

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

Диссертационная работа Загидуллина Ришата Раилевича “Математическое моделирование пространственно-неоднородных процессов агрегации” посвящена разработке и реализации методов аналитического исследования и численного решения уравнений агрегации для пространственно-неоднородных сред, включая разработку соответствующего программного комплекса. Полученные результаты базируются на методах компьютерного моделирования процессов агрегации частиц в пространственно-неоднородной среде для класса задач с переносом, диффузией и коагуляцией частиц. Для численной аппроксимации уравнений использованы как явные, так и неявные схемы, реализованные как на регулярных, так и на неструктурированных сетках с возможностью проводить расчеты на больших вычислительных кластерах с использованием алгоритмов параллельных вычислений.

Актуальность работы. Процессы агрегации частиц в пространственно-неоднородных средах лежат в основе многих физических явлений. В качестве примера можно отметить поведение радиоактивных частиц в различных технологических системах атомных энергетических установок и поведение атмосферных аэрозолей. Однако только в немногих случаях известны аналитические решения уравнений для описания данных процессов. В большинстве случаев необходимо использовать различные методы компьютерного моделирования. Поэтому исследования в этом направлении являются несомненно актуальными, полезными и необходимыми. Более того,

реализация рассмотренных моделей и методов решения в виде многофункционального программного комплекса позволяет использовать полученные результаты непосредственно на практике.

Научная новизна. Результаты, полученные в диссертационной работе, являются новыми. Они включают аналитические решения и численные методы решения операторов Смолуховского для случая коагуляции частиц в пространственно-неоднородных средах. Также в работе представлены результаты модификации численных алгоритмов для проведения расчетов на больших кластерных системах с использованием методов распараллеливания.

Практическая значимость. Автором разработан программный комплекс, с помощью которого получены численные решения систем уравнений для задач, рассмотренных в работе. Эффективность программной реализации показана на результатах проведенного автором тестирования. Разработанные численные алгоритмы и программный комплекс позволяют проводить численные исследования агрегации частиц в пространственно-неоднородных средах для широкого класса задач, имеющих важное практическое значение, например:

1. Моделирование поведения многокомпонентных полидисперсных аэрозолей продуктов деления в защитной оболочке атомной электростанции и прогнозирование источника радионуклидов в случае аварийных ситуаций;
2. Обоснование радиационной безопасности при обращении с радиоактивными отходами и отработавшим ядерным топливом;
3. Развитие новых технологий в таких отраслях как химическая и электронная промышленность, порошковая металлургия;
4. Поведение аэрозолей и распространение примесей в неоднородной атмосфере;
5. Моделирование неравновесной кинетики больших систем с сотнями тысяч и более элементов, для которых агрегация элементов составляет основное содержание процесса.

Содержание работы. Работа состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы и списка публикаций автора. Общий объем диссертации 109

страниц, включая 28 рисунков, 15 таблиц и список литературы из 116 наименований.

Во введении раскрывается актуальность научной темы, формулируются цели и задачи работы, представляются научная новизна и практическая значимость работы, сообщается о публикациях и докладах по теме диссертации.

В первой главе диссертации приводится постановка рассматриваемых задач в одномерном по пространству приближении, дан обзор используемых в других работах моделей, описывается тип математических уравнений, приводятся известные аналитические решения и сведения о численных методах для моделирования поставленных задач. Также приведены постановка, аналитический и численный анализ поведения систем с агрегацией, диффузией и адвекцией частиц, включая действие источника мономеров в систему. Распределение частиц по размеру моделируется в непрерывном приближении. Приведен пример валидации модели на результатах экспериментальных наблюдений для поведения аэрозолей в акватории озера Байкал.

Во второй главе диссертации рассматриваются модели агрегации частиц для пространственно-неоднородных сред в 2D и 3D приближениях. Рассмотрены кинетические модели агрегации в дискретном приближении для числа первичных мономеров в частицах. В качестве примеров использования модели и разработанной программы приведены результаты двух исследований: загрязнения реки коагулирующими твердыми частицами и та же задача, но с учетом влияния турбулентности. В первой задаче неоднородность распространяется в двумерной плоскости в направлении течения реки, а также по глубине воды в реке под действием выталкивающей силы и силы тяжести. Во второй задаче для моделирования гидродинамики течения жидкости рассматриваются уравнения Навье-Стокса с использованием открытого программного пакета OpenFOAM.

В третьей главе приведены результаты применения различных методов параллельных расчетов для рассмотренных задач. Рассмотрено несколько алгоритмов распараллеливания численных расчетов. Масштабируемость была

протестирована на нескольких вычислительных кластерах. Показано, что масштабируемость параллельной программы является линейной при количестве узлов меньше 128. Если количество процессоров, вычисляющих решение, превышает это число, увеличение относительной эффективности параллельной реализации численных расчетов снижается. Также, был реализован вариант решателя с параллельной архитектурой на пространственной декартовой сетке. Показано, что метод декомпозиции пространственной области имеет хорошую масштабируемость. Представлены результаты тестирования способа численного решения уравнений пространственно-неоднородной коагуляции на параллельных архитектурах, который позволяет получить ускорение вычислений почти в 300 раз.

