

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук Загидуллина Ришата Раилевича на тему: "Математическое моделирование пространственно-неоднородных процессов агрегации" по специальности 1.2.2 – "Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ"

В своей диссертационной работе Загидуллин Р.Р. представил инструментарий для моделирования процессов коагуляции в неоднородной среде. Подобные процессы могут встречаться, например, в метеорологии, экологии и астрофизике. Они требуют своего количественного изучения, что возможно только с привлечением всех возможностей, всех аспектов математического моделирования, а именно, проникновения в физическую суть изучаемых явлений, их адекватную математическую формализацию, применение современных численных методов, проведение серии вычислительных экспериментов с исполнением соответствующих реализаций на различных компьютерных архитектурах и оформлением полученного вычислительного опыта в виде программных библиотек, открытых для свободного доступа. Таким образом, в работе затронуты все аспекты научной специальности 1.2.2 – "Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ".

Работа поделена на 3 главы. В первой главе рассматриваются одномерные неоднородные системы. Сначала строится простая базовая модель, от которой дальше предпринимаются действия по постепенному усложнению рассматриваемых систем и получения на каждом этапе новых результатов. В простейшем случае неоднородность коагулирующей системы изучается путем добавления в основное уравнение (Смолуховского) члена, отвечающего за перенос агрегирующих частиц в одномерном пространстве.

После получения численного решения с помощью одного из вариантов TVD - схемы с условием на правой границе в виде поглощающего слоя для моделирования переноса и ускорения вычисления интегралов построим скелетное разложение ядра коагуляции при помощи крестового алгоритма, Загидуллин далее усложняет модель путем добавления в рассматриваемую систему диффузии, а также члена, отвечающего за генерацию самых мелких частиц. Благодаря последнему члену для системы удастся получить аналитическое решение, полезных не только как тесты для верификации численных расчётов, но и для качественного понимания рассматриваемых явлений. Тут стоит отметить, что уравнение Смолуховского представимо как в непрерывном, так и в дискретном виде. Оба варианта используются в диссертационной работе. В конце первой главы Загидуллин Р.Р. приводит пример использования рассмотренной ранее модели для описания динамики загрязнения атмосферы на основе данных, взятых в акватории озера Байкал.

Во второй главе происходит переход к моделированию двумерных и трехмерных неоднородных систем. На данном этапе постановки задач носят модельный характер (для наглядности понимания построенных графиков говорится о моделировании загрязнения рек и движении агрегирующих частиц в атмосфере), и основной акцент смещается в сторону вычислительных методов и компьютерной симуляции. В частности, автор пишет, что для моделирования процессов в двумерном и трехмерном пространствах использовались в том числе расчеты на неструктурированных сетках с использованием метода конечных объемов. Экспериментальная сходимость построенных численных схем исследуется с помощью расчета относительной погрешности численного решения при измельчении сетки. Стоит сказать, что в одномерном случае подобные расчеты не проводились, потому что численный расчет напрямую сравнивался с полученными в работе аналитическими выводами, что ещё раз показывает необходимость исследования модели всеми доступными средствами. Далее в диссертации представлена подглава о выводе ядра коагуляции в условиях

пространственной неоднородности, показывающая, что пространственная неоднородность не ограничивается добавлением переносного члена, а влияет на сам процесс коагуляции. Для этого вывода тоже необходимо провести двумерные расчеты, что приводит к получению робастной полуэмпирической формулы, что также можно отнести к одному из результатов работы.

Третья глава посвящена параллельным вычислениям, которые использовались во время выполнения расчетов для написания диссертационной работы. Предлагаются различные варианты распараллеливания представленных численных схем во всех изученных размерностях неоднородной среды. Также проведены расчеты на суперкомпьютере и представлены результаты по производительности параллельных численных схем. Для расчетов в двумерной и трехмерной средах автор использует в том числе расчеты на ГПУ. Согласно полученным результатам такие гибридные схемы дают прирост в производительности выше, когда размерность рассматриваемой системы больше. Это объясняется тем, что в таких случаях вычислительная машина получает достаточно крупный массив данных, что позволяет увеличивать долю расчетного времени, когда процессору необходимо выполнять некоторую работу, не обмениваясь с другими процессорами.

