

ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора физико-математических наук, Богомолова Сергея Владимировича 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 диссертационного исследования.

Уравнения Смолуховского широко используются для моделирования процессов агрегации и коагуляции в различных природных и промышленных процессах от молекулярного уровня (самосборка полимеров) до астрофизических явлений (эволюция протопланет и планетарных колец). Важную роль в агрегационных процессах играют различного рода неоднородности, в частности, неоднородность распределения в пространстве концентраций и кинетических энергий кластеров различного размера. Существующие попытки учесть такого рода неоднородности в уравнениях Смолуховского делают это феноменологически в макроскопическом приближении, подбирая соответствующие параметры. Таким образом, большой интерес представляет вывод влияния пространственных неоднородностей исходя из микроскопических представлений.

Автором диссертационной работы показано, что такой вывод можно осуществить на основе кинетических уравнений Больцмана для смесей химически реагирующих газов. При этом, наравне с уравнениями Смолуховского для концентраций, моментов нулевого порядка, выводятся уравнения для моментов более высоких порядков, а именно, потоков и парциальных температур. Это приводит к системам уравнений Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса. Автором также решается проблема эффективного решения новых расширенных уравнений Смолуховского, путем разработки новых малоранговых методов. Таким образом, исследование посвящено выводу из представления среды из разнокалиберных частиц с помощью их функций распределения дополненных пространственно неоднородных уравнений Смолуховского и построению эффективных алгоритмов их решения.

Содержание работы.

Диссертационное исследование Осинского А. И. включает в себя введение, 5 глав, заключение, список литературы и 5 приложений.

Введение содержит обоснование актуальности исследования, определяет исследуемую проблему, а также ставит цели и задачи исследования. Даны основные положения, выносимые на защиту. Указаны методы, позволившие достичь описанных в диссертации результатов. Показаны научная новизна и практическая значимость исследования. В конце указаны опубликованные статьи в рецензируемых журналах и сделанные доклады на международных конференциях, подтверждающие достоверность полученных результатов.

Первая глава содержит детальный анализ области исследования. Она начинается с перечисления известных аналитических решений классических уравнений Смолуховского. Затем автор представляет вывод двух основных моделей агрегации – диффузионной и баллистической. Особое внимание уделено теории масштабирования как основному инструменту теоретического анализа поведения решений уравнений Смолуховского. Также описываются традиционные методы получения системы макроскопических уравнений газовой динамики – метода Грэда и Чепмена-Энскога. Автор также перечисляет результаты исследований фрагментации. В конце главы описываются численные методы решения уравнений Смолуховского как системы обыкновенных дифференциальных уравнений и стандартные методы Монте-Карло.

Вторая глава посвящена получению температурно-зависимых уравнений Смолуховского и других обобщений, в том числе учет тройных столкновений и разложение функции распределения скоростей по полиномам Сонина. Кроме вывода самих уравнений, автором также представлены тестовые аналитические решения для некоторых специально подобранных ядер агрегации. Отдельный раздел посвящен анализу распределения температур в неагрегирующих гранулярных газах как частному случаю температурно-зависимых уравнений Смолуховского в пределе, когда вероятность агрегации равна нулю.

Третья глава содержит вывод уравнений Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса из уравнений Больцмана. Они описывают процесс агрегации в случае наличия различного рода пространственных неоднородностей. Уравнения Смолуховского-Эйлера содержат градиенты концентраций, потоков и парциальных температур только первого порядка, тогда как уравнения Смолуховского-Навье-Стокса также содержат коэффициенты вязкости и теплопроводности для компонентов смеси. Большая часть вывода проведена автором в Wolfram Mathematica, однако отдельный раздел посвящен пошаговому объяснению того, как именно выводятся выражения для ядер агрегации в новых уравнениях. Также рассматривается обобщение, учитывающее влияние окружающего молекулярного газа. Наконец, приводится пример решения уравнений Смолуховского-Навье-Стокса для течения с постоянным градиентом потока.

В четвертой главе автор исследует процесс фрагментации при столкновении сферических кластеров методами молекулярной динамики. Исследованы распределения размеров и кинетических энергий осколков для четырех различных потенциалов взаимодействия. Также анализируется количество осколков-мономеров в зависимости от скорости столкновения. Во всех случаях автору удалось приблизить полученные распределения с помощью степенных и экспоненциальных функций. Рассматривается обобщение уравнений Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса с помощью фрагментационных членов, основанных на результатах численных экспериментов.

Пятая глава посвящена описанию численных методов и их сравнению между собой и с предсказаниями теории масштабирования. Рассматриваются как обобщение малорангового метода для решения уравнений Смолуховского, так и новые малоранговые методы Монте-Карло, также позволяющие существенно ускорить моделирование агрегации. Сравнение проводится для общего случая ядра температурно-зависимой агрегации в пространственно-однородной системе. Показано совпадение результатов обоих численных методов и предсказаний описанной в этой же главе теории масштабирования для температурно-зависимых уравнений.

В заключении автор возвращается к основным результатам диссертации и подчеркивает значимость исследовательской работы.

Научная новизна.

- 1) Автором получены уравнения Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса для пространственно-неоднородной агрегации. Написан код в Wolfram Mathematica, позволяющий автоматически выводить ядра столкновений для систем уравнений типа Смолуховского.
- 2) Методами молекулярной динамики исследован процесс фрагментации. Получены новые общие результаты о виде распределений осколков в зависимости от скорости столкновения и вида потенциала взаимодействия.
- 3) Глубоко исследованы температурно-зависимые уравнения Смолуховского. Построена фазовая диаграмма для различных параметров, определяющих вероятность агрегации. Численно и аналитически исследованы возможные варианты поведения системы. Для пространственно-однородной баллистической агрегации также подтвержден факт того, что распределение скоростей слабо отличается от распределения Максвелла.

