

**Отзыв официального оппонента
на диссертационную работу Савельева Алексея Сергеевича
«Модели коэффициентов скорости химических реакций
для задач неравновесной аэродинамики»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических
наук по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы.**

Актуальность работы

Диссертация Савельева А.С. посвящена моделированию скорости химических реакций в поуровневом приближении при решении задач неравновесной аэродинамики в воздухе. Данное приближение является наиболее детальным способом описания течений, но его практическое применение сопряжено с двумя основными проблемами: высокая вычислительная сложность и недостаток достоверных данных о коэффициентах скорости химических реакций. К сожалению, современные экспериментальные установки не позволяют получить значения для поуровневых коэффициентов, а методы траекторных расчетов излишне трудозатратны и не могут применяться в реальных расчетах. По этой причине весьма востребованными являются точные и простые феноменологические модели для вычисления коэффициентов скорости реакций.

Объем и структура диссертации.

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав и заключения. Объем диссертации составляет 118 страниц, список литературы содержит 115 наименования.

Во введении автором рассмотрены способы описания течений разреженного газа и существующие модели колебательной и химической релаксации. Дан обзор работ, посвященных химическим реакциям в воздухе; обоснована научная значимость и новизна диссертации, описаны используемые в работе модели колебательного спектра молекул, характерные времена релаксации и коэффициенты скорости реакций в различных приближениях.

В первой главе рассматриваются коэффициенты скорости диссоциации в поуровневом приближении. Установлены границы применимости широко известной модели Тринора-Маррона при использовании стандартных значений параметров модели. Разработана модификация модели, позволяющая учесть зависимость параметров от температуры и колебательного состояния. Усовершенствованная модель обеспечивает хорошее согласование результатов с наиболее современными данными траекторных

расчетов. Проведена оценка влияния выбора поуровневой модели на многотемпературные коэффициенты скорости диссоциации и сравнение с результатами, полученными из эксперимента.

Во второй главе представлены результаты для коэффициентов скорости обменных реакций в поуровневом приближении. Проведено детальное сравнение существующих теоретических моделей и результатов траекторных расчетов. Определены границы применимости существующих моделей. На основе сравнения с траекторными расчетами впервые получена теоретическая модель, учитывающая колебательное возбуждение не только реагента, но и продукта реакции, даны рекомендации по выбору параметров в законе Аррениуса. Показана важность учета колебательного возбуждения продукта реакции на величину многотемпературных коэффициентов скорости реакций, представлено сравнение с результатами широко известных моделей.

Третья глава диссертационной работы посвящена практической реализации полученных моделей в программных кодах и сравнительному анализу выбора моделей на результаты расчета неравновесных течений. Рассмотрены задачи о пространственно-однородной релаксации бинарных смесей, поуровневой релаксации воздушной смеси за ударной волной, многотемпературной кинетики за ударной волной в бинарных смесях. Результаты расчетов сравниваются с результатами эксперимента, а также результатами, полученными на основе традиционно используемых моделей коэффициентов скорости реакций.

В заключении перечислены основные результаты, полученные автором диссертации.

Научная новизна

Научная новизна исследования заключается в следующих результатах: построены теоретические модели поуровневых коэффициентов скорости реакций в воздухе, не зависящие от модели колебательного спектра и прекрасно согласующиеся с данными траекторных расчетов; впервые получена простая теоретическая модель, учитывающая колебательное состояние продукта обменных реакций в поуровневом приближении; разработана методика построения моделей для других газов; оценено влияние моделей поуровневых коэффициентов скорости реакций на многотемпературные коэффициенты; полученные модели интегрированы в решения реальных задач. Показана важность учета колебательного возбуждения продуктов реакции при исследовании высокотемпературных течений воздуха.

Практическое значение

Построенные в работе модели по своей структуре сходны с используемыми в современных вычислительных кодах, что дает возможность легко интегрировать их в различные программы расчета неравновесных течений; при этом новые модели обеспечивают значительно более высокую точность. Определение границ применимости существующих моделей также является важным аспектом для современной неравновесной аэротермодинамики. Наличие готовых программных кодов позволяет оперативно начать их использование. Наличие отработанной методики построения новых моделей служит хорошим фундаментом для построения моделей для молекул других сортов.

Достоверность результатов

Достоверность полученных автором результатов обеспечена использованием строгих теоретических подходов, использованием в качестве эталонных данных наиболее современных и достоверных результатов, полученных методами молекулярной динамики. Расчеты течений, выполненных с использованием предложенных моделей, демонстрируют хорошее согласование с экспериментальными данными.

Публикации и апробация

Результаты диссертационной работы отражены в 12 публикациях (4 - в журналах, рекомендованных ВАК). Работа прошла апробацию на восьми всероссийских и международных конференциях.

Замечания по работе

1. В главе 3 при моделировании течений за ударными волнами новые модели коэффициентов скорости диссоциации тестируются отдельно от новых моделей обменных реакций, учитывающих колебательное возбуждение продуктов реакций. Было бы полезно сравнить результаты расчетов течения воздуха, в которых используются сразу обе новые модели, с результатами, получаемыми классическими методами.
2. С точки зрения развития методологии и для практических приложений было бы полезно представить обобщение данных моделей на случай более сложных, многоатомных молекул, составляющих атмосферы Марса и других планет.
3. В работе есть ряд опечаток и погрешностей в оформлении. Например, в оглавлении диссертации отсутствует ссылка на Список литературы, хотя фактически в работе он присутствует.

Данные замечания не снижают общей положительной оценки работы и носят рекомендательный характер. В целом работа представляет собой законченное исследование, вносящее заметный вклад в развитие физико-химической газовой динамики. Диссертация написана ясным языком, хорошо структурирована. Основные результаты работы опубликованы. Автореферат верно отражает содержание диссертации.

Диссертационная работа полностью удовлетворяет паспорту специальности 01.02.05 и отвечает всем требованиям пункта 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года. Считаю, что ее автор Савельев Алексей Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 - «механика жидкости, газа и плазмы».

Почтовый адрес организации: 105005, Москва, ул. Радио, д. 10а

Государственное образовательное учреждение высшего образования Московской области
«Московский государственный областной университет»

Телефон: (495) 780 - 09 – 43

E-mail: kaf-tfiz@mgou.ru

Профессор

кафедры теоретической физики,

доктор физико-математических наук

Кузнецов Михаил Михайлович

Подпись Кузнецова М.М. заверяю.

Начальник управления кадров МГОУ

«18» 05 2018г.



Крохин Г. А.