


УТВЕРЖДАЮ
Проректор – начальник Управления
научной политики
МГУ имени М.В. Ломоносова
доктор физико-математических наук,
профессор





«27» 11 2024 г. А.А. Федянин

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования "Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова" о диссертационной работе Шакуровой Лии Алимджановны «Эффекты скольжения в смесях газов с поуровневой кинетикой и поверхностными реакциями» представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы.

Актуальность темы исследования. Для многих практически важных задач высокоскоростной аэродинамики, в частности, при входе космических аппаратов в плотные слои атмосферы, важно корректно учитывать физико-химические процессы, протекающие в газовой фазе в термически неравновесных условиях и гетерогенные процессы на поверхности теплозащитного покрытия аппарата. При численном моделировании данной задачи в рамках уравнений сплошной среды от граничных условий, выставляемых на поверхности тела, может существенно зависеть и тепловой поток к поверхности, и химический состав ударного слоя, что в свою очередь критически важно для проектирования тепловой защиты. Исследованию именно этой актуальной проблемы – выводу граничных условий с учетом поуровневой кинетики газофазных химических реакций и гетерогенных процессов на поверхности и посвящена диссертационная работа Шакуровой Л.А.

Диссертация соответствует **паспорту научной специальности 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы, отрасль наук – физико-математические науки:**

В части направлений исследования специальности: п.9. «Физико-химическая гидромеханика (течения с химическими реакциями, горением,

детонацией, фазовыми переходами, при наличии излучения и др.)».

Оценка содержания диссертации. Текст диссертации содержит подробное описание проводившихся теоретических, расчетных и сравнительных исследований и детальный анализ полученных результатов. Работа написана на требуемом научном уровне.

Диссертация Шакуровой Лии Алимджановны состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы, содержащего 153 источника, а также приложения, включающего публикации автора по теме диссертации и ее личный вклад в эти работы. Диссертация изложена на 131 странице и содержит 44 рисунка и 6 таблиц.

Во введении отражена структура диссертации, показана актуальность рассматриваемой темы исследований, выделены основные цели диссертационной работы, обоснована ее практическая значимость и новизна, а также представлены выносимые на защиту положения. Приведен подробный обзор научных публикаций по теме диссертации, который позволяет установить, что диссертант хорошо осведомлена о современных научных работах, проводимых в этой области.

В первой главе граничные условия скольжения для расширенной системы уравнений гидродинамики выведены в рамках детальной самосогласованной модели, учитывающей колебательно-химическую кинетику, газовую динамику и процессы переноса. Граничные условия получены с учетом поверхностных неравновесных процессов — на основе моделирования химических реакций и обменов колебательной энергией. Полученный набор граничных условий включает в себя условия для массовых потоков частиц, зависящих от заселенностей колебательных уровней и плотностей различных химических компонентов; скорость скольжения и скачок температуры. Все эти величины выражаются через поуровневые эффективные коэффициенты переноса: диффузию, термодиффузию, теплопроводность поступательных и вращательных степеней свободы, сдвиговую и объемную вязкость, а также релаксационное давление.

Во второй главе развит подход, позволяющий получить граничные условия скольжения для поуровневого набора макропараметров в приближении вязкого теплопроводного газа. Подход основан на обобщении кинетического граничного условия, позволяющего корректным образом учитывать различные неравновесные поверхностные процессы, такие как адсорбция, десорбция, гетерогенная рекомбинация и колебательное возбуждение и дезактивация. Стоит отметить, что поверхностные процессы в данном случае оказывают непосредственное влияние на граничные условия для числовых концентраций

частиц смеси. Для разных моделей ядер рассеяния (Максвелла, Черчиньяни–Ламписа) получены граничные условия скольжения и показано, что различия между ними в рамках нового подхода проявляются только в выражении скачка температуры.

В третьей главе разработанные модели граничных условий тестировались при решении модельной задачи течения в пограничном слое на линии торможения частично диссоциированного воздуха с учетом химических реакций в газе и на поверхности. Рассматривалось два набора параметров течения, отвечающих разным степеням разреженности газа на высотах 60 и 85 км. Сравнительный анализ различных моделей катализа проводился на основе сопоставления результатов численного расчета по величинам концентраций различных компонентов и температуры в пограничном слое, распределений теплового потока и колебательной энергии молекулярных компонент. Показано, что распределения концентраций частиц и заселенностей колебательных уровней существенным образом зависят от модели гетерогенной рекомбинации. Модель Барбато дает не только количественно, но качественно отличные результаты по сравнению с другими моделями. При сравнении тепловых потоков было показано, что гетерогенные процессы приводят к их увеличению, а скачок температуры обеспечивает значительное уменьшение. При этом эффект скачка температуры является доминирующим по сравнению с влиянием гетерогенных реакций. Также исследовано влияние разреженности газа, моделей скорости диффузии и коэффициента аккомодации на параметры течения воздуха в пограничном слое.

В заключении сформулированы итоги выполненного исследования.

