ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИВТАН

125412, Москва
ул. Ижорская, 13, стр. 2
Телефон: (495) 485-83-45
Факс: (495) 485-99-22

07.12.2017 № 11402-1.2.2-21711
На № _____

Утверждаю
07.12.2017
Заместитель директора ОИВТ РАН
к.ф.-м.н. Гавриков Андрей Владимирович

Отзыв ведущей организации
о диссертации Белкина Александра Анатольевича
«Статистическая теория и моделирование процессов переноса
в дисперсных жидкостях, включая наножидкости»,
представленную на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук по специальности
01.02.05 «Механика жидкости, газа и плазмы»

Актуальность диссертационной работы. Интерес к процессам переноса в многофазных системах мотивирован как изучением разнообразных природных явлений, так и широким применением таких систем в теплоэнергетике, катализе, производстве лакокрасочных и смазочных материалов и других технологиях, включая микро- и нанотехнологии. Есть, однако, два обстоятельства, которые можно выделить, говоря об актуальности диссертационной работы Белкина А.А. В первую очередь, в последнее десятилетие интенсивно изучаются свойства так называемых наножидкостей, содержащих дисперсные частицы размером до ста нанометров. Перспективы их применения связаны не только с их малой эррозионностью и седиментацией, но и особыми свойствами переноса. Свойства переноса

наножидкостей не описываются классическими теориями, применяемыми для обычных дисперсных сред. В то же время получить достоверные экспериментальные результаты для наножидкостей непросто.

Автор диссертации строит последовательную методику, включающую вывод уравнений переноса на основе развитой им статистической теории и расчет коэффициентов переноса методом молекулярной динамики. Второе из отмеченных выше обстоятельств связано с тем, что Белкину А.А. удалось довести «до числа» задачу определения коэффициентов переноса именно для наножидкостей. Еще два десятилетия назад решить эту задачу было практически невозможно из-за невысоких вычислительных возможностей компьютеров. Именно сегодня работы в данном предметном поле появляются достаточно интенсивно, важно, что представленные в диссертации исследования стали одними из первых в мире.

Теоретическое и практическое значение диссертации. Известен ряд классических подходов к выводу уравнений гидрогазодинамики многофазных сред и определению для них коэффициентов переноса. Однако они имеют принципиальные недостатки. В частности, область применимости кинетической теории ограничена умеренно плотными газовзвесями с частицами малого размера. С другой стороны, методы термодинамики необратимых процессов являются феноменологическими, достаточно остро в этом случае стоит проблема замыкания уравнений гидродинамики и определения коэффициентов переноса. В такой ситуации важнейшей задачей становится построение замкнутых уравнений переноса дисперсных сред из первых принципов. Примененный автором диссертации подход, основанный на методах неравновесной статистической механики и молекулярной динамики, позволяет это сделать и поэтому является оправданным и обоснованным. Одной из задач работы был расчет с его помощью коэффициентов переноса наножидкостей и характеристик нанотечений. Изучение этих свойств сегодня является важной и востребованной задачей. Наножидкости уже сегодня активно используются, индустрия наносистем относится к приоритетным направлениям развития науки, технологий и техники Российской Федерации.

Актуальность исследования, его теоретическая и практическая значимость также подтверждается использованием результатов работы в одиннадцати научных проектах, в том числе проектах Российского научного фонда, Российского фонда фундаментальных исследований, целевых программах Министерства образования и науки Российской Федерации.

Структура диссертации. Текст работы состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы из 286 наименований и двух приложений, изложена на 302 страницах, содержит 71 рисунок и 22 таблицы.

Во введении, помимо постановки задачи, сделан обзор исследований по тематике диссертации с описанием достоинств и недостатков различных подходов к изучению процессов переноса в дисперсных средах. Цель работы сформулирована автором как построение из первых принципов замкнутой теории процессов переноса дисперсных жидкостей и молекулярно-динамическое моделирование свойств переноса наножидкостей и нанотечений.

В первой и второй главах работы развита теория процессов переноса дисперсных жидкостей с использованием методов неравновесной статистической механики. Вывод уравнений переноса, соответствующих многожидкостному уровню описания системы, основан на решении уравнения Лиувилля для N-частичной функции распределения. Развита итерационная процедура построения неравновесной функции распределения, позволяющая учитывать нелинейные по термодинамическим силам вклады в тензор напряжений, вектор потока тепла, межфазные силы с любой наперед заданной точностью. Выведены обобщенные определяющие соотношения, связывающие потоки и межфазные силы с термодинамическими силами. Из них получены формулы для коэффициентов переноса. Эти коэффициенты выражены через корреляционные функции микроскопических потоков. Результаты обобщены на системы с вращательными степенями свободы.

