

ВІДГУК
офіційного опонента на дисертаційну роботу
Богаєнка Всеволода Олександровича
«Математичне та комп'ютерне моделювання гідрогеоміграційних процесів з неklasичною динамікою на основі високопродуктивних обчислювальних алгоритмів»,
що подана на здобуття наукового ступеня
доктора фізико-математичних наук
за спеціальністю
01.05.02 — математичне моделювання та обчислювальні методи

Дисертація Богаєнка Всеволода Олександровича є закінченою науковою працею, яка присвячена розвитку методів математичного моделювання аномальних гідрогеоміграційних процесів на основі дробово-диференціального підходу та методів комп'ютерного моделювання з метою підвищення обчислювальної ефективності при чисельному моделюванні і прогнозуванні динаміки міграційних процесів та ідентифікації параметрів відповідних моделей.

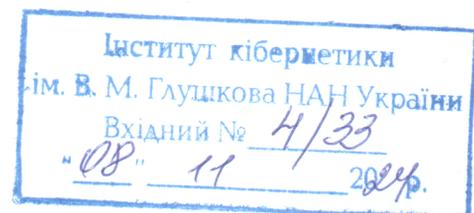
1. Актуальність теми дисертаційної роботи.

Розробка методів математичного та комп'ютерного моделювання динаміки міграційних процесів у ґрунтових середовищах є актуальною проблемою, зокрема в аспекті охорони навколишнього середовища. При перебігу відповідних процесів у середовищах, які можна характеризувати як фрактальні, актуальною стає також проблема підвищення ступеня адекватності існуючих кількісних моделей.

Математичне моделювання динаміки міграції вологи та солей в ґрунтах є широко поширеним і розвивається, переважно, у контексті постановок задач, характерних для класичної математичної фізики. Проте, у складних нерівноважних умовах, зокрема в середовищах фрактальної структури, до яких відносять і ґрунти, перебіг процесів перенесення не завжди коректно описується класичними математичними моделями. Прогрес у цьому випадку досягається, зокрема, з використанням підходу, що базується на застосуванні апарату дробово-диференціального числення.

Відштовхуючись від узагальнень базових фізичних законів наразі побудована та досліджена значна кількість дробово-диференціальних міграційних моделей у пористих середовищах, при чому поєднання різноманітних підходів узагальнення фізичних законів переносу породжує широкий клас моделей. Враховуючи велику кількість можливих визначень дробових похідних та комплексність процесів у таких пористих середовищах, як ґрунти, розвиток апарату їх дробово-диференціального моделювання далекий від завершення.

Важливими в контексті практичного застосування дробово-диференціальних моделей аномальних процесів геоміграції, є питання



ефективної програмної реалізації. Інтегро-диференціальний характер відповідних моделей дозволяє ефективно застосовувати для пришвидшення розрахунків засоби паралельних обчислень. Наразі розробка ефективних паралельних алгоритмів чисельного розв'язання початково-крайових задач для дробово-диференціальних рівнянь та їх систем є незавершеною і актуальною науковою проблемою.

Таким чином, сучасні засоби дробово-диференціального моделювання міграційних процесів охоплюють широке коло моделей, які містять інтегро-диференціальні оператори за часовою та просторовими змінними. При цьому актуальним напрямком є представлено у дисертації комплексне чисельне дослідження моделей з різнотипними дробовими похідними; визначення особливостей динаміки процесів, що ними описуються; розробка обчислювально ефективних засобів визначення моделей, найкращих для опису спостережуваного процесу, ідентифікації їх параметрів та прогнозування розвитку процесів на їх основі.

2. Огляд змісту та основних результатів роботи.

Дисертаційна робота викладена на 397 сторінках. Вона складається зі вступу, 8 розділів, списку використаних джерел та 2 додатків.

У вступі обґрунтовано актуальність теми роботи, визначено мету, завдання та об'єкт досліджень, зазначені можливості практичного застосування результатів, сформульовано наукову новизну.