Научная новизна работы состоит в следующем:

В диссертационной работе предложен подход к получению поуровневых граничных условий для макропараметров течений термически неравновесных газовых смесей из кинетического граничного условия. Предложено обобщение классического кинетического граничного условия для функции распределения путем включения членов, описывающих образование и потерю частиц вследствие гетерогенных процессов. Проведен анализ макроскопических моделей гетерогенных процессов и выведен общий вид выражений для массовых потоков, обеспечивающих корректную реализацию данных процессов. Оценено влияние моделей граничных условий, учитывающие некоторые процессы гетерогенного катализа на поверхности SiO_2 , и эффектов разреженности газа на параметры течения воздуха в пограничном слое.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты, полученные в диссертации, можно расценивать как квалифицированное решение научной задачи по формулировке граничных условий на поверхности в условия течения термически неравновесного многокомпонентного газа с учетом ряда гетерогенных химических реакций на поверхности. Эти условия реализованы в виде отдельного вычислительного модуля и могут быть напрямую использованы при решении прикладных задач высокоскоростной аэродинамики. Сформулирована рекомендация по необходимости учета скачка температуры при выборе моделей граничных условий.

Достоверность результатов исследования подтверждается следующим:

- при выводе граничных условий использовались строгие методы кинетической теории;
- показано, что ряд известных феноменологических и теоретических моделей могут быть выведены как частные случаи граничных условий, полученные в предложенном в диссертации обобщенном подходе;
- на примере задачи, рассматриваемой в главе 3, показано, что эффективные коэффициенты скорости гетерогенной рекомбинации, вычисленные в рамках разработанного обобщенного подхода, демонстрируют наилучшее согласие с коэффициентами, полученными на основе данных *ab-initio*.
- результаты исследований были опубликованы в ведущих научных изданиях и доложены на Российских и международных конференциях.

Апробация работы. Результаты работы были представлены в общей сложности в 12 публикациях, среди которых 4 статьи включены в базу данных WOS/Scopus, 1 статья опубликована в журнале, включенном в перечень изданий ВАК и 7 публикаций в материалах конференций, индексируемых в РИНЦ.

По содержанию диссертации можно сделать следующие замечания:

- в тексте на стр. 8 утверждается, что коэффициенты рекомбинации могут быть измерены экспериментально. Это не совсем корректно, т.к. в экспериментах на плазмотронах, как правило, измеряется тепловой поток к каталитической поверхности теплозащитного материала, и лишь потом на основе численного моделирования подгоняются эффективные коэффициенты рекомбинации.
- обобщенный коэффициент рекомбинации γ введен в тексте на стр. 28 таким образом, что имеет отрицательный знак и изменяется в диапазоне от -1 до 0, однако, в главе 3 коэффициенты γ имеют положительный знак.
- коэффициент скорости гетерогенных реакций k_{ci}^w , введенный на стр. 55,

не является лишь функцией температуры, поэтому нельзя утверждать, что поток массы частиц ci зависит исключительно от плотности ρ_{ci} .

– на сколько обоснован выбор коэффициента аккомодации равным 0.5 для поверхности диоксида кремния.

– говорить о поверхностных реакциях рекомбинации как о бинарных не совсем верно, т.к. они протекают на активных центрах адсорбции и их скорости зависят от концентрации свободных мест адсорбции.

– из текста диссертации в главе 3 не ясно как происходит пересчет эффективных коэффициентов γ на основе выбранных постадийных моделей катализа, разработанных для сплошной среды.

Сделанные замечания не снижают общей положительной оценки диссертационного исследования. Рассматривая работу Шакуровой Лии Алимджановны в целом, можно констатировать, что выполненный диссертантом комплекс научных исследований представляет несомненную научную ценность, как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения.

Заключение

Диссертационная работа Л.А. Шакуровой характеризуется полнотой и завершенностью, ясно и грамотно написана, достаточно подробно иллюстрирована графиками и рисунками. Диссертационное исследование выполнено автором на хорошем научном уровне и является завершенной научно-исследовательской работой в области физико-химической гидромеханики. Сформулированные в диссертации научные положения, выводы и практические рекомендации являются новыми и вполне обоснованными.

Применяемые в работе подходы могут быть использованы при изучении актуальных задач высокоскоростной аэродинамики и динамики разреженного газа.

Таким образом, диссертация Шакуровой Лии Алимджановны на тему «Эффекты скольжения в смесях газов с поуровневой кинетикой и поверхностными реакциями» является законченной научно-квалификационной работой, полностью соответствует требованиям, предъявляемым диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор – Шакурова Лия Алимджановна – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы.

Отзыв составлен исполняющим обязанности заведующего лабораторией Наномеханики Научно-исследовательского института механики Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова кандидатом физико-математических наук Александром Александровичем Крупновым. Отзыв обсужден и утвержден на заседании секции по физико-химической гидромеханике ученого совета НИИ механики МГУ 16.10.2024 г. Протокол № 6.

И.о. директора НИИ механики МГУ,
профессор РАН, доктор физико-математических наук

Дмитрий Владимирович Георгиевский

И.о. заведующего лабораторией Наномеханики
НИИ механики МГУ,
кандидат физико-математических наук

Александр Александрович Крупнов

Сведения о ведущей организации:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» (Научно-исследовательский институт механики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова).

Адрес: 119192 Москва, Мичуринский проспект, д. 1

Телефон: (495) 939-31-21
E-mail: common@imec.msu.ru

Подпись тов. Крупнова А.А., Георгиевского Д.В.
УДОСТОВЕРЯЮ
Зав. канцелярией
НИИ механики МГУ Коршунова Е.М.