

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»

Актуальность исследования. В диссертации Загидуллина Р.Р. рассматриваются задачи моделирования процессов агрегации частиц с учетом пространственно неоднородного их распределения.

Модели агрегации описывают поведение систем из большого числа частиц различных размеров, в которых распределение частиц по размерам может меняться из-за их слипания. Такие задачи возникают при моделировании поведения коллоидных растворов, суспензий, при моделировании распространения пылевых и мелкодисперсных примесей в воздушной и водной среде.

В случае, когда процесс происходит в ограниченной области и его можно считать однородным по пространству, рассматривается эволюция во времени функции, описывающей распределение концентрации частиц по их размерам. В основе моделирования процессов агрегации обычно лежат уравнения Смолуховского. Эти уравнения имеют форму интегро-дифференциального уравнения в случае непрерывного распределения частиц по размерам, либо системы из большого числа обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих эволюции концентрации дискретных типов частиц. Последние уравнения можно так же рассматривать

как уравнения, возникающие при численной дискретизации уравнения для непрерывного распределения частиц. Существенные трудности здесь возникают из-за необходимости рассмотрения большого числа типов частиц. Такие задачи в последнее время успешно решаются, в том числе с применением специальных быстрых матричных алгоритмов, позволяющих рассматривать системы с числом уравнений в десятки и сотни тысяч.

Существенно более сложных класс задач представляет описание процесса агрегации частиц, развивающегося на фоне перемещения ансамбля частиц в пространстве. Такие задачи возникают при моделировании распространения загрязнений в атмосфере и водоемах, распространения и осаждения сажи и пыли в воздуховодах, воздухозаборниках и соплах силовых установок различных типов, распылении аэрозолей в движущуюся среду. Здесь неизвестной является плотность распределения частиц по размерам, которая зависит как от времени, так и от пространственных координат. При решении таких задач нужно учитывать одновременно процессы переноса частиц в среде и их коагуляцию.

Базовой моделью для таких задач является уравнение переноса для плотности распределения частиц, в котором добавлена правая часть в виде интегрального оператора, отвечающего за коагуляцию. Численное моделирование пространственно неоднородных процессов агрегации на его основе есть практически неисследованное научное направление. Проблемы здесь связаны как с большой вычислительной сложностью возникающей задачи из-за необходимости рассматривать поведение большого числа типов частиц в каждой точке пространства, так и с подбором ядер коагуляции, описывающих взаимодействие частиц разных размеров. Здесь нужно заметить, что известные ядра коагуляции, описывающие взаимодействие частиц в однородном случае, обычно описывают коагуляцию в неподвижной среде и могут оказаться не применимыми при рассмотрении процессов в подвижной среде.

Сказанное позволяет сделать вывод, что тема диссертации связана с решением актуального и при этом мало изученного класса задач.

Характеристика основных результатов диссертации.

В главе 1 рассмотрено одномерное по пространственной переменной уравнение, описывающее перенос и коагуляцию. Для его решения построена численная схема, основанная на расщеплении при интегрировании по времени процессов коагуляции и переноса. При этом для эффективного вычисления интегрального оператора осуществляется скелетное разложение ядра коагуляции, а для вычисления интегралов использована формула трапеций. Далее приводятся примеры численного решения модельного уравнения, в которых, в частности, показана практическая сходимость алгоритма при уменьшении шагов дискретизации по времени и пространственной координате. Так же проведен анализ вычислительной сложности алгоритма, который показывает, что без применения малоранговой аппроксимации ядра коагуляции, алгоритм практически не работоспособен. Далее проведен аналитический анализ рассматриваемого уравнения для определенного, практически значимого ядра коагуляции, в результате которого получены асимптотики, позволяющие получать стационарные решения. Проведены численные исследования, в которых получено согласование численных решений с аналитическими результатами. В разделе 1.3 описано приложение одномерной модели к описанию распределения загрязнения воздуха по высоте и влиянию на него распределения озона в атмосфере. Получено адекватное согласование результатов расчета с данными наблюдений.

В главе 2 рассмотрены двумерная и трехмерная по пространственным переменным модели.

Двумерная модель рассмотрена в привязке в задаче распространения загрязнения в форме твердых частиц в русле реки. В качестве упрощающего предположения, рассмотрено распространение загрязнения в зависимости от

координаты вдоль русла реки и глубины. При этом в уравнении переноса учитывается осаждение частиц из-за их вертикального движения со скоростью, определяемой их плотностью и гидродинамическим сопротивлением.

