ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора физико-математических наук, Сабельфельда Карла Карловича 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. Диссертационная работа Осинского Александра Игоревича посвящена разработке модели баллистической агрегации в неоднородных системах и алгоритмов численного моделирования таких процессов. В качестве описания процессов агрегации выбраны уравнения коагуляции Смолуховского. Для исследования практически важных процессов агрегации и фрагментации важно исследовать влияние пространственных неоднородностей, но простое добавление соответствующих слагаемых в уравнение Смолуховского не описывает корректно процессы агрегации и фрагментации. Очевидно, вклад пространственных неоднородностей невозможно не учитывать в таких процессах, например, как распространение аэрозольных частиц в турбулентных слоях атмосферы, нуклеация и рост частиц в неоднородных химических реакциях, формирование островковых полупроводниковых структур в процессах молекулярной эпитаксии, а также при агрегации и фрагментации капель дождя. Таким образом, задача вывода обобщенных уравнений Смолуховского, позволяющих корректно описывать и моделировать процессы агрегации и фрагментации с учетом изменения скоростей потоков и температур в данных процессах является чрезвычайно актуальной задачей. Не менее важной проблемой является разработка эффективных методов численного решения обобщенных уравнений агрегации и фрагментации. Классические уравнения Смолуховского представляют из себя бесконечную систему дифференциальных уравнений, что уже крайне затрудняет ее решение. В общем случае, когда температура системы может меняться, решение еще более затрудняется тем, что коэффициенты частот агрегации могут зависеть как от времени, так и пространства. Существует два основных способа численного решения уравнений Смолуховского: (1) прямым решением системы дифференциальных уравнений одним из классических детерминированных методов, (2) стохастическое моделирование процессов с помощью метода Монте-Карло. В силу того, что численное моделирование обобщенных процессов агрегации и фрагментации чрезвычайно трудоемко, то важной является задача поиска методов ускорения алгоритмов моделирования. Таким образом, актуальность представленной работы не вызывает сомнений.

Структура и содержание работы.

Диссертационное исследование состоит из введения, основной части из пяти глав, заключения и пяти приложений.

Введение дает общую характеристику диссертационной работы. В нем обоснована актуальность исследования, подробно определена исследуемая проблема. Изложены цели и задачи диссертационной работы, описано текущее состояние исследований в части обшей постановки и методов, указаны основные результаты, выносимые на защиту. В конце Введения представлены научная новизна и практическая значимость полученных результатов, а также уровень достоверности и апробация результатов, заключающаяся в публикациях в ведущих научных журналах и выступлениях на международных конференциях.

В первой главе проводится анализ литературных источников по теме исследования. Систематизирован материал, посвященный аналитическим и численным методам анализа решений классических уравнений Смолуховского, описаны способы учета пространственных неоднородностей путем модификации функции распределения скоростей методами Грэда и Чепмена-Энскога. Подробно выведены два основных типа ядер, описывающих частоту агрегации: в случае диффузии и в случае баллистических траекторий. Перечислены общие результаты моделирования фрагментации в результате столкновений.

Во второй главе дается описание вывода обобщенных уравнений Смолуховского для однородных систем. В первом разделе описан вывод температурно-зависимых уравнений Смолуховского, та же методология используется позже и для вывода остальных моделей. Отдельно исследуется распределение температур в неагрегирующих гранулярных газах, как частного случая температурно-зависимых уравнений Смолуховского с нулевой вероятностью агрегации. Исследуется влияние тройных столкновений путем учета времен попарных столкновений. Наконец, диссертант выводит и подтверждает прямым моделированием Монте-Карло вид распределения скоростей кластеров различного размера в баллистически агрегирующих системах.

В третьей главе представлен вывод аналогов классических уравнений Смолуховского для пространственно-неоднородных систем – уравнений Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса. В них, в дополнение к уравнениям для концентраций, автор строит системы дифференциальных уравнений, описывающих эволюцию потоков и температур кластеров различного размера, а также (в случае уравнений Смолуховского-Навье-Стокса) эволюцию коэффициентов вязкости и теплопроводности. Большая часть вывода проведена автором с помощью языка Wolfram Mathematica, однако в данной главе также приведен пошаговый пример вывода одного из ядер агрегации, используемого в новых уравнениях. Диссертант также приводит простой пример системы с наличием неоднородности вдоль вертикального направления в результате влияния силы тяжести. Кроме того, выводится вид слагаемых, отвечающих за влияние окружающего молекулярного газа на параметры гранулярного газа. Для систем с и без слагаемых, отвечающих за молекулярный газ, изучается эволюция коэффициента вязкости в уравнениях Смолуховского-Навье-Стокса.