У першому розділі наведено деякі відомості про сучасний стан розвитку апарату дробового інтегро-диференціювання, а також відповідних математичних моделей міграційних процесів. Проаналізовані чисельні методи, що використовуються для розв'язання відповідних початково-крайових задач, та підходи до побудови ефективних обчислювальних алгоритмів. Наведено також основні підходи до розв'язання задач ідентифікації параметрів дробово-диференціальних моделей, що є принциповим елементом при їх практичному застосуванні.

У другому розділі наведені результати математичного моделювання процесів конвективної дифузії у двовимірному наближенні на основі моделей, що містять похідні дробового порядку за часовою змінною. Чисельні розв'язки початково-крайових задач моделювання динаміки нелокальних процесів конвективної дифузії отримані з використанням локально-одновимірних скінченно-різницевої схем.

У третьому розділі наводяться результати математичного моделювання процесів фільтраційної консолідації ґрунтів у одновимірному наближенні на основі дробово-диференціальних моделей з використанням методу скінченних різниць для отримання чисельних розв'язків. Зокрема, сформульовано математичну модель та поставлено початково-крайову задачу моделювання нелокальних процесів фільтраційної консолідації з урахуванням явища хімічного осмосу. Відповідна модель містить похідні Капуто–Фабріціо з

несингулярним ядром за часовою змінною як у рівнянні для поля фільтраційних напорів, так і для поля концентрації.

Четвертий розділ присвячено математичному моделюванню нелокальних конвективно-дифузійних процесів при врахуванні явищ масообміну між частинками у мобільній та немобільній фазах згідно з різними законами кінетики масообміну як у одновимірному, так і у двовимірному наближенні. З метою підтримки прийняття рішень при виборі моделі конвективної дифузії з масообміном, найбільш адекватної спостережуваному процесу, побудовано відповідний алгоритм.

У п'ятому розділі запропоновані оптимізовані обчислювальні схеми, зокрема паралельні алгоритми, для одно- та багатовимірних задач моделювання геоміграційних процесів, що містять похідні Капуто–Герасимова та Капуто–Фабріціо. Запропоновано серію паралельних алгоритмів для систем з розподіленою пам'яттю для локально-одновимірних схем розщеплення у яких був використаний червоно-чорний двовимірний блоковий розподіл даних. Розроблено паралельні алгоритми для графічних процесорів (GPU) у випадку моделей з похідними Капуто–Герасимова як за часовою, так і за просторовими змінними, зокрема, гібридний алгоритм, у якому обчислення виконуються паралельно на графічному (GPU) та центральному (CPU) процесорах.

Для збільшення швидкодії обчислювальних схем моделювання процесів тепло- та масоперенесення на основі моделей з похідною Капуто–Герасимова за часовою змінною запропонована процедура її наближення з заданою точністю на основі розкладення у ряди та методики розділення змінних. Ця процедура була поширена також на випадок двовимірної дробово-диференціальної моделі геоміграційних процесів, яка містить відповідні похідні за просторовими змінними. У цьому випадку розроблені паралельні схеми розв'язання початково-крайової задачі, яка дискретизувалась за локально-одновимірною схемою, на системах з розподіленою пам'яттю.

У шостому розділі обчислювальну схему, що базується на розкладанні у ряди ядра інтегрального оператора, розроблено для дробово-диференціальних рівнянь, які містять ψ -похідну Капуто. Запропонована серія GPU-алгоритмів, що використовують можливості низькорівневої оптимізації коду, зокрема, векторні арифметичні операції, типи даних різної точності, тензорні операції. Для випадку тривимірної моделі аномальної дифузії з ψ -похідними Капуто за просторовими змінними побудовані та досліджені паралельні алгоритми для систем з розподіленою пам'яттю, які використовують дві схеми розподілу даних – одномірну блокову та червоно-чорну.

