

Prof. Nikolai Brilliantov
CDISE CREI Director
Skoltech, Moscow, Russia
e-mail: n.brilliantov@skoltech.ru
tel: +7 916 1828 725
<https://faculty.skoltech.ru/people/nikolaybrilliantov>

11. 04.2022

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на диссертацию Осинского Александра Игоревича на тему:

«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»

Осинский Александр Игоревич окончил с отличием бакалавриат и магистратуру Московского Физико-Технического Института и обучался в очной аспирантуре Сколковского института науки и технологий в 2018-2022 годах по специальности 05.13.18 математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Александр приступил к работе над диссертацией уже будучи сложившимся специалистом в области прикладной математики, с прекрасными навыками практического программирования и достаточно быстро освоил новую для себя область, связанную с теорией кинетических уравнений. Особенностью диссертационной работы А. И. Осинского является сочетание фундаментальных проблем, отвечающих основам неравновесной статистической механики и прикладных задач широкого спектра практического применения. Все исследовательские цели, изложенные ниже, были Александром достигнуты.

Диссертация А. И. Осинского посвящена обобщению классических кинетических уравнений Смолуховского, описывающих процессы агрегации и фрагментации на случай пространственно-неоднородных систем и построение эффективных численных методов их решения. Актуальность темы определяется тем хотя агрегация и фрагментация — это весьма важные природные процессы, широко используемые и в промышленном производстве, строго обоснованных подходов для моделирования таких процессов в неоднородных системах до настоящего времени не существовало. В работе А. И. Осинского был проведен строгий вывод обобщенных уравнений Смолуховского, которые следует называть уравнениями Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса. Уравнения Смолуховского-Эйлера отвечают приближению идеального флюида (уравнениям Эйлера для нереагирующих систем) а уравнения Смолуховского-Навье-Стокса – флюидам с диссипацией (уравнениям Смолуховского-Навье-Стокса для нереагирующих систем). Вывод указанных уравнений был проведен из первых принципов, на основе кинетического уравнения Больцмана. Это позволило получить микроскопические выражения для кинетических коэффициентов, описывающих скорости реакции для уравнений Смолуховского-Эйлера, которые

учитывают пространственную неоднородность гидродинамических полей – плотности, скорости потоков и температуры. Более того, для уравнений Смолуховского-Навье-Стокса, помимо кинетических коэффициентов реакций, были выведены микроскопические соотношения для транспортных коэффициентов – коэффициентов теплопроводности и вязкости. Последние имели форму системы связанных уравнений; для иллюстрации эти уравнения были решены для случая простого сдвигового течения. При выводе уравнений Смолуховского-Навье-Стокса диссертант использовал два основных метода кинетической теории – метод Чепмана-Энскога и метод Грэда. Разработка применения указанных методов к системам с агрегацией частиц является важным вкладом в развитие базовых подходов неравновесной статистической механики. Другим важным фундаментальным результатом является строгий вывод обобщенного уравнения Смолуховского с учетом трехчастичных реакций агрегации. Автором была показана неполнота известных уравнений такого рода и приведен вывод недостающих членов уравнений. Кроме упомянутых выше фундаментальных результатов, хотелось бы отметить, что диссертант исследовал изменение функции распределения по скоростям частиц в агрегирующих системах, также спектр размеров и скоростей осколков, получающихся при ударной фрагментации частиц. Им было показано, что распределение скоростей частиц близко к максвелловскому и предложено количественное описание отклонения распределения скоростей от максвелловского, с помощью разложения по ортогональным полиномам Сонина. При изучении ударной фрагментации методом молекулярной динамики, автором диссертации были установлены скейлинговые соотношения для спектра скоростей и размеров фрагментов. Также была предложена модификация кинетического уравнения Больцмана на основе микроскопической модели, описывающей фрагментацию частиц. Наконец, хотелось бы отменить еще один важный результат – получены скейлинговые решения температурно-зависимых уравнений Больцмана, а также целый ряд точных решений для модельных кинетических коэффициентов.

Несмотря на важность для математического моделирования пространственно-неоднородных систем с агрегацией и фрагментацией полученных фундаментальных результатов, для практического использования соответствующих уравнений необходимы эффективные численные методы. Следует отметить, что до настоящего времени, методов, позволяющих решать большие системы обобщенных уравнений Смолуховского, с приемлемой точностью и с приемлемыми затратами времени не было. Для их решения А. И. Осинский разработал новые численные методы, основанные на малоранговом разложении матриц кинетических коэффициентов в уравнениях Смолуховского. Методы основаны на идее точного (или приближающего с необходимой точностью) представления исходной кинетической матрицы в виде суммы матриц диадной структуры. Последние позволяют проводить матричные вычисления с повышенной скоростью. Ранее, подобный подход использовался для решения классических уравнений Смолуховского. В диссертации было проведено дальнейшее развитие метода малорангового разложения кинетических матриц для решения больших систем уравнений, отвечающих обобщенным уравнениям Смолуховского. Далее, малоранговый подход также развивался в применения к методам Монте Карло, как для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений, соответствующих среднеполевому описанию эволюции системы, так и для прямого численного решения уравнений Больцмана с агрегацией. Разработанные диссертантом методы позволили ускорить численное исследование рассматриваемых систем в десятки раз, без потери точности вычислений.

Обучение в аспирантуре А. И. Осинский успешно сочетал с исследовательской деятельностью, выполняя работу по грантам РФФИ 20-31-90022 («Разработка эффективных солверов для решения обобщенных уравнений Смолуховского») и РНФ 21-11-00363 («Разработка модели для прогнозирования атмосферного загрязнения частицами твердой фазы с применением искусственного интеллекта»), причем грант РФФИ 20-31-90022 был выигран им, как персональный грант на поддержку ведущий молодых ученых. В качестве ассистента лектора, Александр

разработал серию лекций по теме быстрых малоранговых методов решения больших систем дифференциальных уравнений, которые прочел в весенном семестре 2021 и 2022 в Сколтехе.

В ходе работы над диссертацией Осинский А. И. показал себя как высококвалифицированный специалист в области математического моделирования, обладающим глубоким знанием базовых принципов и умеющим применить их как при разработке теоретического обоснования моделей, так и при практическом построении эффективных вычислительных алгоритмов. Эти качества позволили ему самостоятельно получить основные результаты диссертации, которые являются существенным вкладом в указанную научную область. В частности, одна из статей диссертанта опубликована им без соавторов, что подтверждает, что Осинский А. И. является сложившимся ученым, способным проводить оригинальные научные исследования.

Основные результаты диссертации докладывались на двух конференциях: 33-м симпозиуме имени М. Смолуховского в Праге, а также на 5-й международной конференции по матричным методам в математике и их приложениям в Институте Вычислительной Математики и Сколтехе. Основные результаты диссертации также опубликованы в пяти журнальных статьях; все научные журналы имеют рейтинг Q1.

Исходя из вышеизложенного считаю, что диссертация Осинского А. И. удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор – Осинский Александр Игоревич – заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Научный руководитель,
доктор физико-математических наук,
профессор Н. В. Бриллиантов

Подпись Бриллианта Н. В. подтверждена.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОТДЕЛА
КАДРОВОГО АДМИНИСТРИРОВАНИЯ