Четвертая глава посвящена результатам моделирования фрагментации методами молекулярной динамики. Приводится сравнение вида распределений осколков и их кинетических энергий для четырех потенциалов взаимодействия, включающих потенциалы Леннарда-Джонса, Терсоффа, а также макроскопическую модель Джонсона-Кендалла-Робертса. На основе результатов моделирования сформулировано несколько гипотез об общем виде данных распределений, а также числа мономеров среди осколков в зависимости от скорости столкновения. Предложен способ использования результатов моделирования в уравнениях Смолуховского. Отдельный раздел посвящен описанию возможных результатов столкновения, в зависимости от соотношения кинетической и потенциальной энергии для сталкиваемых кластеров. Результаты моделирования используются для включения новых слагаемых в уравнения Смолуховского, описывающих фрагментацию. Рассматривается также возможность представления ядер фрагментации в малоранговом формате для ускорения решения полученных уравнений.

В пятой главе представлены результаты сравнения методов Монте-Карло, решения дифференциальных уравнений типа Смолуховского, и предсказаний теории масштабирования. В первом разделе строится малоранговый метод Монте-Карло, включая его вариации для классических уравнений Смолуховского, температурно-зависимых уравнений, и для уравнений Больцмана (прямое Монте-Карло моделирование). Здесь автор утверждает, что во всех рассмотренных им случаях новый метод показывает преимущество по сравнению с "обратным" методом и простейшим методом исключения при выборе пар сталкивающихся частиц. Во втором разделе автор обобщает малоранговый метод решения дифференциальных уравнений на температурно-зависимые уравнения Смолуховского, показывает, как можно успешно применять адаптивный шаг по времени и использовать аппроксимацию хвоста распределения концентраций кластеров. В последнем разделе приводится подробный теоретический анализ возможных вариантов эволюции температур при баллистической агрегации, который подтверждается результатами Монте-Карло моделирования. Результаты решения дифференциальных уравнений Смолуховского также совпадают с предсказаниями теории масштабирования. В заключении автор кратко повторяет основные результаты диссертационной работы, отмечает возможные пути применения и дальнейшего развития полученных результатов.

Новизна. Научная новизна диссертационной работы заключается в следующих основных результатах:

1) Построена модель агрегации и фрагментации для неоднородных систем баллистически движущихся частиц. Новые системы уравнений были явно выведены на основе уравнений Больцмана, и образуют системы уравнений Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса, аналогичные классическим уравнениям Смолуховского, но также описывающие изменение скоростей потока и кинетических энергий для каждого размера частиц.
2) Выведены оценки вида функции распределения скоростей при баллистической агрегации. Показано, что она слабо отличается от распределения Максвелла, а само отличие можно успешно приближать рядом из полиномов Сонина.
3) Получены новые результаты моделирования фрагментации. Выдвинуты гипотезы об экспоненциальном убывании числа осколков большого размера с увеличением скорости столкновения, а также полиномиального распределения величин осколков и их кинетических энергий в зависимости от массы.
4) Построены новые эффективные алгоритмы решения уравнений Смолуховского путем модификации методов Монте-Карло моделирования. Малоранговые методы для классических уравнений Смолуховского обобщены на случай ядер агрегации, зависящих от времени. Показано, как можно дополнительно ускорить процесс решения путем использования адаптивного шага по времени и аппроксимации хвоста распределения концентраций.
5) Полностью изучены все возможные виды поведения решений температурно-зависимых уравнений Смолуховского. Построена теория масштабирования для

температурно-зависимых уравнений. Построена фазовая диаграмма, описывающая поведение решений на малых и больших временах.

Практическая и научная ценность. Результаты диссертации имеют как научную, так и практическую ценность, в ней предложен целый ряд новых моделей, в особенности это касается построения обобщенных уравнений Смолуховского с учетом перераспределения скоростей сталкивающихся частиц, а также возможностей существенного улучшения и ускорения моделей баллистической агрегации в неоднородных системах. Это открывает новые возможности для построения методов эффективного решения уравнения Смолуховского, описывающего баллистическую агрегацию в метеорологии при моделировании формирования дождевых капель, а также в моделях формирования, укрупнения и распространения твердых частиц загрязнений в атмосфере. Этот круг приложений может быть значительно расширен, в частности, можно упомянуть проблемы нуклеации и роста островковых структур при эпитаксиальном процессе формирования полупроводниковых пленок, использование уравнений Смолуховского с баллистической агрегацией и фрагментацией в моделях формирования протопланет, где также присутствуют существенные неоднородности распределения температур и скоростей потоков частиц пыли в пространстве.

Обоснованность и достоверность научных положений и выводов подтверждается согласием теоретических результатов с численными решениями, а также результатами сравнительного Монте-Карло моделирования. Кроме того, обоснованность подтверждается представлением результатов на международных конференциях и публикацией в ведущих научных изданиях.

Оценка изложения материалов диссертации и автореферата. Материал, изложенный в диссертации, понятен, логичен, хорошо структурирован. Проведенные исследования можно считать завершенными, результаты, полученные в диссертации, являются новыми. Основное содержание диссертации, теоретические выводы, а также предложенные алгоритмы в достаточной мере и полноте доложены на международных конференциях. Результаты также опубликованы в 6 научных статьях, все из которых напечатаны в изданиях, входящих в квартиль Q1 в международной системе цитирования Scopus. Автореферат полностью соответствует содержанию работы.