Для тривимірного рівняння дифузії з ψ -похідними Капуто як за часом, так і за просторовими змінними, досліджено точність та швидкодію неявних скінченно-різницевих схем та схем розщеплення при їх застосуванні разом з алгоритмами, направленими на підвищення швидкодії проведення обчислень. На основі отриманих оцінок точності та швидкодії представлено алгоритм автоматичного вибору оптимальної обчислювальної схеми.

Підхід розкладення у ряди з подальшим розділенням змінних був застосований також для побудови схеми обчислення значень похідної Атангана–Балеану.

Сьомий розділ присвячено алгоритмам розв'язання задачі ідентифікації параметрів дробово-диференціальних рівнянь. Розглядається узагальнене рівняння вологоперенесення у термінах напорів, яке містить ψ -похідні Капуто за часовою та просторовою змінними. Для розв'язання задачі знаходження значень числових параметрів моделі за яких вона якнайточніше описує дані моніторингу процесу вологоперенесення пропонується алгоритм методу рою частинок. Для випадку, коли функціональний параметр ψ -похідної Капуто розглядається у довільній формі, пропонується алгоритм генетичного програмування для її знаходження.

У восьмому розділі наводяться результати дробово-диференціального моделювання вологоперенесення при розв'язанні задач, що виникають у землеробстві при управлінні зрошенням.

3. Наукова новизна та практичне значення результатів дисертації.

Дисертаційна робота є науковим дослідженням, що містить вагомий результати, які є як теоретичними, так і можливими для практичного використання.

Автором дисертаційної роботи вперше

- побудовано серію двовимірних дробово-диференціальних математичних моделей процесів конвективної дифузії за умов планової фільтрації в ізотермічній та неізотермічній постановках, які, на відміну від існуючих, враховують фактори часової та просторової нелокальності при перебігу відповідних процесів у середовищах фрактальної структури;
- розроблено серію дробово-диференціальних моделей процесів фільтраційної консолідаційної динаміки у разі аномального перебігу відповідних деформаційних процесів у геопористих середовищах;
- запропоновано та сформульовано серію дробово-диференціальних математичних моделей нелокальних процесів масоперенесення в ґрунтових середовищах з урахуванням явищ масообміну та факторів часової і просторової нелокальності;
- сформульовано крайові задачі щодо вказаних вище класів нових математичних моделей та одержано їх скінченнорізницеві розв'язки, на основі яких досліджено особливості динаміки процесів, що описуються відповідними моделями;
- побудовано клас паралельних алгоритмів розв'язання з використанням графічних прискорювачів одновимірних початково-крайових задач щодо дробово-диференціальних моделей геогідроміграційних процесів, які дозволяють збільшити ефективність комп'ютерного моделювання;
- створено клас ефективних паралельних алгоритмів реалізації локально-одновимірних скінченно-різницевої схем розв'язання багатовимірних

дробово-диференціальних початково-крайових задач, які дозволяють збільшити швидкодію моделювання аномальних геогідроміграційних процесів;

- для розв'язання задач ідентифікації параметрів дробово-диференціальних моделей вологоперенесення, що містять ψ -похідні Капуто застосовано методи рою частинок та генетичного програмування і показано їх ефективність.

Створені засоби математичного та комп'ютерного моделювання забезпечують високу швидкодію та контрольовану точність прогнозування процесів волого- та солеперенесення у ґрунтах, необхідну для ефективного їх застосування у цивільній інженерії та сільському господарстві. Досліджені особливості опису процесів геоміграції моделями з різними дробово-диференціальними операторами дозволяють проводити вибір моделі відповідно до конкретного застосування, а також можуть надавати допоміжну інформацію при фізичних та гідрологічних дослідженнях відповідних середовищ. З метою практичної апробації одержаних у роботі теоретичних результатів, вирішені прикладні задачі моделювання вологоперенесення при зрошенні дощуванням у складних гідрологічних умовах, а саме прогнозування строків та норм поливу за різних умов на основі дробово-диференціальних моделей вологоперенесення.

