УТВЕРЖДАЮ

Директор

Федерального государственного учреждения

«Федеральный исследовательский центр

Институт прикладной математики им.

М.В. Келдыша Российской академии наук»

д.ф.-м.н., чл. Корр. РАН

Аптекарев А.И.

«1» сентября 2022 года

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Осинского Александра Игоревича «Кинетика агрегации и фрагментации в неоднородных системах», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Актуальность диссертационной работы. Диссертационное исследование Осинского Александра Игоревича посвящено выводу и анализу уравнений, описывающих кинетику агрегации и фрагментации в неоднородных системах. Новые уравнения – это краеугольный камень математического моделирования. А их обоснование, связь с другими уравнениями, классификация представляет несомненный интерес, так что тему диссертации следует признать весьма актуальной.

Цели диссертационной работы. Основной целью данной работы является построение и исследование моделей агрегации и фрагментации гранулярных газов, позволяющих учитывать пространственные неоднородности, различие скоростей потоков кластеров различного размера и их парциальных температур. Новая модель должна учитывать изменение потоков и температур, а также вязкости и теплопроводности исследуемого гранулярного газа, при этом опираясь на микроскопические модели столкновений.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие конкретные задачи:

1. На основе микроскопических моделей столкновений и соответствующих уравнений Больцмана вывести уравнения Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса, объединяющих градиентные слагаемые со слагаемыми, описывающими процесс агрегации.

2. Разработать быстрые малоранговые методы решения обобщенных уравнений Смолуховского и проведения Монте-Карло моделирования систем с агрегацией.

3. Провести численные и теоретический анализ полученных уравнений: исследовать возможные виды поведения решений, провести скейлинговый анализ, построить примеры точных аналитических решений.

Научная новизна диссертационного исследования

Научная новизна заключается в:

1. Построении модели агрегации в пространственно-неоднородных системах на основе уравнений Больцмана, что позволило вывести уравнения Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса.
2. Глубоком исследовании новой модели температурно-зависимых уравнений Смолуховского, включая случай без агрегации, влияние агрегации на функцию распределения скоростей, поведении системы при различных параметрах вероятности агрегации на малых и больших временах.
3. Новых результатах для фрагментационных столкновений, полученных методами молекулярной динамики. В частности, впервые построены распределения кинетических энергий для столкновения пар кластеров, получены аналитические приближения для числа осколков и их потенциальной энергии после столкновения в зависимости от скоростей сталкивающихся кластеров.
4. Построении новых эффективные методы решения обобщенных уравнений Смолуховского и проведения Монте-Карло моделирования, применимые и для классических уравнений.

Содержание диссертационного исследования

Диссертационная работа включает введение, основную часть (из 5 глав), заключение, список литературы и 5 приложений. Список литературы содержит 129 наименований.

Во *введении(стр.7-17)* приведено краткое содержание диссертационного исследования автора, а также обоснована его значимость. В первом разделе подчеркивается актуальность исследования. Во втором четко определена исследуемая проблема. На стр. 8 приведено основное уравнение типа Больцмана, из которого будут получаться уравнения Смолуховского. К сожалению, не расшифрованы интегралы столкновений. И во всей диссертации нет их обсуждения: на них весьма интересно и необходимо было бы посмотреть и тщательно обсудить свойства.