Трехмерная модель рассмотрена на примере распространения аэрозоля, вбрасываемого точечным источником в ветровой поток. Распределение скорости ветрового потока рассчитывалась как для турбулентного течения в пакете OpenFOAM. Здесь исследование начато с вывода формулы для ядра коагуляции на основе рассмотрения законов движения частиц с учетом диффузии.

В главе 3 описана программная реализация используемых алгоритмов. Здесь большое внимание уделено описанию параллельного алгоритма, его балансировке. Приведены данные по масштабируемости полученной программы.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций. Их достоверность.

Построение численных схем основано на строгом математическом аппарате. При построении схемы аппроксимации переноса использованы известные алгоритмы с подбором параметров, обеспечивающих их устойчивость. Для всех рассмотренных задач автором проведены вычислительные эксперименты, показывающие практическую сходимость получаемых решений. Так же, где это было возможно, проводилось сравнение с аналитическими решениями и оценками, для одномерного случая проведено сравнение с данными наблюдений на примере задачи распределения пылевых загрязнений воздуха по высоте.

Научная новизна полученных результатов.

Научная новизна данной работы мне в первую очередь видится в том, что для уравнения агрегации частиц с учетом переноса построен

работоспособный численный метод, позволяющий решать пространственно неоднородные задачи агрегации ансамблей частиц в движущейся среде. Построение такого метода потребовало соединения в единый алгоритм численных схем решения уравнения переноса, аппроксимации интегральных операторов, а так же, что очень важно, привлечения методов малоранговой аппроксимации ядер интегральных операторов. Так же новыми являются аналитические асимптотики для решения задачи в одномерном случае, построение ядер коагуляции для некоторых конкретных задач.

Научная и практическая значимость полученных результатов.

Научная значимость работы видится в том, что показана принципиальная возможность решения сложных задач коагуляции частиц в пространственно-неоднородном случае на основе разработанных автором вычислительных алгоритмов. С практической точки зрения большое значение имеет разработка комплекса программ, в том числе для многопроцессорных вычислений, позволяющего решать важные задачи рассматриваемого класса.

По результатам диссертации опубликовано 7 печатных работ в периодических научных журналах, индексируемых хотя бы в одной из баз данных: Web of Science и Scopus, RSCI. Все основные результаты, выносимые на защиту, отражены в публикациях автора.

Автореферат в полной мере отражает основное содержание диссертации.

Замечания.

1. По разделу 1.3, где описано приложение одномерной модели к описанию распределения загрязнения воздуха по высоте и влиянию на него распределения озона в атмосфере. В этой модели, во-первых, не очень понятно, о каких именно частицах идет речь, оказывает ли на них влияние наличие горизонтальных ветровых потоков. Во-вторых, как подбирались

параметры модели (коэффициенты ξ, χ в формуле (1.69), определяющие скорость реакции озона с поверхностью; коэффициент γ_1 в формуле (1.71); почему в формулах (1.71) и (1.49) брались значения $K_0^{ball} = 1, K_0^{br} = 1$).

2. В разделе 2.1, где решалась задача о распространении примеси (грязи) в реке, не выписано ядро коагуляции. Поэтому вопрос: какое ядро бралось, из каких соображений? Так же возникает вопрос – а насколько здесь вообще оправдана двумерная постановка: при этом не учитывается изменение сечения и кривизна русла реки, трехмерный вихревой характер течения.

3. С другой стороны, при рассмотрении трехмерной задачи о распространении аэрозольной примеси для формирования поля скоростей воздушного потока используется прямое моделирование в пакете OPENFOAM. Возникает вопрос с какой целью? Если речь идет о потоке над плоской поверхностью, то существуют сертифицированные данные о профиле скорости ветра, наличии пульсационной составляющей, причем, в зависимости от типа местности со стороны ветра. Или расчеты проводились для неплоского рельефа? С учетом зданий и сооружений?

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Содержание диссертации соответствует специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным 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 диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора 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 физико-математических наук,
Ведущий научный сотрудник Научно-исследовательского центра
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Московский государственный университет имени
М.В.Ломоносова»

СЕТУХА Алексей Викторович

9 февраля 2024 г.

Контактные данные:

тел.: 7(917)5443497, e-mail: setuhaav@rambler.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:

01.01.07 – Вычислительная математика

Адрес места работы:

119234, г. Москва, ул. Ленинские Горы, д. 1, стр. 4,
МГУ имени М.В.Ломоносова, НИВЦ.

Тел.: +7 495 939-54-24; сайт: <https://rcc.msu.ru/contact>

Подпись ведущего научного сотрудника НИВЦ МГУ, д.ф.-м.н. Сетухи А.В.
заверяю.

Ведущий специалист отдела кадров
НИВЦ МГУ имени М.В.Ломоносова

Смирнова Л.А.