4. Обґрунтованість та достовірність основних положень і висновків

Всі результати, одержані у дисертаційній роботі, є строго обґрунтованими. У дослідженні використовуються методи математичної фізики, теорії фільтрації, масо-, тепло- та вологоперенесення, механіки ґрунтів, теорії інтегро-диференціювання дробового порядку, теорії чисельних методів. Для чисельного розв'язання початково-крайових задач використаний метод скінченних різниць, зокрема, метод розщеплення для багатовимірних задач. Для розв'язання задач ідентифікації параметрів моделей використано метод рою частинок та метод генетичного програмування. З метою побудови алгоритмів для високопродуктивних обчислювальних систем використано методи розпаралелення обчислень для систем зі спільною та розподіленою пам'яттями.

Реферат дисертації правильно відображає основний зміст роботи. Основні результати опубліковано у 29 наукових праць – 1 монографія, 22 статті у фахових виданнях, з яких 10 статей у вітчизняних фахових виданнях, 18 статей у виданнях, що входять до наукометричних баз Scopus та Web of Science, зокрема, 7 статей опубліковано без співавторів. Результати роботи достатньо апробовані шляхом доповідей на 6 міжнародних наукових конференціях та 2 наукових семінарах. Загалом дисертацію та реферат оформлено відповідно до встановлених вимог.

5. Зв'язок з науковими програмами, планами, темами, грантами.

Дисертаційну роботу виконано у лабораторії методів математичного моделювання процесів екології та енергетики Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України в рамках наукових тем “Розробити засоби математичного моделювання динаміки складних розподілених процесів стосовно задач екології на основі локальних та дробово-диференціальних моделей” (номер державної реєстрації 0119U002276, 2019-2023 рр.), “Розробити теоретичні основи математичного моделювання геоекологічних процесів на базі локальних та дробово-диференціальних моделей” (номер державної реєстрації 0114U002093, 2014-2018 рр.), “Розробити нові методи паралельної та розподіленої обробки надвеликих об’ємів даних для аналізу складних багатокомпонентних середовищ” (номер державної реєстрації 0117U000471, 2017-2021 рр.), “Розробити методи математичного моделювання складних систем для суперкомп’ютерів” (номер державної реєстрації 0118U005230, 2018-2019 рр.), “Розробити методи високопродуктивних обчислень дослідження математичних моделей неоднорідних середовищ та обробки великих даних (Big Data) на основі суперкомп’ютерних технологій” (номер державної реєстрації 0120U103580, 2021 р.), “Розроблення моделей та методів високопродуктивних обчислень та їх застосування”. (номер державної реєстрації 0122U200449, 2022 р.)

6. Відповідність дисертаційної роботи спеціальності.

Дисертаційна робота Богаєнка Всеволода Олександровича «Математичне та комп’ютерне моделювання гідрогеоміграційних процесів з неklasичною динамікою на основі високопродуктивних обчислювальних алгоритмів» за змістом відповідає спеціальності 01.05.02 — математичне моделювання та обчислювальні методи.

7. Оцінка мови та стилю дисертації. Дисертація виконана фаховою українською мовою, текстове подання матеріалу відповідає стилю науково-дослідної літератури.

8. Зауваження та побажання

1) У роботі зроблено акцент на дослідженні схем методу скінченних різниць, проте було б корисно провести порівняльний аналіз точності різних чисельних методів, зокрема методу скінченних елементів, при їх застосуванні до розглянутих задач. Такий аналіз допоміг би краще обґрунтувати вибір конкретних схем для їхнього застосування в задачах із високими вимогами до точності.

2) Попри те, що представлені результати є важливими у контексті підвищення швидкодії обчислень, у роботі не розглядаються методи дискретизації дробових похідних високого порядку точності.

3) Паралельні алгоритми для задач із дробовими похідними часто вимагають значних обсягів передачі даних між процесами, що може призводити до комунікаційних затримок і знижувати продуктивність. У роботі варто було б приділити більше уваги аналізу використання конкретних засобів реалізації алгоритмів з метою мінімізації цих витрат.

