

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета на диссертацию Гориховского Вячеслава Игоревича на тему «Эффективные вычислительные подходы к моделированию кинетики углекислого газа», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы

Работа посвящена моделированию неравновесной колебательной кинетики углекислого газа с учетом сложных механизмов релаксации и межмодовых обменов энергией. Изучены возможности применения параллельного программирования и методов машинного обучения для повышения производительности численного моделирования неравновесных течений углекислого газа (CO_2). В диссертации рассмотрены различные стратегии повышения эффективности полной поуровневой и гибридной четырехтемпературной модели кинетики CO_2 .

Актуальность темы обусловлена потребностями построения эффективных алгоритмов для численного моделирования сложной колебательной кинетики в течениях углекислого газа, необходимостью разработки сокращенных моделей и эффективных численных методов. Исследование неравновесной кинетики углекислого газа необходимо для моделирования входа спускаемых аппаратов в атмосферы Марса и Венеры, для разработки методов снижения концентрации продуктов техногенной деятельности человека в атмосфере Земли, в химии низкотемпературной плазмы и лазерных технологиях. Детальное поуровневое моделирование, основанное на решении жестких дифференциальных уравнений для каждого состояния, необычайно требовательно к вычислительным ресурсам. Следовательно, возникает необходимость разработки сокращенных моделей и эффективных численных методов.

Основные результаты.

В первой главе подробно описаны основные свойства молекулы углекислого газа и наиболее вероятные каналы колебательной релаксации. Обсуждаются полная и сокращенные поуровневые модели, гибридная четырехтемпературная модель для описания неравновесных течений CO_2 . Описываются и сравниваются как теоретические, так эмпирические способы вычисления коэффициентов скорости переходов энергии. Предложена эффективная параллельная структура данных, позволяющая повысить эффективность вычисления полного набора коэффициентов скорости переходов энергии и скоростей релаксации. В диссертации предложен подход к аппроксимации с помощью регрессионного анализа значений коэффициентов, найденных с помощью формул SSH-

теории. Проведены численные эксперименты, подтверждающие корректности и эффективность такого подхода.

Во второй главе ставится задача пространственно-однородного моделирования кинетики углекислого газа в полном поуровневом и гибридном многотемпературном приближении. Для решения системы, используются явные методы, основанные на методе Гира. Метод Гира очень точен, но требует решения большой системы линейных алгебраических уравнений, что приводит к высокому потреблению памяти при расчетах. Точностью и стабильностью. В работе В.И. Гориховского проведены численные эксперименты по моделированию пространственно-однородной кинетики углекислого газа расширенным методом Гира, использующим предсказания значения в последующие моменты времени для решения сложных задач. Оценивается эффективность оптимизации численных методов, основанной на нейросетевом подходе вычисления релаксационных членов. Анализируется точность и эффективность различных подходов, даны рекомендации по выбору численной схемы.

Третья глава посвящена решению одномерной задачи о течении углекислого газа за плоской ударной волной. Анализируются особенности и сложности реализации численных схем. Проведено численное моделирование течений за ударными волнами при различных условиях. Сравняется точность и эффективность различных подходов и даются рекомендации по выбору численной схемы.

Результаты, полученные в главах 1-3, являются **новыми**. В третьей главе впервые проведено моделирование кинетики CO_2 за фронтом ударной волны в полном поуровневом приближении. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, не вызывает сомнений.

Достоверность результатов, представленных в диссертации, обусловлена использованием строгих методов кинетической теории, применением обоснованных оптимизаций расчетов, а также верификацией путём сравнения с работами других авторов и систематическими оценками погрешностей аппроксимационных формул и результатов, полученных в рамках нейросетевого подхода.

Теоретическая значимость диссертационного исследования заключается в эффективных алгоритмах, впервые позволивших провести моделирование неравновесной кинетики углекислого газа за фронтом плоской ударной волны в полном поуровневом и гибридном многотемпературном приближениях.

Практическая ценность результатов состоит в достижении значимого повышения эффективности расчётов при численном моделировании задач газовой динамики;

разработке рекомендаций по выбору числен схемы и алгоритмов расчета, а также разработке кода для численного моделирования.

По содержанию диссертации можно сделать следующие **замечания**:

1. В работе оценивается эффективность аппроксимационных формул на основе скорости вычисления одного полного набора коэффициентов скорости реакции. Возникает вопрос, насколько изменяются вычислительная сложность и время расчётов при использовании этих аппроксимаций, в сравнении с расчетами по теоретическим формулам?

2. В работе рассматриваются сильные ударные волны, порождающие физико-химические превращения в углекислом газе. В рамках классической теории совершенного газа с постоянным показателем адиабаты существуют пределы, характеризующие параметры течения за сильными ударными волнами (в частности, предел числа Маха спутного потока за ударной волной). Эти пределы изложены, в частности, в книге В.Н. Ускова «Бегущие одномерные волны» и в ряде других, вполне доступных, источников. Представляет интерес сравнение между предельными значениями в рамках модели совершенного газа и значениями, полученными в ходе расчётов в рамках представленной работы.

3. На рис. 2.6 (стр. 59) приведены значения относительной ошибки вычисления предсказанных значений релаксационных членов, которые близки к единице. Этот факт нуждается в пояснении, так как вряд ли означает ошибку вычисления, близкую к 100%. Напротив, на соседнем рис. 2.8 (стр. 63) показаны значения относительной ошибки вычисления температуры, которые близки к нулю, что не вызывает дополнительных вопросов.

4. Материал диссертационной работы ясно изложен и хорошо структурирован, но содержит довольно много небрежностей оформления: часто отсутствуют дефисы, разделяющие фамилии авторов различных формул и моделей (стр. 24, 25, 27 и далее); ссылки на формулы не берутся в скобки (стр. 33); единица измерения давления обозначается то «Па», то «Ра».

Указанные замечания не влияют на общую положительную оценку диссертации, поскольку носят либо характер замечаний, либо свидетельствуют лишь о некоторой небрежности автора. Диссертация является законченной научно-квалификационной работой, содержит новые результаты, представляющие научный и практический интерес. Работа имеет продуманную структуру, хорошо оформлена. Краткие заключения по главам облегчают восприятие материала.

Основные результаты, выносимые на защиту, опубликованы в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК и/или проиндексированных в международных базах цитирования SCOPUS и Web of Science. Работа прошла апробацию на международных конференциях и семинарах ведущих научных центров.

Диссертация Гориховского Вячеслава Игоревича на тему «Эффективные вычислительные подходы к моделированию кинетики углекислого газа», соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Гориховский Вячеслав Игоревич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не установлены.

Член диссертационного совета

доктор технических наук,

кандидат физико-математических наук, доцент,

профессор кафедры «Плазмогазодинамика и теплотехника» (А9)

ФГБОУ ВО «Балтийский государственный технический

университет «ВОЕНМЕХ» имени Д.Ф. Устинова»



М.В. Чернышов

07 декабря 2022 года

Подпись М.В. Чернышова
Личный секретарь