В заключении диссертации говорится о получении следующих результатов, которые отражают большой объём проделанной работы:

- 1) Реализован эффективный численный метод решения уравнения, описывающего перенос коагулирующих частиц в 1/2/3D пространствах;
- 2) Получено аналитическое решение для агрегирующей системы с диффузией частиц, адвекцией и источником мономеров в одномерном случае;
- 3) Предложен способ моделирования динамики загрязнения рек с использованием уравнений адвекции и коагуляции, а также представлена трехмерная модель динамики агрегирующих частиц в атмосфере;

- 4) *Исследована численно и аналитически кинетика агрегации седиментирующих частиц на основе уравнения переноса-диффузии;*
- 5) *Представлен и протестирован способ численного решения уравнений пространственно-неоднородной коагуляции на параллельных архитектурах, позволяющий получить ускорение вычислений более чем в 300 раз;*
- 6) *Продемонстрированы способы гибридной эксплуатации ЦПУ и ГПУ в параллельной реализации численного алгоритма, приводящий к дополнительному ускорению вычислений в 2 – 4 раза.*

По моему мнению, диссертация написана на актуальную тему, хорошим языком. Результаты работы, указанные в заключении, обладают научной новизной и практической значимостью.

Тем не менее, я бы хотел представить ряд замечаний по работе.

- 1) Явления переноса гораздо более эффективно описываются не с помощью эйлерова подхода, оперирующего понятием сплошной среды и приводящего к разностным методам, а с помощью подхода Лагранжа, в основе которого лежит представление о среде как о совокупности составляющих её объектов, что является главной идеей различных методов частиц. Сама система уравнений Смолуховского является макроскопическим порождением описания взаимодействий микроскопических капель, которые совершают движение в сильно неоднородной среде, слипаясь и разваливаясь. Метод частиц является и теоретическим, и численным способом изучения больших сложных систем такого рода.
- 2) Те же соображения можно высказать и по поводу моделирования диффузии, которая есть не что иное как броуновское движение, наиболее адекватным математическим описанием которого является аппарат стохастических дифференциальных уравнений по винеровской мере, приводящий к использованию стохастических методов частиц. Последние часто именуют методами Монте - Карло и в силу своей

естественной распараллеливаемости широко используют для суперкомпьютерных расчётов интегро-дифференциальных задач высокой размерности, которыми и занимается автор диссертации.

- 3) Большое, может быть, даже излишнее, место уделено аналитическим изысканиям решений задач в упрощённых постановках. Это позволяет глубже вникнуть в физику и получить одномерные тесты, которые однако мало пригодны для многомерных вариантов.
- 4) Использование треугольных и тетраэдральных расчетных сеток в работе является интересным аспектом. Численные схемы в таких случаях строить сложнее с точки зрения программной реализации. Тем не менее необходимость использования подобных сеток для задач в относительно простых областях вряд ли оправдано. Представленные модельные задачи для двумерного и трехмерного случая можно было бы решить и на декартовой сетке.

Несмотря на наличие описанных выше недочётов, работа выполнена на высоко качественном уровне. Надеюсь, замечания помогут автору диссертации с большим интересом продолжить свою научную карьеру.

Диссертация Загидуллина Ришата Раилевича отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным в пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а также оформлена согласно требованиям Положения о совете по защите диссертации на соискание ученой степени кандидата наук Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Таким образом, соискатель Загидуллин Ришат Раилевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по

специальности 1.2.2. – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент:

Доктор физ.-мат. наук, доцент

Профессор кафедры вычислительных методов

факультета вычислительной математики и кибернетики

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»

Богомолов Сергей Владимирович

13 февраля 2024

Контактные данные:

тел.: +7(916)384-05-54, e-mail: bogomo@cs.msu.su

Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:

05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Адрес места работы:

119991, Москва, Ленинские горы, д.1 стр. 52

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», факультет вычислительной математики и кибернетики

Тел.: +7(495) 939-21-95; e-mail: bogomo@cs.msu.su

Подпись профессора кафедры вычислительных методов ВМК МГУ

С.В. Богомолова удостоверяю: