

## ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу  
Кузьмича Валентина Анатолійовича  
на тему «Методи та засоби математичного моделювання руху рідин з  
використанням машинного навчання»  
представлену на здобуття ступеня доктора філософії  
в галузі знань 12 – Інформаційні технології  
за спеціальністю 123 – Комп'ютерна інженерія

### Актуальність теми дисертації.

На даний час отримали значне поширення роботи з моделювання процесів в потоках рідини при описі аеродинамічних, гідродинамічних процесів, теплопередачі, де процеси моделюються на основі рівняння Нав'є-Стокса, а результатом розрахунків є поля швидкості, тиску та густини рідини.

Нелінійність рівнянь Нав'є-Стокса, наявність малого параметра в багатьох випадках при старшій похідній та просторовий нестационарний характер руху робить знаходження загального розв'язання рівняння надзвичайно складною проблемою. В науковій літературі представлено велику кількість методів вирішення завдань на основі вирішення рівняння Нав'є-Стокса як для стисливої, так і нестисливої рідини. Серед них високу ефективність демонструють методи на основі решітчастої моделі Больцмана (LBM). Такі методи базуються на кінетичному рівнянні Больцмана. Для довільного з варіантів методу рідина або газ моделюються як сукупність "частинок" або "вузлів", розташованих на однорідній решітці, де взаємодія між частинками відбувається шляхом обміну кількістю руху і енергії, а кожна частинка характеризується певним набором властивостей стосовно швидкості та щільності.

В основі методів LBM є припущення, що моделюється стислива рідина. Проте є багато задач, коли необхідно досліджувати процеси для нестисливих рідин, де густина не залежить від тиску та є виключно функцією від температури. Тому актуальним постає завдання розробки способів використання решітчастої моделі Больцмана для моделювання процесів в нестисливих рідинах. Тут можливим є підхід, де процеси моделюються на основі методу LBM, але на кожному кроці за часом необхідно коригувати значення густини так, щоб вони були близькими до постійних і рідина за своїми характеристиками могла вважатися нестисливою. Тобто виникає необхідність коректування похибки, що виникає при коливанні величини густини. Оскільки встановлено, що розв'язок крайової задачі на основі рівняння Нав'є-Стокса збігається з розв'язком рівняння Больцмана при малих значеннях числа Маха, то при дослідженні гідродинамічних процесів в рідині коригування похибки, що виникає при коливанні густини, може бути реалізовано на основі вирішення

рівняння Пуассона. Його вирішення на кожному кроці за часом може бути зведене до вирішення системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Це дозволяє отримати розподіл тиску в обчислювальній області та полі швидкостей і поле швидкостей на новому часовому кроці.

При моделюванні час на вирішення СЛАР є визначальним. Тому актуальною є розробка методів, що дозволять його зменшити. Серед відомих підходів до вирішення СЛАР є машинне навчання, яке дозволяє встановлювати шаблони, зв'язки та правила, властиві даним, та робити прогнози на основі отриманих закономірностей. Це, як правило, дозволяє значно скорочувати час моделювання. Тому розробка способів організації машинного навчання та їх реалізації є важливим завданням в області комп'ютерної інженерії.

Отже, розробка моделі процесів в нестисливій рідині на основі решітчастої моделі Больцмана, способу коригування стисливості з використанням рівняння Пуассона для уточнення значень поля швидкостей і розробка способів машинного навчання та їх реалізації є важливим завданням в області комп'ютерної інженерії, які вирішуються в дисертаційному дослідженні.

### **Оцінка обґрунтованості наукових результатів дисертації, їх достовірності та новизни.**

Наукова новизна результатів дисертаційного дослідження на мою думку полягає в наступному:

1. Запропоновано модель опису гідродинамічних процесів в нестисливій рідині для визначеного класу об'єктів на основі решітчастої моделі Больцмана D2Q9 з урахуванням оператора зіткнень Бхатнагара - Гросса – Крука, для якої отримано рівняння рівноважної функції, визначено вагові коефіцієнти та описано суть кроків зіткнення та поширення, отримано формули для функцій розподілу на основі початкових значень макроскопічної швидкості, визначені початкові та граничні умови, що, відповідно, характеризують властивості рідини на початку моделювання та особливості взаємодії рідини з межами обчислювальної області під час моделювання, отримані формули для функцій розподілу на основі початкових значень, описана модифікована функція розподілу на основі мінімізації дискретної ентропії, яка відрізняється від відомих кращою безумовною лінійною стабільністю моделювання.

2. Запропоновано дворівневий метод моделювання руху рідини за допомогою решітчастої моделі Больцмана та способу уточнення поля швидкості на основі використання рівняння Пуассона для тиску, що на кожному кроці за часом передбачає лінійну дискретизацію рівняння Пуассона для тиску, формування на цій основі системи лінійних алгебраїчних рівнянь, її вирішення та корекцію поля швидкостей за визначеним правилом. Описаний детальний алгоритм дворівневого методу моделювання руху рідини, де кожна ітерація моделювання реалізує схему предиктора та коректора, де, на відміну

від відомих, крок предиктора покращено за рахунок модифікованої рівноважної функції на основі мінімізації дискретної ентропії. Показано, що при реалізації дворівневого методу можливе розпаралелювання на основі підходу domain decomposition, яке є масштабованим для будь-якої квадратної обчислювальної області та довільної кількості процесорів.

3. Набув подальшого розвитку метод вирішення рівняння Пуассона, де при лінійній його дискретизації формується система лінійних алгебраїчних рівнянь, яка вирішується методом машинного навчання на запропонованій загортковій нейронній мережі, що враховує геометрію складних обчислювальних областей. За результатами проведеної серії експериментів встановлено, що середнє значення густини рідини в обчислювальній області змінюється значно повільніше в порівнянні зі звичайним методом LBM, а профіль швидкості ламінарного потоку в трубці близький до теоретичного, результати вирішення СЛАР на основі нейронної мережі в порівнянні з чисельним методом Якобі є ідентичними, а обчислювальна швидкість для однієї ітерації дворівневого методу при використанні методу вирішення СЛАР на основі нейронної мережі при використанні GPU більш ніж у 6 разів вища, ніж з використанням чисельного методу Якобі, та у 13 разів при використанні NPU.

Достовірність отриманих в ході дослідження наукових результатів підтверджена послідовним теоретичним обґрунтуванням запропонованих методів та аналізом результатів експериментів. Висновки та наукові твердження, що включені у роботу, достатньо обґрунтовані.

Отже, в дисертаційній роботі поставлене наукове завдання виконано повністю, здобувач повною мірою оволодів методологією наукової діяльності.

**Оцінка змісту дисертації, її завершеність та дотримання принципів академічної доброчесності.**

За своїм змістом дисертаційна робота здобувача Кузьмича Валентина Анатолійовича повністю відповідає Стандарту вищої освіти зі спеціальності «123 – Комп'ютерна інженерія» та напрямкам досліджень відповідно до освітньої програми «Комп'ютерна інженерія».

Дисертаційна робота є завершеною науковою працею і свідчить про наявність особистого внеску здобувача у науковий напрям «Згорткові нейронні мережі».

Розглянувши звіт подібності за результатами перевірки дисертаційної роботи на текстові співпадіння, можна зробити висновок, що дисертаційна робота Кузьмича Валентина Анатолійовича є результатом самостійних досліджень здобувача і не містить елементів фальсифікації, компіляції, фабрикації, плагіату та запозичень. Використані ідеї, результати і тексти інших авторів мають належні посилання на відповідне джерело.

**Мова та стиль викладення результатів**

Дисертаційна робота написана українською мовою.

Дисертація є послідовною та добре структурованою. Стиль мовлення науковий, дотримання загальноприйнятої термінології допомагає уникнути непорозумінь та забезпечує єдність термінологічного підходу.

Дисертація складається з вступу, 5 розділів, висновків, списку літератури та додатків. Загальний обсяг дисертації 213 сторінок.

**У вступі** розглядається актуальність дисертаційного дослідження, зв'язок роботи з науковими програмами, планами та темами. Формулюється мета, завдання, об'єкт та предмет дослідження, наукова та практична новизна отриманих результатів. Приводяться відомості про особистий внесок здобувача та апробацію результатів дисертації.

**У першому розділі** проведено огляд наукової літератури, присвяченої методам моделювання руху рідин. Висвітлені різні методи моделювання, включаючи ті, що базуються на рівняннях Нав'є-Стокса, LBM та машинному навчанні. Ретельно розглянуті загальні переваги та недоліки цих підходів, а також проаналізована література, що стосується рівняння Пуассона. На основі цього дослідження сформульовано завдання дисертаційної роботи.

