

«УТВЕРЖДАЮ»



Директор ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

чл.-корр. РАН

А.И. Аптекарев

2022 г.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного учреждения "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук".

Диссертация «Разработка численных алгоритмов и параллельных программ для моделирования некоторых задач промышленной экологии» выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук».

В период подготовки диссертации соискатель Тарасов Никита Игоревич работал в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» в должности младшего научного сотрудника.

В 2017 г. окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» по направлению подготовки 14.04.02 Ядерная физика и технологии. В 2021 г. окончил очную аспирантуру Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» по направлению подготовки 09.06.01 Информатика и вычислительная техника.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Поляков Сергей Владимирович работает в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» в должности ведущего научного сотрудника в отделе № 16.

По итогам обсуждения диссертации Тарасова Н.И. **принято следующее заключение:**

**Тема диссертации является актуальной** поскольку при исследовании вопросов промышленной экологии необходимо иметь инструмент прецизионного моделирования процессов, проходящих в фильтрационных установках, как с целью разработки новых высокоэффективных конструкций, так и для обслуживания уже существующих очистных систем.

**Целью** диссертационной работы является разработка вычислительного ядра и цифровой платформы для компьютерного и суперкомпьютерного моделирования процессов прецизионной фильтрации водной и воздушной сред от загрязняющих нейтральных и заряженных мелкодисперсных примесей.

В диссертации решались следующие **задачи:**

- 1) анализ существующих промышленных методов и систем очистки водной и воздушной сред от загрязняющих примесей, выбор актуальных проблем в классе технологий, обеспечивающих прецизионное качество, формулировка модельных задач экологии;
- 2) обзор методов математического моделирования фильтрационных процессов для выбранных постановок задач, разработка комплексного многомасштабного подхода,

- формулировка конкретных математических моделей на основе уравнений механики сплошной среды и дополнение их материальными уравнениями среды, сформированными на основе методов частиц и молекулярной динамики;
- 3) разработка численных методов и параллельных алгоритмов для решения выбранных двух- и трехмерных модельных задач в рамках макроскопических описаний с акцентом на использование неструктурированных гибридных сеток, а также численных процедур уточнения материальных уравнений среды и параметров уравнений методами частиц;
  - 4) программная реализация численных методов решения базовых уравнений механики сплошной среды в двухмерной и трехмерной постановке, разработка вычислительных кодов для решения выбранных модельных задач;
  - 5) разработка архитектуры и программная реализация цифровой платформы, обеспечивающей полный цикл компьютерного моделирования;
  - 6) проведение серии вычислительных экспериментов с целью верификации и валидации разработанных моделей, численных методов, алгоритмов и программ.

#### **Основные результаты диссертации:**

- 1) разработаны новые комплексные математические модели, применяемые в задачах экологической направленности, а именно:
  - а) квазигидродинамическая модель течения водной среды с учетом динамики электромагнитного поля и процессов конвекции и диффузии заряженных примесей;
  - б) квазигазодинамическая многокомпонентная модель течения воздушной среды с учетом наличия в ней твердых наноразмерных частиц;
  - в) квазигидродинамическая многокомпонентная модель течения жидкой среды с учетом процессов конвекции, диффузии и химических превращений,и способы их агрегирования в рамках многомасштабного подхода;
- 2) предложены численные методы анализа разработанных комплексных моделей, основанные на методе конечных объемов на неструктурированных сетках, выполнены их программные реализации, ориентированные на использование современных компьютерных и суперкомпьютерных вычислительных систем;
- 3) создана цифровая платформа, включающая вычислительное ядро, базирующееся на разработанных комплексных моделях, и дополнительный программный инструментарий, реализующий всю цепочку вычислительного эксперимента при решении актуальных прикладных задач экологической направленности;
- 4) в рамках верификации и валидации комплексных математических моделей и их программной реализации получены результаты численного моделирования для ряда практических задач промышленной экологии.

**Все результаты диссертации получены лично соискателем.**

**Научной новизной** диссертационной работы является комплекс математических моделей, предназначенных для моделирования процессов тонкой очистки водной и воздушной сред, их численная и программная реализация, а также цифровая платформа для проведения вычислительных экспериментов на суперкомпьютерах.

**Теоретическая ценность** работы состоит в создании и использовании оригинального многомасштабного подхода, объединяющего классические подходы механики сплошных сред и динамики частиц.

**Практическая значимость** заключается в создании прототипа цифровой платформы и комплекса программ (вычислительном ядре) для суперкомпьютерного моделирования процессов очистки водной и воздушной сред от загрязняющих их примесей на основе макроскопических описаний, уточненных за счет использования расчетных данных, полученных с помощью микроскопических моделей частиц.

**Достоверность результатов** диссертации обусловлена использованием при разработке комплексных математических моделей и методов их численной реализации хорошо известных, обоснованных и неоднократно проверенных математических подходов, в том числе классических моделей сплошной среды, моделей динамики частиц и сеточного метода конечных объемов.

