

**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, що розвиває методи математичного моделювання аномальних міграційних процесів у ґрунтах на основі апарату інтегро-диференціювання дробового порядку та ефективних методів комп'ютерної реалізації при чисельному моделюванні і прогнозуванні динаміки цих процесів.

**1. Актуальність теми дисертаційної роботи.**

Розробка методів математичного та комп'ютерного моделювання динаміки міграційних процесів у ґрунтових середовищах є важливою задачею, особливо в контексті охорони навколишнього середовища. Зокрема, у випадках, коли середовище має фрактальні властивості, виникає також проблема підвищення точності існуючих кількісних моделей.

Математичне моделювання міграції вологи та солей у ґрунтах є актуальним напрямком і здебільшого розвивається в межах традиційних задач математичної фізики. Проте в складних нерівноважних умовах, зокрема у фрактальних середовищах, до яких належать і ґрунти, класичні математичні моделі не завжди адекватно описують такі міграційні процеси. Розв'язання цієї задачі можливе, зокрема, шляхом використання апарату дробово-диференціального числення. Прогрес у цій сфері досягається завдяки розробці нових операторів дробових інтегралів та похідних і їх застосуванню для опису фізичних процесів та створення феноменологічних моделей.

Варто відмітити, що поєднання різних підходів до узагальнення фізичних законів перенесення та різних визначень похідних дробового порядку породжує широкий спектр моделей і зумовлює активний розвиток засобів дробово-диференціального моделювання.

Важливим аспектом практичного використання дробово-диференціальних моделей для аномальних процесів міграції є необхідність ефективної програмної реалізації відповідних чисельних методик. За цього, інтегро-диференціальний характер моделей дозволяє застосовувати паралельні обчислення для прискорення розрахунків. На даний момент розробка ефективних паралельних алгоритмів для чисельного розв'язання початково-крайових задач для дробово-диференціальних рівнянь і їх систем залишається актуальною науковою проблемою.



Практичне використання дробово-диференціальних моделей для прогнозування аномальної динаміки геогідроміграційних процесів вимагає ідентифікації їх параметрів. Специфіка таких моделей полягає в тому, що порядки та параметри дробових похідних не можуть бути безпосередньо виміряні технічними засобами. Для їх ідентифікації актуальними є використані у роботі підходи до розв'язання обернених задач.

Таким чином, актуальним є представлено у роботі комплексне чисельне дослідження моделей з різними типами дробових похідних, визначення особливостей динаміки процесів, що вони описують, розробка ефективних обчислювальних засобів для вибору найкращих моделей, ідентифікація їх параметрів та прогнозування процесів на їх основі.

## **2. Огляд змісту та основних результатів роботи.**

Дисертаційна робота присвячена вдосконаленню методів математичного моделювання аномальних гідрогеоіграційних процесів із використанням дробово-диференціального підходу та підвищенню обчислювальної ефективності комп'ютерного моделювання. У роботі вперше розроблено дробово-диференціальні математичні моделі і проведено моделювання ряду нелокальних процесів конвективної дифузії та фільтраційної консолідації. На відміну від існуючих моделей, нові запропоновані моделі враховують часову та просторову нелокальність процесів у фрактальних середовищах. Для запропонованих моделей створено клас високопродуктивних алгоритмів для розв'язання початково-крайових задач, включаючи паралельні алгоритми для систем з спільною і розподіленою пам'яттю, що суттєво підвищують швидкість моделювання. Окрім цього, розглянуто питання ідентифікації параметрів цих моделей. Отримані результати були використані для розв'язання практичної задачі моделювання вологоперенесення при зрошенні дощуванням у складних гідрогеологічних умовах.

У першому розділі подані основні відомості про сучасний розвиток апарату інтегро-диференціювання дробового порядку, відповідних математичних моделей міграційних процесів, чисельних методів та алгоритмів розв'язання задач.

Другий розділ містить результати щодо математичного моделювання конвективної дифузії у двовимірному наближенні на основі моделей з дробовими похідними за часовою змінною.

У третьому розділі представлені результати математичного моделювання фільтраційної консолідації ґрунтів у одновимірному наближенні за допомогою дробово-диференціальних моделей. Моделювання проводилося з використанням методу скінченних різниць для одержання чисельних розв'язків.

Результати, представлені у четвертому розділі, стосуються математичного моделювання нелокальних конвективно-дифузійних процесів з урахуванням масообміну між частинками в мобільній та немобільній фазах у одновимірному та двовимірному наближенні.

