



УТВЕРЖДАЮ
Директор Института теоретической и
прикладной механики им. С.А. Христиановича,
чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н.

А.Н. Шиплюк

27 мая 2018

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертацию Савельева Алексея Сергеевича
«МОДЕЛИ КОЭФФИЦИЕНТОВ СКОРОСТИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ ДЛЯ ЗАДАЧ
НЕРАВНОВЕСНОЙ АЭРОДИНАМИКИ»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы.

Актуальность темы диссертации

Диссертационная работа А.С. Савельева посвящена разработке моделей коэффициентов скоростей химических реакций в приближении поуровневой кинетики и их применению для расчета высокоэнтальпийных неравновесных течений газа. Разработка таких моделей и их применение имеют высокую значимость во многих областях науки. В частности, для точного предсказания аэротермодинамики возвращаемых космических аппаратов и гиперзвуковых летательных аппаратов необходимо точно моделировать диссоциацию в потоке около них. Точные модели химических реакций также необходимы для аккуратной постановки экспериментов в высокоэнтальпийных установках в наземных условиях, а также для интерпретации полученных экспериментальных измерений. При исследовании представленных задач важно учитывать сильную термодинамическую неравновесность, оказывающую существенное влияние на характеристики течения и, следовательно, на поверхностные характеристики обтекаемой модели. При этом зависимость коэффициентов скоростей реакций от всех термодинамических параметров невозможно измерить экспериментально, поэтому в современной вычислительной аэротермодинамике используются различные теоретические, эмпирические и полуэмпирические модели, неточности которых могут приводить к различным численным результатам.

В работе рассматривается наиболее детальное и подробное поуровневое приближение химической кинетики и различные модели коэффициентов скорости реакций в указанном приближении. На основе данных квазиклассических траекторных расчетов, автором установлены границы применимости существующих моделей и предложена модификация широко известной модели Тринора-Маррона для констант скорости диссоциации.

Автором проведено подробное сравнение моделей коэффициентов скоростей обменных реакций, изучен вопрос учета колебательного состояния продукта химической реакции и получена обобщенная модель, учитывающая как колебательное состояние реагента, так и продукта обменной химической реакции. Несомненным достоинством полученного результата является достаточная простота полученной формулы, которая может быть легко интегрирована в существующие программные продукты для решения фундаментальных и прикладных задач гиперзвуковой аэродинамики.

Структура и содержание диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Во введении представлен обзор современного состояния рассматриваемой проблемы, обоснована актуальность, научная и практическая значимость представленной работы, введены модели колебательных спектров, представленных в работе, характерные времена релаксации и коэффициенты скоростей реакций в различных приближениях. В первой главе исследованы границы применимости существующих параметров модели Тринора-Маррона, на основе квазиклассических траекторных расчетов получена обобщенная модель. Проанализировано влияние выбора модели поуровневых коэффициентов на двухтемпературные коэффициенты скорости диссоциации. Вторая глава диссертации посвящена поуровневым коэффициентам скорости обменных реакций. Автором проведен детальный анализ существующих моделей, определены их преимущества и недостатки. Изучена зависимость коэффициентов скорости обменных реакций от колебательного состояния продукта реакции, получена простая теоретическая модель, позволяющая учитывать в коэффициентах скорости обменных химических реакций не только колебательное состояние реагента, но и колебательное состояние продукта реакции. Исследовано влияние учета колебательного состояния продукта на двухтемпературные коэффициенты скорости реакций. Третья глава представляет результаты расчетов одномерных неравновесных течений с использованием полученных моделей. Рассматривается релаксация бинарных смесей и течение бинарных и пятикомпонентной воздушной смесей за фронтом плоской ударной волны. Показано, что использование предложенных моделей при высоких температурах существенно улучшает согласование между теоретическими расчетами и экспериментальными данными, а учет колебательного состояния продуктов обменной реакции оказывает существенное влияние на состав смеси и макропараметры.

