

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета на диссертацию Быкова Николая Юрьевича на тему: «Моделирование процессов образования и роста кластеров в разреженных струйных течениях», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 –механика жидкости, газа и плазмы.

Диссертация посвящена решению актуальной проблемы – разработке моделей образования и роста кластеров и ее реализации при использовании метода прямого численного моделирования разреженных струйных течений.

Актуальность темы подробно обоснована во введении диссертации, где дается характеристика современного состояния проблемы и перечислены задачи физической механики, при решении которых необходим учет создания кластеров и влияния кластерных явлений на параметры течений. К ним относятся процессы в атмосферах планет и комет, в струях двигателей космических аппаратов, в технологических установках, явления конденсации и лазерной абляции.

Диссертация содержит введение, шесть глав, заключение и список литературы, включающий 266 наименований. Изложение результатов хорошо структурировано, что значительно облегчает его восприятие. Текст работы представлен на русском и английском языке.

Во введении сформулирована цель диссертации, перечислены задачи, решение которых необходимо для достижения поставленной цели, обоснована новизна представляемых результатов и их практическая ценность.

В первой главе представлен краткий обзор методов описания течений газов с физико-химическими превращениями в условиях сплошной среды и в разреженных газах. Подробно рассмотрен метод прямого статистического моделирования (ПСМ) процессов конденсации в струйных течениях и сформулированы требования, которым должна удовлетворять модель образования и роста кластеров, для возможности ее использования в численных расчетах в рамках этого метода.

Вторая глава имеет важное теоретическое значение в диссертации и посвящена описанию моделей кинетики химических реакций, определяющих процессы образования и распада кластеров, которые в дальнейшем используются в расчетах с применением метода ПСМ. Кластерообразование рассматривается как каскад химических реакций, а вероятности образования и распада кластеров выражаются через коэффициенты скорости соответствующих химических реакций, что позволяет использовать в расчетах накопленный в литературе материал по определению коэффициентов скорости реакций в разных условиях. Рассмотрены два подхода при описании реакций - кинетический и макроскопический. Отмечается, что в первом случае вероятность прохождения реакций определяется для каждого акта столкновения частиц, зависит от их индивидуальных свойств и для ее определения могут быть использованы модели поуровневой колебательной и химической кинетики. При макроскопическом описании используются Аррениусовские температурные зависимости скорости реакций.

На основе кинетической теории в рамках модели полной энергии столкновения (Bird, 1981) получены выражения для вероятностей ассоциации и распада мономера и кластера и соответствующие формулы для констант скорости этих процессов. Приведена формула для константы скорости испарения мономера из кластера, совпадающая с записью закона Герца-Кнудсена при определенных условиях. Предложены модели конденсации, обсуждается их имплементация в алгоритмы ПСМ. Также рассмотрены модели процессов

б/у 09/2-1 от 09.01.09

образования наноразмерных кластеров и приведены формулы для констант скорости этих процессов, входящих в уравнения кинетики.

В той же главе дано детальное теоретическое описание процессов образования и распада кластеров. Рассмотрены столкновительный распад димера, трехчастичная рекомбинация мономеров, образование димера при бинарном столкновении молекулярных мономеров, мономолекулярный распад димера. Во всех этих случаях выведены формулы для расчета констант химических реакций, входящих в уравнения кинетики. В последнем пункте второй главы указывается, что все рассмотренные в этой главе процессы составляют основу кинетической модели для метода ПСМ. Там же перечислены основные допущения, сделанные при построении модели, используемой в расчетах на основе метода ПСМ.

Результаты приложений представленных моделей в расчетах процессов кластерообразования в разных средах обсуждаются в третьей, четвертой и пятой главах.

В третьей главе рассмотрены одномерные и осесимметричные течения паров воды от сферической поверхности и из источника в вакуум. Установлены закономерности образования и роста кластеров в расширяющейся струе, показано влияние процесса конденсации на параметры течения. Интересным и полезным является сравнение результатов с имеющимися в литературе данными, полученными в экспериментах и на основе разных методов теоретического исследования, а также анализ влияния разреженности струи на газодинамику течения. В частности, отмечается переход энергии связи в энергию внутренних степеней свободы кластера.

Четвертая глава посвящена моделированию стационарного истечения паров меди в вакуум. В данном случае рассмотренная ранее однотемпературная кинетическая модель уточняется и вводятся разные температуры поступательных и вращательных степеней свободы кластера. Важным представляется анализ влияния процесса образования кластеров и моделей кластерообразования на газодинамические параметры течения, а также проведенный анализ законов подобия на основе данных, приведенных в диссертации и в работах других авторов.

В пятой главе обсуждается применение модели образования кластеров в расчетах течений смеси пара металла и несущего газа. Интересным является проведенный автором анализ характерных режимов формирования кластеров в струе смеси Ag-He, истекающей в вакуум. Показано, что степень разреженности потока играет в этом случае важную роль.

В шестой главе автором предлагается модель расчета течений, возникающих в результате лазерной абляции материалов под действием наносекундных импульсов лазерного излучения умеренной интенсивности. Обнаружен важный эффект неравновесности течения в разреженных режимах: показано различие температур поступательных и внутренних степеней свободы кластеров и температуры мономеров. Степень неравновесности возрастает с увеличением разреженности потока.

В заключении приведены основные выводы из проведенного исследования.

Диссертация хорошо написана, четко выделены главные новые результаты и выводы.

К недостаткам работы можно отнести некоторые технические погрешности в формулировках. Например, нельзя считать удачными выражения: «внутренняя температура кластера», «макроскопическая температура», «моделирующие атомы», «поступательная неравновесность», «нестационарное уравнение» (нестационарным может быть процесс, а не уравнение), имеется небольшое число опечаток (см. например стр. 20, 52). Не ясен смысл фразы «Модель не требует вычисления температуры газа в ячейке». Также не вполне ясно, почему всюду при записи уравнений кинетики (например, 2.64-2.65; 2.88-2.89; 2.99-2.101) включены только прямые процессы, хотя в теоретической части сказано, что вероятности прямых и обратных реакций связаны законом

действующих масс. Указанные мелкие недочеты не снижают высокой оценки работы и ее научной значимости.

Оценивая диссертацию в целом, можно утверждать, что она вносит серьезный вклад в развитие важного научного направления, связанного с теоретическим и численным исследованием разреженных струйных течений с образованием наноразмерных кластеров. Важно отметить, что в диссертации построены не только новые обоснованные модели описания течений смесей с кластерообразованием, но и для каждой модели разработаны численные алгоритмы для ее реализации в практических расчетах методом ПСМ. После этого приводятся результаты решения современных задач физической аэромеханики на основе предложенных моделей и построенных численных алгоритмов. Обоснованность приведенных в диссертации результатов подтверждается сравнениями с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

На основании сказанного можно утверждать следующее.

Диссертация Быкова Николая Юрьевича на тему: «Моделирование процессов образования и роста кластеров в разреженных струйных течениях» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 № 6821/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Быков Николай Юрьевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 –механика жидкости, газа и плазмы. Пункт 11 указанного Порядка диссертантом не нарушен.

Член диссертационного совета
Доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры гидроаэромеханики СПбГУ

Нагнибеда Екатерина Алексеевна

29 декабря 2018 года