

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 Всеволода Олександровича Богаєнка є завершеною науковою працею, що присвячена розвитку методів математичного моделювання аномальних гідрогеоміграційних процесів, використовуючи дробово-диференціальний підхід і комп’ютерне моделювання. Зокрема, метою роботи є підвищення обчислювальної ефективності чисельного моделювання та прогнозування динаміки міграційних процесів, а також ідентифікації параметрів відповідних моделей.

1. Актуальність теми дисертаційної роботи.

Розробка методів математичного і комп’ютерного моделювання динаміки міграційних процесів у ґрунтових середовищах є надзвичайно актуальною в контексті проблем екологічної, водної та продовольчої безпеки. Математичне моделювання процесів міграції вологи та солей у ґрунтах є поширеним і активно розвивається здебільшого в рамках класичної моделей, які для фрактальних середовищ не завжди адекватно описують процеси перенесення. Прогрес у цій області досягається через використання апарату дробово-диференціального числення, що включає розробку нових операторів та їх застосування для опису фізичних процесів на основі узагальнень базових фізичних законів. Це зумовлює активний розвиток апарату математичного моделювання на основі диференціальних моделей дробового порядку.

Важливим аспектом практичного застосування таких моделей є ефективна програмна реалізація чисельних методів розв’язання початково-крайових задач. Інтегро-диференціальний характер моделей дозволяє застосовувати методи паралельних обчислень для прискорення розрахунків, при чому основним методом тут є розпаралелювання при обчисленні значень дробових похідних або при розв’язанні систем лінійних алгебраїчних рівнянь. Тому розробка ефективних паралельних алгоритмів для чисельного розв’язання початково-крайових задач для дробово-диференціальних рівнянь та їх систем є актуальною науковою проблемою.



Практичне використання дробово-диференціальних моделей для прогнозування аномальних геогідроміграційних процесів потребує ідентифікації їх параметрів. За відсутності технічних засобів вимірювання, для цього використовуються аналітичні або чисельно-аналітичні методи розв'язання обернених задач. Актуальним є також використання методів штучного інтелекту.

Таким чином, актуальними є проведені у роботі комплексні дослідження, що включає чисельне дослідження моделей з різнотипними дробовими похідними та визначення особливостей динаміки описуваних процесів, розробка обчислювально ефективних методів вибору найадекватніших моделей для опису спостережуваних процесів, ідентифікація їх параметрів та прогнозування розвитку процесів на основі цих моделей.

2. Огляд змісту та основних результатів роботи.

Робота присвячена розвитку засобів математичного моделювання аномальних міграційних процесів у ґрунтах на основі використання дробово-диференціального підходу та обчислювальної ефективності при комп'ютерному моделюванні таких процесів. У роботі запропонована серія нових дробово-диференціальних математичних моделей нелокальних процесів конвективної дифузії та фільтраційної консолідації, що, на відміну від існуючих, враховують фактори часової та просторової нелокальності перебігу процесів у середовищах фрактальної структури. Стосовно розроблених моделей, побудовано декілька класів високопродуктивних алгоритмів розв'язання початково-крайових задач, розв'язано задачі ідентифікації параметрів, та, поєднуючи отримані результати, розв'язана практична задача моделювання вологоперенесення при зрошенні дощуванням в складних гідрогеологічних умовах.

У першому розділі наведено огляд сучасного стану розвитку апарату інтегро-диференціювання дробового порядку, а також відповідних моделей міграційних процесів. Проаналізовано використовувані чисельні методи та підходи до побудови ефективних обчислювальних алгоритмів і наведено основні підходи до розв'язання задач ідентифікації параметрів дробово-диференціальних моделей.

У другому розділі є результати моделювання процесів конвективної дифузії у двовимірному наближенні на основі моделей, що містять похідні дробового порядку за часом. Чисельні розв'язки початково-крайових задач моделювання динаміки нелокальної конвективної дифузії отримані з використанням локально-одновимірних схем розщеплення.

У третьому розділі наводяться результати математичного моделювання процесів фільтраційної консолідації ґрунтів на основі дробово-диференціальних моделей.

Четвертий розділ присвячено моделюванню конвективно-дифузійних процесів при врахуванні явищ масообміну. Зокрема, запропоновано одновимірну дробово-диференціальну модель конвективної дифузії з

урахуванням масообміну, що містить дробово-диференціальне за просторовою змінною рівняння для напору та дробово-диференціальне за часовою змінною рівняння для поля концентрації солей.

У п'ятому розділі розглядаються 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 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 та центральному процесорах.

З метою збільшення швидкодії обчислювальних схем запропонована процедура наближення похідної Капуто–Герасимова з заданою точністю на основі розкладення у ряди та методики розділення змінних. При моделюванні початкових стадій процесів, експериментально доведена ефективність додаткового застосування динамічної зміни кроку за часом.

Процедура наближення на основі розкладення у ряди була поширена на випадок двовимірної дробово-диференціальної моделі геоміграційних процесів, яка містить похідні Капуто–Герасимова за просторовими змінними. Розроблені паралельні схеми розв'язання початково-крайової задачі на системах з розподіленою пам'яттю, зокрема, запропонована схема розподілення даних, що є поєднанням одновимірної та червоно-чорної схем.