**У другому розділі** надано докладний опис решітчастої моделі Больцмана D2Q9 (двовимірний простір та 9 дискретних швидкостей), яка досліджується в дисертаційній роботі для варіанту решітки (2.31). В тому числі:

- надано опис кінетичної моделі Больцмана та дискретного решітчастого рівняння Больцмана, яке з урахуванням оператора зіткнень Бхатнагара - Гросса – Крука зведено до співвідношення (2.25),

- запропоновано використовувати спрощену рівноважну функцію розподілу за рахунок використання тільки лінійного члена розкладання в ряд Тейлора експоненціальної функції,

- отримано рівняння рівноважної функції в вигляді (2.38), визначено для нього вагові коефіцієнти та описано суть кроків зіткнення та поширення,

- показано зв'язок між решітчастою моделлю Больцмана та рівнянням Нав'є-Стокса,

- запропоновано задавати початкові умови для значення макроскопічної швидкості та густини певними функціями в кожній з точок простору та отримано формули для функцій розподілу на основі початкових значень макроскопічної швидкості,

- визначено граничні умови притоку рідини, її витоку та граничну умову твердої стіни,

- отримано модифіковану рівноважну функцію розподілу (2.90), яка гарантує безумовну лінійну стабільність моделювання,

- запропоновано спосіб уточнення поля швидкості в методі LBM за умови нестисливості досліджуваної рідини на основі використання рівняння Пуассона для тиску, що передбачає: лінійну дискретизацію рівняння Пуассона

для тиску та отримання рівняння (2.96)), перетворення (2.96) в систему лінійних алгебраїчних рівнянь і її розв'язання, корекцію поля швидкостей згідно (2.97).

**У третьому розділі дисертації:**

- представлено загальний вид СЛАР, що формується при перетворенні рівняння (2.96) в систему лінійних алгебраїчних рівнянь,
- дана характеристика ітераційних методів вирішення СЛАР: Якобі, Гауса-Зейделя та релаксацій, серед недоліків яких визначено можлива велика кількість ітерацій, що зумовлює доцільність використання нейронних мереж як задачі регресії у статистичному моделюванні та машинному навчанні,
- дано формалізований опис задачі моделювання розв'язку крайової задачі на основі рівняння Пуассона за допомогою штучної нейронної мережі,
- розглянуті та описані функції втрат, які мінімізуються в ході вирішення задачі регресії в машинному навчанні,
- розглянуті різні шари штучних нейронних мереж та функції активацій, які використовуються для досягнення бажаних результатів,
- приведено загальний огляд процесу вирішення диференціальних рівнянь за допомогою штучних нейронних мереж – формулювання задачі, генерація навчальних даних, проектування архітектури нейронної мережі, вибір відповідної функції втрат, навчання штучної нейронної мережі та оцінка точності моделі. при розробці конкретної нейронної мережі для моделювання розв'язку рівняння Пуассона.

**Четвертий розділ** присвячений комп'ютерній реалізації дворівневого методу моделювання руху рідини на основі решітчастої моделі Больцмана D2Q9 для запропонованого варіанту решітки (2.31) та згорткової нейронної мережі. Описано структуру запропонованої нейронної мережі, яка моделює розв'язок крайової задачі на основі рівняння Пуассона, та розроблена з урахуванням геометрії обчислювального простору, де виконується моделювання. Описаний детальний алгоритм реалізації дворівневого методу моделювання руху рідини, де кожна ітерація реалізує схему предиктор – коректор, а крок предиктора покращений за рахунок модифікованої рівноважної функції на основі мінімізації дискретної ентропії.

Запропоновано спосіб розпаралелювання на основі підходу domain decomposition та показано, що він є масштабованим для будь-якої квадратної обчислювальної області та довільної кількості процесорів.

На основі аналізу ряду спеціалізованих обчислювальних архітектур штучних нейронних мереж сформована нейронна мережа, орієнтована на використання спеціалізованого обчислювального пристрою NPU Zynq UltraScale+ MPSoC ZCU104.

Нейронна мережа реалізовувалася для двох типів прискорювачів: GPU та NPU, де для тренування використано фреймворк Tensorflow та програмне

забезпечення CUDA та cuDNN. При такій реалізації розроблена модель вже оптимізована для графічних процесорів компанії nVidia, тому при проведенні експериментів запропоновано використовувати той же графічний процесор, на якому виконувалось навчання нейронної мережі. Тестове програмне забезпечення розроблене за допомогою мови програмування Python, бібліотек PyQt6, Numpy, matplotlib і PIL та фреймворку для глибокого машинного навчання TensorFlow. Наведені скриншоти інтерфейсу програми після її запуску, стану після завантаження обчислювальної області, стану процесу моделювання та його закінчення з використанням шкали прогресу, а також результатів моделювання.

**П'ятий розділ** дисертації присвячений аналізу результатів чисельних експериментів для тестового програмного забезпечення. В експериментах оцінювалося:

- ефективність розробленого дворівневого методу щодо забезпечення нестисливості рідини,
- точність методу вирішення СЛАР на основі нейронної мережі в порівнянні з чисельним методом Якобі,
- обчислювальна швидкість розробленого методу та вплив апаратних прискорювачів на швидкість обчислень.