Первая глава(стр.18-34)содержит обзор литературы по теме диссертационного исследования и весьма интересен. Глава начинается с перечисления основных теоретических результатов, касающихся уравнений Смолуховского, которые используются для описания процессов агрегации. Автор подробно останавливается на выводе двух основных моделей агрегации – диффузионной и баллистической, приводятся соответствующие ядра, при этом второе из них на основе интеграла столкновений (стр.21). Подробно рассматриваются все основные результаты теории масштабирования, используемой для анализа решений уравнений Смолуховского. Что такое теория масштабирования понять из текста невозможно: это несформировавшийся математически раздел, где рассуждения изобилуют неопределенными понятиями. Обещается, что всё будет объяснено в разделе 5.3, но и там понять сложно. Описываются существующие эмпирические наблюдения, которые обычно используются для введения слагаемых, отвечающих за фрагментацию. Описываются методы исследования вида функции распределения скоростей частиц в неоднородных системах, а именно её отличия от распределения Максвелла: метод Чэпмена-Энскога и метод Грэда. Здесь ничего не говорится, какие потенциалы используются, твердые шары, или Максвелловские молекулы или степенные потенциалы: это было бы уместно. Наконец, (*1.7. Численное решение уравнений Смолуховского- стр.32-34)* приводятся основные численные методы решения уравнений Смолуховского, а также проведения Монте-Карло моделирования агрегирующих гранулярных газов(Метод Гиллеспи, Метод принятия-отклонения). Читать раздел очень интересно, но затруднительно.

Вторая глава(стр.36-57) посвящена обобщенным уравнениям Смолуховского, все еще для случая пространственно-однородных систем. Глава начинается с описания вывода температурно-зависимых уравнений Смолуховского, которые позволяют описывать изменение температуры при столкновениях частиц полидисперсного газа. Рассматриваются аналитические решения полученных уравнений для ядер специального вида: такие результаты особенно ценны при простых выражениях. Как частный случай, рассматривается общий вид эволюции температур в неагрегирующих гранулярных газов. Для него автором выводится предельное распределение температур в зависимости от вида притока кинетической энергии, которая расходуется в неэластичных столкновениях. Рассматривается вид уравнений Смолуховского в случае учета тройных столкновений (стр.43-47). Наконец, исследуется отличие функции распределения скоростей частиц при агрегации и доказывается её близость к распределению Максвелла (стр.47-51). Неясно, насколько эта работа по выводу всех этих уравнений имеет смысл: вычисленные коэффициенты вряд ли отражают действительность более точно, чем известные более простые уравнения.

В *третьей главе(стр. 57-76)* выводятся системы уравнений Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса. Здесь сразу ничего непонятно, из каких уравнений это получается. Говорится про уравнение Больцмана, но это какое-то уравнение Больцмана с агрегацией, где оно? Большая часть вывода проведена автором с использованием Wolfram Mathematica (а это особенно ценно), однако в данной главе также представлен пошаговый вывод вида одного из ядер агрегации. В качестве примера рассматривается система с наличием неоднородности в вертикальном направлении с учетом силы тяжести и сопротивления воздуха. Используется метод Грэда (стр. 71-73): он как и метод Чэпмена-Энскога подчеркивает все слабости самого уравнения Больцмана, связанные с неадекватной зависимостью ядра рассеяния в самом уравнении Больцмана. Эта неадекватность кратно усиливается при вычислении ядер Смолуховского. Отдельно рассматривается обобщение влияние окружающего молекулярного газа на обобщенные уравнения Смолуховского. Рассмотрен пример решения уравнений Смолуховского-Навье-Стокса для агрегирующего гранулярного газа в постоянном течении со слабым градиентом скорости потока (стр.75-76).