Научная новизна, обоснованность и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации

Научная новизна работы заключается в построении простых для численной реализации теоретических моделей поуровневых коэффициентов скоростей химических реакций, предназначенных для проведения расчетов с произвольной моделью колебательного спектра молекул. Впервые получена простая теоретическая модель поуровневых коэффициентов скоростей обменных реакций, учитывающая колебательное состояние не только реагента, но и продукта химической реакции. Представленные

модели получены на основе данных квазиклассических траекторных расчетов и прекрасно с ними согласуются. Разработана методика построения формул для коэффициентов скоростей химических реакций, которая может быть использована для молекул других химических сортов. Проведен подробный анализ влияния предложенных моделей на многотемпературные коэффициенты скоростей химических реакций в воздухе в широком диапазоне температур. Показана важность учета колебательного состояния продукта обменных химических реакций.

В работе проведены исчерпывающие систематические расчеты коэффициентов скоростей химических реакций, представлено сравнение результатов расчетов по различным моделям, определены границы применимости существующих и предложенных решений.

Достоверность результатов, выводов и рекомендаций диссертации обусловлена использованием современных методов кинетической теории и результатов квазиклассических траекторных расчетов, сравнением с экспериментальными измерениями и существующими моделями. Результаты исследований, представленных в диссертационной работе, прошли апробацию на всероссийских и международных конференциях и семинарах.

Практическая ценность

Результаты и выводы, представленные в работе, имеют не только научно-теоретическую, но и реальную практическую ценность. Особой значимостью обладают предложенные алгоритмы расчета и программные модули, рекомендации по выбору моделей для инженерных приложений. Результаты, представленные в работе, могут быть использованы в таких организациях как ИТПМ СО РАН, НИИ механики МГУ, ЦАГИ, РКК «Энергия», ЦНИИМаш, ЦИАМ, в учебном процессе на физических и механико-математических факультетах СПбГУ, МГУ, НГУ, БГТУ «Военмех», ЮУрГУ, СамГУ.

Замечания к работе

К работе имеются следующие замечания:

1. В разработанной модели поуровневых коэффициентов скоростей диссоциации параметр U зависит от колебательной энергии, а не от номера уровня, поэтому он не привязан к определенному колебательному спектру молекул. В то же время, коэффициент скорости диссоциации зависит от числа уровней используемого спектра. Было бы интересно увидеть оценки неопределенности в коэффициенте скорости диссоциации, связанной с выбором колебательного спектра молекул. Особенно важно для практических приложений было бы оценить погрешность, связанную с использованием модели гармонического осциллятора, по сравнению с более точными моделями колебательных спектров молекул.
2. В работе не представлено сравнение поуровневых коэффициентов скорости обменной реакции O_2+N , рассчитанных по разработанной модели, с коэффициентами, полученными с использованием моделей Варнаца, Русанова-Фридмана и др. Таким образом, не сделана оценка применимости указанных моделей для данной реакции.

3. В качестве приложений разработанных моделей были рассмотрены течения, в которых поступательная температура больше колебательной. Было бы интересно применить новые модели к течениям реагирующих газов при условии сильного возбуждения колебательных степеней свободы, когда $T_v > T$. Возможно, в этом случае могли бы наблюдаться новые эффекты.
4. В главе 3 не понятно, из каких соображений выбрано давление в набегающем потоке 100 Па при моделировании течения воздушной смеси за сильной ударной волной в приближении поуровневой кинетики. В задачах аэротермодинамики космических аппаратов давление сильно варьируется, поэтому интересно, как оно влияет на результат численного моделирования, особенно в той части релаксационной зоны, где становятся значительными процессы рекомбинации, скорость которых сильно зависит от давления.

Указанные замечания не снижают научной значимости полученных результатов и не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы.

Заключение по диссертационной работе

Список публикаций по теме диссертации включает 12 наименований, из которых 4 входят в рекомендованный ВАК список публикаций. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Диссертационная работа А.С. Савельева представляет собой законченное научное исследование, вносящее значительный вклад в развитие физико-химической аэродинамики, содержит интересные и важные для практического использования новые результаты. Диссертация удовлетворяет требованиям пункта 9 «Положения о порядке присуждения научных степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – «механика жидкости, газа и плазмы».

Диссертация и отзыв были обсуждены и одобрены на семинаре «Математическое моделирование в механике» Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт теоретической и прикладной механики им. Христиановича» 17.05.2017 (Протокол № 1).

Научный сотрудник, к.ф.-м.н.



Г.В. Шоев

Заведующий лабораторией
вычислительной аэродинамики,
к.ф.-м.н.



Е.А. Бондарь