся задачами тонкой фильтрации, и допускают введение учета дополнительных физических факторов.

К практической значимости работы можно отнести разработанные численные алгоритмы, параллельный программный код и цифровую платформу, реализующие полномасштабный вычислительный эксперимент в выбранной предметной области с помощью современных компьютерных и суперкомпьютерных систем посредством сетевого графического вебинтерфейса.

**Достоверность.** Основные результаты работы докладывались на ряде всероссийских и международных конференций, они опубликованы в 13 статьях в рецензируемых изданиях, 10 из которых находятся в списках ВАК, 9 индексируются в базах цитирования Web Of Science и Scopus.

В ходе ознакомления с текстом диссертации возникли следующие вопросы и замечания:

- 1) В работе недостаточно отражены преимущества, обеспечиваемые применением многомасштабный подхода. Для чего вводится микромасштабная модель: уменьшение количества исходных эмпирических данных, увеличение точности результатов?
- 2) Во второй главе при описании программной реализации приведены используемые методы распараллеливания, однако отсутствуют замеры ускорения и эффективности полученного параллельного приложения.
- 3) В четвертой главе при описании результатов математического моделирования не приведены реальные времена расчетов и необходимое для достижения стационарного состояния количество итераций.

Представленные замечания носят редакционный характер и не влияют на общую высокую оценку диссертационной работы.

работа Тарасова Н.И. Заключение. Диссертационная законченной научно-квалификационной работой, имеющей научную новизну практическую значимость. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Содержание и результаты работы удовлетворяют паспорту научной специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» и соответствуют требованиям п. 9 Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. №842, а ее автор, Тарасов Никита Игоревич достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой вычислительной математики механикоматематического факультета МГУ Кобельков Георгий Михайлович

29 декабря 2022 г.

Адрес: 119899 Москва, Ленинские горы дом 1,

Механико-математический факультет

МГУ им. М.В.Ломоносова Телефон: +7 (495) 9391244

Эл. почта: kobelkov@dodo.inm.ras.ru

Подпись Кобелькова Г.М. заверяю:

Декан мех-мат ф-та МГУ

член-корр. РАН А.И.Шафаревич

29 декабря 2022 г.