В *четвертой главе (Распределения осколков при фрагментации , стр.77-101.)* представлены результаты многочисленных симуляций фрагментационных столкновений методами молекулярной динамики. Автором рассмотрены четыре различных потенциала (при этом один из них – потенциал Терсоффа – даже не выписан, хотя это было бы уместно чтобы читатель или оппонент ознакомился), и для каждого исследован вид распределения размеров и кинетических энергий осколков в зависимости от массы, а также самого вида распределения в зависимости от скорости столкновения. Следует признать, что использование потенциалов Терсоффа и Джонсона-Кендалла-Робертса (JKR) интересно и ново. Но сами потенциалы требуют критичного , гораздо более критичного, рассмотрения: они должны быть гораздо тщательнее проанализированы, и должны быть установлены границы их применимости. Они введены в 70-х годах, и насколько они работоспособны – неясно. Вспоминается история с Максвелловскими молекулами: Максвелл думал, что его потенциал, с силой обратной 5-й степени – это реальность. Основания были: это единственный точнорешаемый случай в методе Максвелла-Чэпмена-Энскога. Чэпмен и Энског добавили математику поправок к этому точному решению Максвелла. Возникает вопрос и к диссертанту, почему не используются максвелловские молекулы, когда в диссертации появляются интегралы столкновений? Формула (90) на стр. 80 явно противоречива: что-то нужно подправить, иначе координата в правой части равна нулю , если сравнить с левой частью. Для полученных распределений найдены аналитические приближения, показано, как они могут быть использованы для включения фрагментационных слагаемых в уравнения Смолуховского. Построена диаграмма (стр.90), показывающая вид результата столкновения в зависимости от соотношения кинетической и потенциальной энергии кластеров. Рассмотрена возможность учета фрагментации в обобщённых уравнениях Смолуховского. Следует признать попытку оценить ядра дробления методами молекулярной динамики героической и наименее обоснованной, хотя и новой. А диаграмму на стр. 90 с анализом потенциалов весьма наглядной.

В *пятой главе (Численные методы решения обобщенных уравнений Смолуховского, стр.102-141)* описаны новые методы решения уравнений Смолуховского и проведения Монте-Карло моделирования, которые позволяют, видимо, существенно ускорить вычисления путем использования малоранговых аппроксимаций. Судя по-всему, это любимая глава диссертанта. Малоранговый метод Монте-Карло при этом описан в трех вариациях – для классических уравнений Смолуховского, для температурно-зависимых уравнений Смолуховского, и для уравнений Больцмана (прямое Монте-Карло моделирование). Предложен метод, логарифмически зависящий от числа частиц (стр.109-115). Это – один из основных результатов диссертации, и, видимо, самостоятельно полученный подзащитным. Интересен также «Малоранговый метод DSMC» (стр.117-119). Для малорангового метода решения температурно-зависимых дифференциальных уравнений, который обобщает метод для классических уравнений Смолуховского, также представлены методы ускорения (стр.119-128), основанные на аппроксимации хвоста распределения концентраций кластеров и использовании адаптивного шага по времени. В конце главы результаты вышеописанных методов сравниваются между собой и с предсказаниями разработанной автором теории масштабирования для температурно-зависимых уравнений(стр.128-141). На стр. 135 приводится гипотеза об отсутствии геляции на основе численного счета. Видимо, справедливость этой гипотезы зависит от коэффициентов. Диссертация ссылается на работу 2022 года Н.В.Бриллиантова и А.И.Осинского, где идет ссылка на Догена и Эрнста 1985 года. Речь идет о по сути глобальной теореме существования бесконечной системы уравнений, и как правило, там все зависит от выбора класса функций. Поэтому этот вопрос требует гораздо более глубокой проработки. Вопрос представляется важным и весьма перспективным. На основе численного счета геляцию невозможно уловить, так как дискретизация времени уже делает решение глобально существующим, т.е. во все времена.

В *заключении* автор возвращается к основным результатам диссертации, еще раз подчеркивает их практическую значимость и рассматривает дальнейшие пути развития исследований по данной тематике.

Степень обоснованности научных положений и выводов. Полученные в работе выводы и выносимые на защиту положения являются обоснованными. Корректность разработанных моделей и алгоритмов подтверждается сравнением теоретических предсказаний с результатами решения уравнений Смолуховского и результатами Монте-Карло моделирования, в том числе прямого моделирования для уравнений Больцмана.

Научные положения и результаты диссертационного исследования дважды докладывались на международных конференциях. Основные результаты опубликованы в 6 научных работах. Из них все опубликованы в журналах, входящих в квартиль Q1 в международной системе цитирования Scopus.