У п'ятому розділі представлені нові оптимізовані обчислювальні схеми, включаючи паралельні алгоритми для одно- та багатовимірних задач моделювання геоміграційних процесів з похідними Капуто-Герасимова та Капуто-Фабріціо. Розроблено серію паралельних алгоритмів для систем з розподіленою пам'яттю, що використовують червоно-чорний двовимірний блоковий розподіл даних. Також створено паралельні алгоритми для графічних процесорів (GPU) для моделей з похідними Капуто-Герасимова, включаючи гібридний алгоритм з паралельним виконанням обчислень як на GPU, так і на центральному процесорі. Запропонована процедура наближення похідної Капуто-Герасимова, що знижує порядок обчислювальної складності розв'язання задач з лінійного до логарифмічного.

У шостому розділі розроблено обчислювальну схему для дробово-диференціальних рівнянь з  $\psi$ -похідною Капуто на основі схеми розкладення у ряди. Запропоновані також GPU-алгоритми, що використовують низькорівневу оптимізацію коду для досягнення додаткового прискорення. Методика розкладення у ряди з метою зниження обчислювальної складності без значних втрат точності також застосована для обчислення похідної Атангана-Балеану.

У сьомому розділі розглянуто задачу ідентифікації параметрів моделі, що базується на узагальненому рівнянні вологоперенесення з  $\psi$ -похідними Капуто за часовою та просторовою змінними. Для знаходження числових параметрів моделі, які найточніше описують дані моніторингу, запропоновано алгоритм методу рою частинок. Для випадків, коли параметр  $\psi$ -похідної Капуто є довільним, використовується алгоритм генетичного програмування.

У восьмому розділі наведено результати дробово-диференціального моделювання вологоперенесення в землеробстві, зокрема при управлінні зрошенням.

### **3. Наукова новизна та практичне значення результатів дисертації.**

Автором 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-різницевих 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  $\psi$ -похідні Капуто застосовано методи рою частинок та генетичного програмування і показано їх ефективність.

Створені засоби математичного моделювання забезпечують високу швидкодію та точність прогнозування процесів волого- та солеперенесення. За цього, результати щодо якісних особливостей процесів геоміграції, що описуються моделями з різними дробово-диференціальними операторами, дозволяють проводити вибір моделі відповідно до конкретного застосування. Отримані у роботі теоретичні результати апробовані у процесі розв'язання прикладних задач моделювання вологоперенесення при зрошенні дощуванням у складних гідрологічних умовах.

#### **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. 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) Автором дисертації приділено велику увагу аналізу опису на основі дробово-диференціального підходу різних складних моделей міграційно-фільтраційно-консолідаційних процесів, що протікають у пористих ґрунтових середовищах з урахуванням їх складної фрактальної структури та чисельним методам побудови їх розв'язків (різницеві схеми, модель Кранка-Ніколсона та ін.) (див. посилання 131, 56, 59, 71-258). Дисертантом, ґрунтуючись на такому детальному аналізі, достатньо аргументовано вибраний і реалізований цей новаторський стратегічний підхід моделювання, навіть революційний, у деякій мірі, щодо створення нових моделей міграційно-фільтраційно-консолідаційних

процесів у пористих середовищах у порівнянні з класичним, строго детермінованим.

Однак, слід зауважити, що, виходячи з нових концепцій уточненого уявлення про пористі середовища, природа ґрунтових середовищ є не тільки характерна своєю фрактальною структурою і суто мінеральним походженням. Водночас це є багаторівневе і різнопористе неоднорідне середовище хіміко-органічної та біологічної природи (залишки рослин, деревини, забруднення відходами біологічної природи тощо). Таке середовище складається з різних взаємопов'язаних просторів: міжчастинковий простір (*interparticle space*), що, без сумніву, характеризується фрактальною структурою, як стверджує автор, та низки внутрічастинкових різнорозмірних просторів (*intraparticle spaces*), що включають в себе внутрішні мережі мікро- і нанопор. Ці простори знаходяться між собою у стані динамічної рівноваги, що описуються різними нелінійними моделями (Ленгмюра, BET та ін.). Це досягаються завдяки взаємовпливу потоків різних компонентів фільтрату (мікро- і макропотоки), що виникають на поверхнях розділу цих просторів та чинників зовнішніх навантажень (механічні, теплові та ін.) на систему. Як правило, мікропотоки фільтрату у внутрічастинкових просторах, які радіально спрямовані від центра до зовнішньої поверхні частинки, є одними із важливих визначальних фізичних чинників, що впливають на загальне масоперенесення у таких процесах.