Материалы диссертации полно представлены в работах, опубликованных соискателем. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в следующих рецензируемых научных журналах:

1. Kudryashova, T., Polyakov, S., Tarasov, N. A novel parallel algorithm for 3D modelling electromagnetic purification of water // MATEC Web of Conferences 210, 04027, CSCC 2018 2018. 1-5 pp. DOI: <https://doi.org/10.1051/matecconf/201821004027> [Scopus]
2. Н.И. Тарасов, Ю.Н. Карамзин, Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков. Моделирование потока несжимаемой вязкой жидкости с помощью метода двойного потенциала // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 247. 20 с. DOI: <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-247> [БАК]
3. Sergey Polyakov, Tatiana Kudryashova, and Nikita Tarasov. Optimization of Parallel Computations for Modeling Water Purification Processes by Electromagnetic Method // EngOpt 2018 Proceedings of the 6th International Conference on Engineering Optimization, - Springer, Cham, 2019, pp. 754-765. DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-319-97773-7\\_66](https://doi.org/10.1007/978-3-319-97773-7_66) [Springer]
4. Tatyana Kudryashova, Sergey Polyakov, and Nikita Tarasov. Application of the Double Potential Method to Simulate Incompressible Viscous Flows // J.M.F. Rodrigues et al. (Eds.): ICCS 2019, LNCS 11539, pp. 568-579, 2019. DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-030-22747-0\\_42](https://doi.org/10.1007/978-3-030-22747-0_42) [Springer]
5. N.I. Tarasov, S.V. Polyakov, Yu.N. Karamzin, T.A. Kudryashova, V.O. Podryga, D.V. Puzyrkov. Incompressible Viscous Flow Simulation Using the Quasi-Hydrodynamic Equations' System // Mathematical Models and Computer Simulations, 2020, Vol. 12, No. 4, pp. 553-560. DOI: <https://doi.org/10.1134/S2070048220040183> [Scopus]
6. С.В. Поляков, Ю.Н. Карамзин, Т.А. Кудряшова, В.О. Подрыга, Д.В. Пузырьков, Н.И. Тарасов. Многомасштабное суперкомпьютерное моделирование процессов очистки газа методом адсорбции // Вычислительные методы и программирование. 2020. Т. 21. С. 64-77. DOI: <https://doi.org/10.26089/NumMet.v21r106> [БАК]
7. S.V. Polyakov, T.A. Kudryashova, N.I. Tarasov. Double potential method for modeling the internal flow of a viscous incompressible liquid // Doklady Mathematics, 2020, Vol. 102, No. 2, pp. 418-421. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1064562420050397> [WoS, Scopus]
8. V.O. Podryga, S.V. Polyakov, N.I. Tarasov. Developing of Multiscale Approach to HPC-Simulation of Multiphase Fluid Flows // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2021, Vol. 42, No. 11, pp. 2623-2633. <https://doi.org/10.1134/S1995080221110160> [Scopus]
9. S.V. Polyakov, T.A. Kudryashova, and N.I. Tarasov. Application of the Multiscale Approach to Simulation of Air Sorbent Filtration // Doklady Mathematics, 2021, Vol. 104, No. 5, pp. 297-300. DOI: [10.1134/S1064562421050094](https://doi.org/10.1134/S1064562421050094) [WoS, Scopus].
10. Tarasov N., Karamzin Yu., Kudryashova T., Podryga V., Polyakov S. Computer modeling of air flows purification using sorption filters // Journal of Physics: Conf. Series (JPCS). - 2021. - V. 2028. - Paper 012025 (7 p.). <https://doi.org/10.1134/S1064562421050094> [Scopus]
11. Kudryashova, Tatiana A., Sergey V. Polyakov, and Nikita I. Tarasov. Mathematical Modelling of Electrophysical Water Treatment. // Defect and Diffusion Forum, vol. 412, Trans Tech Publications, Ltd., 12 Nov. 2021, pp. 149-162. DOI: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/ddf.412.149> [Scopus]
12. Н.И. Тарасов Архитектура и реализация цифровой платформы для проведения вычислительных экспериментов на суперкомпьютерах // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 50. 30 с. DOI: <https://doi.org/10.20948/prepr-2022-50> [БАК]

**Личный вклад соискателя** состоит в формировании набора математических моделей для исследования процессов тонкой фильтрации, разработке общего численного алгоритма,

основанного на классическом методе конечного объема, программной реализации вычислительного ядра и цифровой платформы.

**Содержание диссертации соответствует специальности 1.2.2 - математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.**

Диссертация «Разработка численных алгоритмов и параллельных программ для моделирования некоторых задач промышленной экологии» Тарасова Никиты Игоревича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2. - Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Заключение принято на расширенном заседании научного семинара 15-го отдела ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Присутствовало на заседании 16 чел.

Результаты голосования: "за" - 16 чел., "против" - 0 чел., "воздержалось" - 0 чел., протокол N 5 от "23" 06 2022г.



Тишкин Владимир Федорович  
член-корр. РАН, д.ф.-м.н., зав. отд. №15



Кулешов Андрей Александрович  
д.ф.-м.н., г.н.с. отд. №15