Практическая и научная ценность результатов работы. Полученные в диссертационном исследовании уравнения, описывающие агрегацию и фрагментацию в неоднородных системах, имеют высокую практическую значимость в различных областях науки. Они полезны как при описании эволюции астрофизических систем, таких как протопланетные диски и пояса астероидов, так и в метеорологии, при моделировании образования дождевых капель, а также для моделирования распространения загрязнений. Также следует отметить высокую значимость разработанных методов решения обобщенных уравнений Смолуховского и проведения Монте-Карло моделирования. Проблема моделирования эволюции полидисперсных газов стояла десятки лет, и её удалось решить автору благодаря использованию малоранговой аппроксимации. Данный результат ценен не только для моделирования процессов агрегации и фрагментации, но и в принципе позволяет существенно ускорить прямое моделирование Монте-Карло любых смесей с существенным различием в размерах частиц различных компонент.

Замечания по работе. Представленная на отзыв диссертация имеет ряд недостатков, которые, однако, не снижают ее ценности. В частности:

1. Переход от уравнений типа Больцмана к уравнениям типа Смолуховского рассматривался нами в работе Аджиев С.З., Веденяпин В.В., Волков Ю.А., Мелихов И.В. Обобщенные уравнения типа Больцмана для агрегации в газе // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2017. — Т. 57, № 12. — С. 2065–2078. Там исходное уравнение типа Больцмана выписано. Здесь я не нашел исходного уравнения, кроме как во введении на стр.8. Но интегралы там не выписаны, так что неясно о чем идет речь, хотя это – ключевой момент. Откуда выводим? И нет ссылки, что это за интегралы. Автор делает правильно. Обычный интеграл столкновений редкий человек запишет без ошибок. А уж с агрегацией – невероятно, чтобы он где-то был записан, кроме как в особо тщательно проработанных текстах. Где эти тексты? Я бы с удовольствием взглянул на них. В работе (PHYSICAL REVIEW E 101, 022903 (2020) Size-polydisperse dust in molecular gas: Energy equipartition versus nonequipartition Alexander Osinsky ,[1] Anna S. Bodrova ,[2],[3],[4] and Nikolai V. Brilliantov[1]) есть кинетическое уравнение, правая часть – это сумма двух интегралов, Больцмановского обычного (почти обычного) и то, что авторы называют Крамерса-Мойала, подозрительный интеграл со вторыми производными (подозрительность основана на том, что в том виде, как он выписан, уравнение перестает сохранять положительность функции распределения). В работе (Journal of Computational Physics,2020, Low-rank method for fast solution of generalized Smoluchowski equations A.I. Osinsky) вообще нет кинетических уравнений. В работе (PHYSICAL REVIEW E 102, 042909 (2020) Role of energy in ballistic agglomeration N. V. Brilliantov,[1] A. I. Osinsky ,[1] and P. L. Krapivsky) тоже нет кинетических уравнений, хотя скорость агрегации обсуждается(формула (2)) как бы на основе невыписанного уравнения. Работа (Physica A,2020, Scaling laws in fragmentation kinetics, Alexander Osinsky a,∗, Nikolai Brilliantov) не содержит кин уравнений также. Работа (Scientific Reports, 2020, temperature distribution in driven granular mixtures does not depend on mechanism of energy dissipation Anna S. Bodrova*, Alexander Osinsky, Nikolai V. Brilliantov). В работе (PHYSICAL REVIEW E 105, 034119 (2022), Anomalous aggregation regimes of temperature-dependent Smoluchowski equations, A. I. Osinsky 1 and N. V. Brilliantov) агрегационный интеграл выписан. (формула 4) и соответствующее уравнение типа Больцмана (уравнение (8)). Подставляется максвелловское распределение. Но это разве стационар? Твердо можно сказать – нет. Обычно это в обычном уравнении Больцмана доказывается с помощью Н-теоремы, введением энтропии. Здесь об этом ни слова. Так что следует признать всю эту работу формальной и необоснованной. Обоснования должны быть даны на основе Н-теоремы: работы (Я. Г. Батищева, В. В. Веденяпин. II-й закон термодинамики для химической кинетики. //Матем. моделирование, 2005, том 17, номер 8, страницы 106–110 .; Аджиев С.З., Веденяпин В.В., Волков Ю.А., Мелихов И.В. Обобщенные уравнения типа Больцмана для агрегации в газе // Журнал вычислительной математики и

