

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

В диссертации обсуждаются различные подходы к моделированию неравновесной кинетики углекислого газа. Основная часть работы посвящена вопросам повышения производительности численного моделирования кинетики на основе полного поуровневого и гибридного четырехтемпературного приближений. Актуальность темы обусловлена потребностями создания программных инструментов для исследования сложной колебательной кинетики в течениях углекислого газа. Углекислый газ является основным компонентом атмосферы Марса, поэтому сведения о газодинамических процессах с учетом неравновесной кинетики CO_2 необходимы для моделирования входа космических аппаратов в атмосферу Марса. Решение задачи в полной поуровневой постановке требует как адаптации современных численных методов, так и рассмотрения подходов основанных на методах искусственного интеллекта.

Основные результаты.

В первой главе рассматриваются основные свойства молекулы углекислого газа и обсуждаются наиболее вероятные каналы колебательной релаксации. Обсуждаются модели для описания неравновесных течений CO_2 различной сложности и точности. Описываются и сравниваются различные теоретические способы вычисления коэффициентов скорости переходов энергии. Предложен метод для получения аппроксимаций коэффициентов скорости переходов и получения полного набора требуемых коэффициентов, основанный на регрессионном анализе. Рассматриваются последовательные и параллельные схемы вычисления релаксационных членов в уравнениях колебательной кинетики и анализируется их эффективность.

Во второй главе описывается моделирование кинетики пространственно-однородного углекислого газа в полном поуровневом и гибридном многотемпературном приближении. Рассматриваются численные методы решения уравнений кинетики CO_2 , основанные на расширенном методе Гира и проводится сравнение их эффективности на основе численных экспериментов. Рассматривается применимость, точность и эффективность оптимизации численных методов, основанных на нейросетевом подходе вычисления релаксационных членов.

Третья глава посвящена решению одномерной задачи о течении углекислого газа за плоской ударной волной с использованием трех подходов: полного поуровневого, гибридного многотемпературного и многотемпературного подхода, основанного на нейросетевом расчете скоростей колебательной релаксации. Анализируются особенности и сложности реализации численных схем. Проведено численное моделирование течений

за ударными волнами при различных условиях в набегающем потоке. Оценивается точность и эффективность различных подходов.

Наибольший интерес представляют подходы, основанные на использовании нейронных сетей, предложенные во второй главе и провалидированные в третьей главе на задаче моделировании кинетики углекислого газа за фронтом ударной волны. Продемонстрирована высокая точность подхода к расчету скорости релаксации в различных модах CO₂ с использованием нейронных сетей и заметное ускорение расчетов в гибридной многотемпературной модели. Ожидается, что в более сложных (многомерных) задачах и при учете химических реакций выигрыш будет еще более существенным.

Результаты, полученные в главах 1-3, являются **новыми**. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, не вызывает сомнений. **Достоверность** результатов определяется использованием строгих теоретических моделей неравновесных течений, основанных на кинетической теории газов, и хорошо апробированных численных методов решения жестких систем дифференциальных уравнений; сравнением результатов, полученных с помощью различных подходов; систематическими оценками погрешностей аппроксимационных формул и результатов, полученных в рамках нейросетевого подхода; согласием результатов моделирования кинетики углекислого газа с результатами других авторов. **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 создании методики повышения эффективности расчётов при численном моделировании нульмерных и одномерных задач газовой динамики, учитывающих сложные механизмы детальной поуровневой колебательной кинетики углекислого газа.

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

1. В пункте 1.5 проводилась аппроксимация коэффициентов скорости переходов энергии в интервале температур из интервала от 400K до 5000K, однако в пункте 2.8 эти формулы используются для температур, превышающих 5000K. При расчете скоростей релаксации рассчитанные линейные модели использовались для экстраполяции значений или были получены новые аппроксимации?

2. Во второй главе упоминается, что расчеты проводились как для полной, так и для сокращенной схем энергетических уровней, однако в описании численного моделирования рассматривается исключительно полная схема. Какова эффективность использования сокращенной схемы, и почему она не используется в дальнейшем?

3. На рис. 2.17-2.19. значения отношения числовых плотностей доходит до величин порядка 10^{-30} , что означает отсутствие в газе молекул, находящихся в таком энергетическом состоянии. Следовало бы рассматривать меньший интервал отношения числовых плотностей.

4. В списке публикаций автора нет работ описывающий применение нейросетевого подхода к моделированию неравновесной кинетики углекислого газа. Связано ли это с тем, что работы ещё не опубликованы?

Указанные замечания не снижают научной ценности работы в целом. 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 физико-математических наук,

ведущий научный сотрудник,

Федеральное государственное учреждение

"Федеральный исследовательский центр

"Информатика и управление" Российской академии наук"

Email: vladimir.titarev@frcsc.ru

В. И. С.

Титарев В.А.

Дата 02.12.2022