У дисертації автор обмежився однорівневим підходом, так би мовити, більше приділивши уваги особливостям міжчастинкового простору, а саме специфіці його фрактальним структурам. Реалізацію комплексного підходу з урахуванням взаємодії вказаних вище макро- і мікро просторів автор у дисертації не виконував. Мабуть це було пов'язано із складнощами самої реалізації, а головне, що стояло інше завдання - більше висвітлити деталі цього фрактального простору. Цілком очевидно, що вказаний комплексний підхід може бути певним орієнтиром на майбутнє і знайде чільне місце у розширенню постановок нових задач, формулюванню нових моделей та подальших дослідженнях автора.

2) Було б також корисним для уточнення нових задач досліджень орієнтуватись на результати теоретичного та експериментального характеру сучасних фільтраційних лабораторій провідних міжнародних університетів та центрів досліджень, результати Світових фільтраційних конгресів (World Filtration Congress : WFC 13 - 2022, WFC 14 - 2025, ...) та інших конференцій, що регулярно проводяться, а також на спеціалізовані високореєтингові міжнародні видання (Filtration and Separation, Membrane Filtration, Separation and Purification Methods, AIChE J та ін.).

3) В описах розроблених автором некласичних дробово-диференціальних моделей не зовсім чітко показано яким чином основні параметри цих моделей, а саме як параметр  $\alpha$  ( $0 < \alpha < 1$ ), що описує порядок дробової похідної

взаємопов'язаний з основними визначальними кінетичними чинниками процесів. Автор приводить низку графіків щодо комп'ютерного моделювання розподілів напорів, концентраційних розподілів компонентів потоків фільтрату при різних значеннях параметра  $\alpha$  ( $\alpha=0.6, 0.7, 0.8, 0.9$  та ін.), (див. рис. 2.12-2.16, 3.1- 3.3, 3.10- 3.12 та ін.), але не пояснює яким чином ці параметри впливають на кінетику цих розподілів і які значення  $\alpha$  є найприйнятнішими з точки зору відповідності цих модельних розподілів реальним процесам.

4) На цих і подібних графіках автор не приводить конкретні значення визначальних параметрів, включаючи їх конкретні фізичні розмірності (коефіцієнти дифузії  $d$  і термодифузії  $dT$ , коефіцієнти фільтрації  $k=1/(\mu r)$  [ $m^2/c$ ] чи їх аналоги - коефіцієнти консолідації  $b=G/(\mu r p)$  [ $m^2/c$ ], де  $\mu$  – в'язкість, Па·с;  $r$ -питомий опір середовища, м/кг; модуль стискуваності скелету  $G$ , Па), при яких виконувалось числове комп'ютерне моделювання. Це накладає певні труднощі і незручності при проведенні аналізу відповідних кривих розподілів та кількісної та і якісної цих розподілів оцінки з точки зору розуміння повноти картини протікання процесів.

5) При розробці високопродуктивних паралельних алгоритмів та програмного забезпечення, які автор ефективно застосував до побудови розв'язків моделей та числового моделювання реальних процесів вологоперенесення, було б доцільно використовувати сучасні об'єктно орієнтовані технології та бібліотеки класів, у яких реалізовані спеціальні інструментальні засоби автоматизованого розпаралелювання обчислювальних процесів (паралельні контейнери (вектори /concurrent vector/, паралельні списки / concurrent list/, паралельні множини /concurrent set/), паралельні цикли / parallel\_for\_each/ та операції / concurrent operation/, напр. бібліотеки Microsoft Parallel Patterns Library (PPL), Tasks Parallel Library (TPL). Такий підхід призвів би до значного скорочення рутинних ручних операцій щодо реалізації підходів паралелізму обчислень, покращив би якість реалізації розроблюваних алгоритмів, мінімізував би кількість помилок при розробці програмного забезпечення.

6) Зустрічаються по тексту незначні описки, напр. пропущені окремі розділові знаки у списку посилань та ін. Окремі висловлювання можна було б краще сформулювати з позиції змісту української мови та правопису, напр., словосполучення, що трапляються у різних місцях дисертації «на базі ... підходу ...», «що базується на ...» на краці вирази: «на основі ... підходу», «що ґрунтуються на ...», замість російської кальки «датчик» краще було б використовувати «сенсор» та ін.

## ВИСНОВОК

Викладене дозволяє зробити висновок про те, що 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,  
завідувач кафедри програмної інженерії  
Тернопільського національного  
технічного університету імені Івана Пулюя  
докт. фіз.-мат. наук, професор,  
лауреат Державної премії України  
в галузі науки і техніки

Михайло ПЕТРИК

Підпис Михайла ПЕТРИКА засвідчую:

Вчений секретар  
Тернопільського національного  
технічного університету імені Івана Пулюя



Галина КРАМАР