математической физики. — 2017. — Т. 57, № 12. — С. 2065–2078.; Веденяпин В.В., Аджиев С.З. Энтропия по Больцману и Пуанкаре // Успехи математических наук. — 2014. — Т. 69, № 6. — С. 45–80.) и другие как раз выделяют те уравнения, для которых H-теорема справедлива. А поэтому для которых применим метод авторов. Таким образом, наши работы дополняют эту диссертацию критическим образом, выделяя нужные уравнения, для которых максdелловское распределение годится в качестве нулевого приближения.

2. Молекулярная динамика вообще имеет много слабостей: как анализировать вычисления? Классики молекулярной динамики в нашей стране Иванов Михаил Самуилович (к сожалению, покойный) и его продолжатели с программой SMAIL усредняют так, что получается учет короткодействия и уравнение Больцмана. Другие, в частности в ИПМ им. Келдыша РАН (Волков Ю.А.) усредняют так, что получается учет дальнодействия, уравнение Власова. Желательно все это подробно анализировать: в диссертации непонятно, кто с кем сталкивается. В этой главе 5 желательно было бы чётче (а не только в виде ссылок на литературу) прописать ещё раз (т.е. при непосредственном рассмотрении), какие методы предложны автором, а какие были известны.

3. Небрежность в оформлении приложений. Первые две формулы на стр. 162 желательно покорректней записать. Что они вообще означают? Судя по всему, одной и той же буквой автор пытается об означить и полином и множество полиномов степени не выше заданной.

Общая оценка работы. Работа выполнена на высоком теоретическом уровне и представляет большой интерес для специалистов в кинетической теории газов, а соискатель имеет достаточный объем публикаций в ведущих научно-технических журналах. Замечания, представленные выше, имеют характер общих замечаний о состоянии науки о кинетических уравнений и показывают и перспективы и перспективность дальнейших исследований.

Заключение. Работа выполнена на высоком теоретическом уровне и представляет большой интерес для специалистов в кинетической теории газов, а соискатель имеет достаточный объем публикаций в ведущих научно-технических журналах. Результаты, полученные в диссертации, обоснованы, обладают научной новизной и имеют практическую значимость. Автор отзыва выражает благодарность к.ф.-м.н. С.З.Аджиеву, к.ф.-м.н. Я.Г.Батищевой, к.ф.-м.н. Ю.А.Волкову за помощь в составлении отзыва.

Автореферат полностью и точно отражает содержание диссертации.

Диссертационное работа А.И. Осинского является законченным научным исследованием и удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям, выполненным по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Диссертация отвечает требованиям пунктов 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней, а ее автор несомненно достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук. Диссертацию следует признать весьма интересной и перспективной как по постановкам задач, так и по методам решения.

Отзыв на диссертацию и автореферат обсужден и утвержден на семинаре им К.И.Бабенко под руководством замдиректора д.ф.-м.н. А.Л.Афендикова 21 августа 2022 г. в ИПМ им . М.В.Келдыша РАН.

Отзыв составлен доктором физико-математических наук, ведущим научным сотрудником ИПМ им. М.В. Келдыша РАН Веденяпиным Виктором Валентиновичем.

1.09.22 /Веденяпин/

Подпись В.В. Веденяпина удостоверяю.

Ученый секретарь

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН,

К.ф.-м.н. А.А.Давыдов

Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук»

125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4

Телефон: +7-499-978-13-14

Эл. почта: office@keldys.ru