За результатами проведеної серії експериментів встановлено:

- середнє значення густини рідини в обчислювальній області змінюється значно повільніше в порівнянні зі звичайним методом LBM, а профіль швидкості ламінарного потоку в трубці близький до теоретичного;
- результати вирішення СЛАР на основі нейронної мережі в порівнянні з чисельним методом Якобі є ідентичними, що свідчить про точність та надійність розробленого методу;
- обчислювальна швидкість для однієї ітерації дворівневого методу при використанні методу вирішення СЛАР на основі нейронної мережі при використанні GPU більш ніж у 6 разів вища, ніж з використанням чисельного методу Якобі, та у 13 разів при використанні NPU.

Дисертаційна робота оформлена відповідно до вимог наказу МОН України від 12 січня 2017 р. № 40 «Про затвердження вимог до оформлення дисертації».

### **Оприлюднення результатів дисертаційної роботи**

Наукові результати дисертації висвітлені у 8 наукових публікаціях здобувача, серед яких: 1 стаття у науковому виданні, включеному на дату опублікування до переліку наукових фахових видань України; 3 статті у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus.

Результати дисертації апробовані на 4 наукових фахових конференціях.

Таким чином, основні наукові результати дисертаційної роботи повністю висвітлені у наукових публікаціях здобувача.

### **Недоліки та зауваження до дисертаційної роботи.**

1. Наукові результати, наведені в дисертаційній роботі, є достовірними, відповідають змісту роботи та підтверджують висновок про те, що поставлене наукове завдання виконано повною мірою, проте сформульовані дуже лаконічно і доцільно було б більш детально представити в них суть ідей та підходів, за рахунок яких такі результати отримані.
2. «...Ми обрали решітку D2Q9 через простоту в реалізації, менший об'єм обчислень, в порівнянні зі складнішими схемами та прийнятну точність....» (стор.74-75). В матеріалах розділу відсутні обґрунтування стосовно прийнятної точності.
3. «...Метод крупних частинок володіє широкими обчислювальними можливостями, що дозволяють досліджувати складні потоки навколо тіл різної форми, як при дозвукових, так і надзвукових швидкостях. Основним недоліком методу є нестійкість чисельної схеми з ростом числа Рейнольдса до значень  $10^2 - 10^3$  ....» (стор.26). При високих швидкостях значення числа Рейнольдса досягають значень  $10^5 - 10^6$ .
4. « Даний метод дозволяє моделювати рух нестисливої рідини більш точно, ніж класичні методи LBM. (стор. 94). Такий висновок можна зробити тільки на основі результатів проведених досліджень, які до стор. 94 ще не відображалися, а наведене твердження є анотацією результату, підтвердженого пізніше.
5. наявна незначна кількість помилок при оформленні тексту дисертації:
  - некоректно використано терміни рівняння безперервності та неперервності (потрібно рівняння нерозривності) та кінцевих елементів (потрібно скінчених елементів);
  - в тексті є незакінчене речення; «Порівняння показало високу точність отриманих розв'язків і зауважено, що LBM є в 2,5 рази» (стор.26)
  - незначна кількість помилок в словах, наприклад, «недоліком» (стор.26), «нейроеволюційними» (стор.29), «в макроскопічній масштабі» (стор. 36), «зв'язку між розміром комірки та точність моделювання» (стор.39) «потім» замість потік (стор.40).

Вважаю, що висловлені зауваження не є визначальними і не зменшують загальну наукову новизну та практичну значимість результатів та не впливають на позитивну оцінку дисертаційної роботи.

### **Висновок про дисертаційну роботу**

Вважаю, що дисертаційна робота здобувача ступеня доктора філософії Кузьмича Валентина Анатолійовича на тему «Методи та засоби математичного моделювання руху рідин з використанням машинного навчання» виконана на високому науковому рівні, не порушує принципів академічної доброчесності та є закінченим науковим дослідженням, сукупність теоретичних та практичних результатів якого розв'язує наукове завдання, що має істотне значення для галузі знань «Інформаційні технології». Дисертаційна робота за актуальністю, практичною цінністю та науковою новизною повністю відповідає вимогам чинного законодавства України, що передбачені в п.6 – 9 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 р. № 44.

Здобувач Кузьмич Валентин Анатолійович заслуговує на присудження ступеня доктора філософії в галузі знань «12 – Інформаційні технології» за спеціальністю «123 – Комп'ютерна інженерія».

**Офіційний опонент:**

Завідувач відділу

Інституту проблем моделювання в енергетиці

ім. Г.Є. Пухова НАН України,

доктор технічних наук, професор

Степан ВИННИЧУК

Підпис д.т.н., проф.. Степана ВИННИЧУКА засвідчую

Учений секретар

ІПМЕ ім. Г.Є.Пухова НАН України



Вікторія ЧЬОЧЬ.

М.П.

\_\_\_\_\_ 20\_\_ року