- 4) Построены новые эффективные алгоритмы решения уравнений Смолуховского и проведения Монте-Карло моделирования. Благодаря использованию малоранговой аппроксимации удастся получить ускорение в десятки раз по сравнению с классическими методами. Также показано, что решения, полученные новыми методами, согласуются с предсказаниями разработанной для температурно-зависимой агрегации теории масштабирования.

Практическая значимость диссертационного исследования.

Практическая значимость результатов заключается в возможности их применения для моделирования процессов с различного рода пространственными неоднородностями. К таким процессам, в частности, относится распространение загрязнений, агрегация сажи при извержении вулканов, распространение частиц аэрозолей, формирование дождевых капель и формирование протопланет. Во всех этих случаях применяется баллистическая модель агрегации, и во всех этих случаях присутствуют существенные неоднородности концентраций, потоков и температур в пространстве. Таким образом, новые модели крайне востребованы во многих областях науки и индустрии.

Обоснованность и достоверность научных положений и выводов подтверждается сравнением теоретических предсказаний с численными решениями и результатами моделирования Монте-Карло. Обоснованность также подтверждается апробацией результатов на международных конференциях и публикациями в рецензируемых научных изданиях.

Замечания. По содержанию диссертационного исследования следует отметить следующие замечания:

- 1) Работа посвящена исследованию больших систем частиц, взаимодействующих упругим и неупругим образом. Первым этапом математической формализации таких моделей является вероятностный подход, точнее, построение систем стохастических дифференциальных уравнений для случайных траекторий в фазовом пространстве, численное решение которых называется стохастическим методом частиц, или методом Монте - Карло. Случайные процессы генерируют плотности распределения, которые удовлетворяют кинетическим уравнениям, неслучайным представителем которых является уравнение Больцмана. Это - лагранжев подход. Людвиг Больцман получал свои уравнения из соображений баланса функции распределения в фазовом пространстве (эйлеров подход), а исходные представления о вероятностной природе происходящего проявлялись только в виде гипотезы о молекулярном хаосе, или предположении независимости распределений. Так как вывод основных результатов диссертации основан на уравнениях Больцмана, было бы полезно сослаться на результаты, подтверждающие их применимость. Кроме того, традиционные методы редукции микроскопических моделей в больцмановском представлении к макроскопическим опираются на квазиравновесные разложения функции распределения и феноменологическом введении вида тензора вязких напряжений, что диссонирует с существенно неравновесным характером рассматриваемых явлений.
- 2) Приводится много результатов различных вычислительных экспериментов, носящих качественно – тестовый характер. Понятно, что сравнение с натурными экспериментами затруднено в силу скудности таковых, но будем надеяться, что большая проделанная работа выльется в технологически значимую практическую реализацию.

- 3) Автором уделяется, на мой взгляд, слишком много внимания эвристической теории масштабирования для агрегации. Она существенно отличается от теории спонтанной фрагментации Колмогорова. Это отличие можно было бы подчеркнуть, особенно на фоне того, что многие авторы в своих работах ошибочно используют логнормальное распределение в системах с агрегацией частиц.
- 4) Предложенный автором полезный код Wolfram Mathematica способен вывести интегралы только для случая, когда тензор давления слабо отличается от единичного, то есть, когда разница может быть приближена с помощью учета вязкости. С другой стороны, в примере из Главы 3.3 с вертикальным падением оказывается необходимым использовать модель, где горизонтальные компоненты тензора давлений близки к нулю. Таким образом, полезно уточнить, что он не может быть получен из общей модели, и должен рассматриваться отдельно. Отсюда же сразу возникает вопрос, является ли введение вязкости достаточным для описания отличий от полностью симметричного тензора давлений, который целиком задается температурами.
- 5) Текст работы достаточно хорошо написан и вычитан, хотя некоторые опечатки ещё остались. Особенно бросается в глаза отсутствие шага по времени в описании метода предиктор – корректор численного решения систем ОДУ. Да и хотелось бы понять правомерность его использования с точки зрения жёсткости этих систем.

Общая оценка работы.

Стоит отметить, что вышеуказанные недостатки не снижают общей положительной оценки работы в целом и не уменьшают ценности основных теоретических и практических результатов исследования. Подкупает широта охвата вопросов, возникающих при исследовании рассматриваемых задач, большое количество материала как теоретического, включая справочник по тестовым решениям, так и программного, разнообразный вычислительный арсенал, которым владеет автор. Работа выполнена на высоком уровне, а соискатель имеет достаточный объем публикаций в ведущих научно-технических журналах. Её результаты применимы при исследовании широкого спектра агрегационных процессов, а предложенные алгоритмы позволяют существенно ускорить моделирование гранулярных газов в целом.

Диссертационное исследование на тему «Кинетика агрегации и фрагментации в неоднородных системах» полностью соответствует специальности 1.2.2 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ и является завершённой научно-квалификационной работой, в которой решена проблема построения модели агрегации и фрагментации в неоднородных системах.

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

Автореферат полностью отражает содержание диссертации в плане её основных результатов.

Считаю, что диссертация отвечает всем квалификационным требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, установленным «Положения о присуждении ученых степеней», а ее автор, Осинский Александр Игоревич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по

специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент, доктор физико-математических наук (специальность 05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ), профессор Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова».

Богомолов

Сергей Владимирович

« 11 » сентября 2022 г.

Собственноручную подпись Богомолова Сергея Владимировича удостоверяю



Подпись удостоверяю
Ведущий специалист по кадрам

Т.Г. Коваленко

« 12 » сентября 2022 г.