По тексту диссертации имеется рад замечаний.

1. Общее замечание касается охвата круга задач, над которыми диссертантом велись исследования. С одной стороны, рассмотрены самые различные аспекты проблемы, и широта исследований впечатляет. С другой стороны, при таком большом множестве постановок задач неизбежно появляются поверхностные суждения по отдельным вопросам этих исследований. В качестве примера отметим несколько замечаний диссертанта, касающихся методов моделирования процессов коагуляции методом Монте-Карло, поскольку этот метод существенно используется им как в сравнительных расчетах, так и при разработке улучшения алгоритмов стохастического моделирования. Автор опирается, и приводит ссылки, на совсем небольшое число работ по методам Монте-Карло, в которых представлены методы, далекие от оптимальных методов. Отметим хорошо известный метод Нанбу (Nanbu), который позволяет при выборе столкновений делать достаточно большие шаги по времени. Этот метод, однако, диссертантом не отмечен и не цитируется. Далее, один из наиболее оптимальных методов решения уравнения Смолуховского методом

Монте-Карло, где используется известный метод Волкера с применением стратифицированного метода исключения, опубликован в статье K. Sabelfeld, A. Levyskin, T. Privalova. A fast stratified sampling simulation of coagulation processes, *Monte Carlo Methods Appl., 13 (2007), 71--88.* Заметим, также, что строгое обоснование весового алгоритма и условие молекулярного хаоса дано в работе Sabelfeld K., Rogasinsky S., Kolodko A., Levykin A. Stochastic algorithms for solving Smolouchovsky coagulation equation and applications to aerosol growth simulation. Monte Carlo Methods and Applications (1996), 2, No 1, 41-87. Эти и многие другие работы по методу Монте-Карло, в частности, работы В. Вагнера (W. Wagner) и работы Гуйаса (Flavius Guias) по методам решения уравнения неоднородного уравнения Смолуховского и уравнения Больцмана диссертанту, по-видимому, не известны, насколько можно судить из списка цитированной литературы. Еще один из примеров с отсутствием должного цитирования: в тексте диссертации несколько раз упоминается агрегация полимеров, как пример применения уравнений Смолуховского, однако на этот пример дается лишь одна ссылка во введении. Если он, действительно, важен, стоит указать больше источников.

2. Модель температурно-зависимых уравнений Смолуховского использует критерий столкновений из работы Brilliantov, Formella, Poschel (2018). Несмотря на то, что существуют подтверждения работоспособности данной модели методами молекулярной динамики в Spahn et. al. (2004), её теоретическое обоснование все еще вызывает вопросы. Например, форма кластера после столкновения точно не будет сферической в случае, когда относительная скорость столкновения достаточно мала.

3. Хотя численные решения приводятся для почти всех видов обобщенных уравнений Смолуховского, вопрос об их применимости в общем случае остается открытым. В частности, более сложные ядра агрегации, присутствующие в уравнениях Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса, могут не быть малоранговыми. Предложенные методы Монте-Карло напрямую не требуют существования малорангового разложения, однако предложенные методы решения дифференциальных уравнений могут потерять свою эффективность при решении с помощью предложенных методов более сложных задач.

4. Отметим, что границы применимости разработанных диссертантом методов недостаточно четко описаны, это следовало бы проделать для каждого из описанных алгоритмов.

Общая оценка работы. Отмеченные недостатки не снижают общей высокой оценки работы в целом, а соискатель имеет достаточный объем публикаций в ведущих научных журналах. Работа выполнена на высоком теоретическом уровне и представляет значительный интерес для специалистов в области численного моделирования процессов агрегации-фрагментации и кинетической теории газов. Диссертационная работа автора «Кинетика агрегации и фрагментации в неоднородных системах» полностью соответствует специальности 1.2.2 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ и является завершенной научно-квалификационной работой, в которой предложены новые модели агрегации и фрагментации в неоднородных системах.

Считаю, что диссертация отвечает всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 1.2.2 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, а ее автор, Осинский Александр Игоревич, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Официальный оппонент:

Главный научный сотрудник лаборатории Стохастических задач ИВМ и МГ СО РАН, д.ф.-м.н. по специальности 01.01.07 – Вычислительная математика,

профессор Сабельфельд К.К.

«25» августа 2022 г.

Подпись д.ф.-м.н. Сабельфельда К.К. заверяю

Ученый секретарь ИВМиМГ СО РАН, к.ф.-м.н. Вшивкова Л.В.

«26» августа 2022 г.

Сабельфельд Карл Карлович

Главный научный сотрудник лаборатории Стохастических задач, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук (ИВМ и МГ СО РАН),

Адрес: 630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 6.

Телефон: (383) 330-77-21

E-mail: karl@osmf.sscc.ru