В заключении диссертационной работы сформулированы основные результаты диссертационной работы.

Степень обоснованности и достоверности научных положений и выводов диссертационной работы подтверждается использованием строгих математических выводов со ссылками на статьи других авторов, сопоставлением полученных результатов с результатами расчетов с использованием других методов, а также и результатами многочисленных вычислительных экспериментов для тестовых задач. Результаты исследования представлены в 7 работах, входящих в перечень ВАК, 6 из которых опубликованы в журналах, индексируемых в международных системах цитирования Scopus и Web of Science. Результаты диссертационной работы докладывались на российских и международных конференциях.

Новые научные результаты, полученные автором, следующие:

1. Одним из основных результатов данной диссертационной работы является апробация новых подходов к моделированию коагуляции аэрозолей и частиц в условиях пространственной неоднородности (главы 2 и 3);
2. Получено аналитическое решение для системы коагулирующих частиц с учетом диффузии, переноса и действия мономеров в одномерном случае (глава 1);

3. Численно и аналитически исследована кинетика агрегации твердых частиц с учетом гравитационного осаждения, адвекции и диффузии (глава 1);

4. Предложен эффективный способ моделирования динамики загрязнения рек с использованием уравнений адвекции и коагуляции. Также представлена трехмерная модель динамики агрегирующих частиц в атмосфере (глава 2);

5. Представлен и протестирован способ численного решения уравнений пространственно-неоднородной коагуляции на параллельных архитектурах, позволяющий получить ускорение вычислений более чем в 300 раз (глава 3);

6. С прикладной точки зрения, основным результатом данной работы является доказанная в диссертации возможность численного решения достаточно больших систем кинетических уравнений в пространственно-неоднородных средах за приемлемое время расчета с достаточной для практики точностью и разработка открытого для использования соответствующего программного комплекса (главы 2, 3).

Соответствие содержания диссертации специальности. Содержание и результаты работы полностью соответствуют паспорту специальности 1.2.2 “Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ”, поскольку основные результаты работы получены для математической модели взаимодействия полидисперсных частиц с разработкой и апробацией нового численного алгоритма, подтвержденного результатами расчетов с использованием разработанного автором диссертации оригинальным программным кодом с применением методов распараллеливания для расчетов на современных суперкомпьютерах и кластерах.

Замечания по работе. По содержанию работы и обоснованности полученных результатов существенных замечаний нет. Однако представленная на отзыв работа не свободна от некоторых недостатков, в частности:

1. Возможно, что материал главы 3 следовало бы изложить более подробно и с большим количеством примеров для моделирования коагуляции

частиц в пространственно-неоднородных среда, чтобы полнее показать применимость предложенного метода для действительно широкого класса прикладных задач.

2. Было бы полезно включить в модель рассматриваемых кинетических механизмов также и фрагментацию агрегатов частиц на более мелкие составляющие, что особенно важно в случае турбулентных течений.

3. По мнению оппонента наиболее важным с его точки зрения недостатком работы является отсутствие примеров применения рассмотренных методов и подходов на случай агрегации многокомпонентных частиц. Это замечание, по мнению оппонента, связано с тем, что значительная, если не большая, часть практически важных задач с аэрозольной кинетикой происходит именно с многокомпонентными частицами. Хотя, возможно, это только частное мнение оппонента.

Общая оценка работы. Отмеченные недостатки носят частный характер и не снижают ценности работы и обоснованности выводов и защищаемых положений. Автореферат соответствует содержанию диссертации. Соискатель продемонстрировал высокий уровень квалификации, глубокие знания предмета исследования и научной литературы.

Диссертационная работа Загидуллина Р.Р. является законченным научным исследованием, удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям, выполненным по специальности 1.2.2 – “Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ”, 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 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:

Кандидат физико-математических, старший научный сотрудник
Федерального государственного бюджетного учреждения науки “Институт
проблем безопасного развития атомной энергетики Российской Академии Наук”
(ФГБУН ИБРАЭ РАН)

Адрес организации: 115191, Большая Тульская ул., 52, Москва

E-mail: sorokin@ibrae.ac.ru

Сорокин А. А.

Дата

13.02.2024

Контактные данные:

Тел.: +7 985 131-75-52, Email: sorokin@ibrae.ac.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена
диссертация: 01.02.05 – “Механика жидкостей, газа и плазмы”

Адрес места работы:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки “Институт
проблем безопасного развития атомной энергетики Российской Академии Наук”

Тел.: +7 495 955-22-43, E-mail: pbl@ibrae.ac.ru

Подпись А.А. Сорокина удостоверяю:

Начальник отдела кадров ФГБУН ИБРАЭ РАН Прокофьева Т. Ф.

Прокофьева Т. Ф.

Дата