У шостому розділі обчислювальну схему, що базується на розкладанні у ряди ядра інтегрального оператора, розроблено для дробово-диференціальних рівнянь, що містять ψ -похідну Капуто. Проведені обчислювальні експерименти показали, що використання такої схеми дозволяє досягти 2,5-кратного прискорення при моделюванні нелокального за часом процесу дифузії. Також була запропонована серія алгоритмів для графічних процесорів, що використовують можливості низькорівневої оптимізації коду.

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 одномірну блокову та червоно-чорну схеми розподілу даних.

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 обчислювальної схеми близької до оптимальної.

Підхід розкладу в ряд з подальшим розділенням змінних був застосований також для побудови схеми обчислення значень похідної Атангана–Балеану. Отримані теоретичні та експериментальні оцінки його точності та швидкодії.

У цьому розділі представлені алгоритми розв'язання задач ідентифікації параметрів дробово-диференціальних рівнянь на прикладі рівняння вологоперенесення у термінах напорів, яке містить ψ -похідні Капуто за часом та просторовою змінними.

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

3. Наукова новизна та практичне значення результатів дисертації.

У роботі 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 та просторової нелокальності;

- одержано скінченнорізницеві розв'язки сформульованих крайових задач вищевказаних класів нових математичних моделей, на основі яких досліджено особливості динаміки процесів;

- побудовано клас паралельних алгоритмів розв'язання одновимірних початково-крайових задач щодо дробово-диференціальних моделей геогідроміграційних процесів з використанням графічних прискорювачів, які покращують ефективність комп'ютерного моделювання;

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

Представлені у роботі нові засоби математичного та комп'ютерного моделювання забезпечують високу швидкість та контрольовану точність прогнозування міграційних процесів у ґрунтах, необхідну для ефективного їх практичного застосування. Досліджені особливості розв'язків початково-крайових задач щодо моделей геоміграції з різними дробово-диференціальними

операторами дозволяють проводити вибір адекватної моделі відповідно до конкретного застосування.

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, теорії інтегро-диференціювання дробового порядку. Для чисельного розв'язання початково-крайових задач використаний метод скінченних різниць. Для розв'язання задач ідентифікації параметрів моделей використано метод рою частинок і метод генетичного програмування. З метою побудови алгоритмів для високопродуктивних обчислювальних систем використано методи розпаралелення обчислень для систем зі спільною та розподіленою пам'яттю.

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. Дисертація та автореферат 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 і наведеними результатами відповідає спеціальності 01.05.02 — математичне моделювання та обчислювальні методи.

7. Зауваження та побажання.

1) Моделі та оператори інтегро-диференціювання нецілого порядку, що досліджуються у розділах 2-4 є подібними, але не завжди ідентичними моделям і операторам, для яких розробляються високопродуктивні алгоритми у розділах 5, 6 та алгоритми розв’язання обернених задач у розділі 7. З одного боку це демонструє широту застосовності використаних і запропонованих у роботі підходів до розв’язання прямих та обернених задач, проте, з іншого боку, негативно впливає на цілісність роботи.

2) Структура розділів 5 та 6 могла би бути покращеною, оскільки той же підхід, що застосовується у пунктах 5.3 та 5.4 до дискретизації похідної Капуто-Герасимова, застосовується й у розділі 6, але до інших операторів дробового порядку.

3) Стосовно алгоритмів розв’язання обернених задач, представлених у розділі 7 та їх прикладного застосування у розділі 8, недостатньо уваги приділено дослідженню коректності відповідних задач і чутливості алгоритмів до похибок у вхідних даних.

ВИСНОВОК

У цілому дисертаційна робота Богаєнка В. О. є актуальною, новою, завершеною та самостійною науковою працею.

Текст дисертації та автореферату викладено на відповідному науковому та літературному рівні та подано відповідно до вимог для дисертацій на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук. Загальні висновки роботи повністю відображають досягнення її цілей.

Дисертаційне дослідження на тему “Математичне та комп’ютерне моделювання гідрогеоміграційних процесів з неklasичною динамікою на основі високопродуктивних обчислювальних алгоритмів” відповідає всім вимогам п. 7, 8, 9 “Порядку присудження та позбавлення наукового ступеня доктора наук”, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 17.11.2021 року №1197, які висуваються до докторських дисертацій, вимогам, що встановлені

“Паспортом спеціальності 01.05.02 — математичне моделювання та обчислювальні методи”, затвердженим постановою президії ВАК України від 13.12.2000 року №25-07/10, а її автор Богаєнко Всеволод Олександрович заслуговує на присудження наукового ступеня доктора фізико-математичних наук зі спеціальності 01.05.02 — математичне моделювання та обчислювальні методи.

Офіційний опонент,
декан факультету
прикладної математики та інформатики
Львівського національного університету
імені Івана Франка,
доктор фізико-математичних, професор



Іван ДИЯК