В следующих трех главах приведены результаты моделирования свойств переноса наножидкостей методом молекулярной динамики. В третьей главе приводится описание используемых алгоритмов и их эффективности, разработанной автором модификации алгоритма, результатов моделирования равновесных характеристик гомогенных сред и наножидкостей. В четвертой главе изучены особенности действующей на наночастицу силы сопротивления, установлена ее нестационарность. Исследованы механизмы релаксации скорости наночастиц в плотных газах и жидкостях, микрофлуктуации плотности и импульса базовой жидкости при движении наночастицы. Показано их влияние на коэффициенты переноса. Ключевой частью работы является определение коэффициентов переноса наножидкостей, описанное в пятой главе работы. Здесь было установлено, что отличия коэффициента диффузии наночастиц от результатов классических теорий вызваны двухстадийной релаксацией ее скорости, предложен аналог соотношения Эйнштейна для наночастиц. Впервые показано, что эффективный коэффициент вязкости наножидкостей определяется не только объемной концентрацией наночастиц, но и их размером и массовой плотностью материала. Изучены особенности влияния характеристик наножидкости на ее вязкость и теплопроводность, подтвержден экспериментально наблюдаемый эффект насыщения эффективного коэффициента теплопроводности при росте концентрации наночастиц.

Последняя глава посвящена изучению особенностей течений жидкостей в наноканалах и свойств переноса в стесненных условиях. Здесь изучено влияние характеристик потенциала взаимодействия молекул жидкости с молекулам стенок на гидравлическое сопротивление канала. Построена статистическая механика процессов переноса флюида в стесненных условиях, выведены соотношения для коэффициентов переноса. Показано, что коэффициенты переноса жидкости в наноканалах, нанопорах определяется не только его собственными свойствами, но и характеристиками всей системы жидкость–поверхность. Проведено молекулярно-динамическое моделирование вязкости в плоском наноканале, показано, что ее можно как увеличивать, так и уменьшать, варьируя материал стенок канала.

В заключении приведены выводы по работе, указаны возможные направления развития тематики диссертационного исследования.

Поставленные в работе задачи выполнены. Большинство результатов диссертационной работы являются **новыми**. В частности, впервые построены нелинейные уравнения гидромеханики для многожидкостного режима течения, установлена связь флуктуаций плотности и скорости в наножидкости на ее коэффициенты переноса. Установлено, что сила сопротивления наночастиц в жидкостях не описывается законом Стокса, а коэффициент вязкости наножидкостей зависит от размера частиц и их материала. Развита статистическая механика процессов переноса в стесненных условиях, проведен расчет эффективного коэффициента вязкости жидкостей в наноканале.

Достоверность и обоснованность результатов подтверждается использованием адекватных математических моделей и апробированных алгоритмов моделирования. Теоретическая часть работы базируется на решении из первых принципов уравнения Лиувилля и статистическом описании процессов переноса. Работоспособность разработанных алгоритмов моделирования проверялась на тестовых задачах. Результаты молекулярно-динамического моделирования сопоставлялись с известными теоретическими моделями, экспериментальными данными и данными моделирования, полученными другими авторами. Основные результаты прошли апробацию на международных и российских конференциях и экспертизу упомянутых выше научных проектов.

Результаты работы достаточно полно отражены в 35 печатных работах. Эти работы включают 18 статей в журналах из списка ВАК РФ (из них 3 статьи в зарубежных научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 6 статей в российских научных журналах, переводные версии которых индексируются Web of Science, 9 статей в российских научных журна-

лах, индексируемых Web of Science, Scopus и MathSciNet), 1 коллективную монографию, 13 публикаций в сборниках материалов международных и всероссийских научных конференций (из них 5 зарубежных конференций), 3 препринта.

Содержание диссертации соответствует специальности 01.02.05 «Механика жидкости, газа и плазмы».

Несмотря на достоинства работы, по ней можно сформулировать несколько **замечаний:**

1. В рассмотреных в диссертации молекулярно-динамических моделях взаимодействия наночастиц с плотным газом рассматривается упрощенная модель бесструктурных наночастиц. Однако с уменьшением размеров наночастиц их атомная структура будет оказывать влияние по характер происходящих процессов. Кроме того, учет атомной структуры наночастиц мог бы позволить учесть эффекты, связанные с их вращениями. Анализ подобных эффектов был бы весьма уместен в диссертации.

2. Моделирование методом молекулярной динамики чрезвычайно требовательно к вычислительным ресурсам. Для сокращения времени моделирования широко используется многопроцессорные вычислительные системы. Автор диссертации не использует распараллеливания программ для их эффективного исполнения, что ограничивает область моделирования свойств переноса наножидкостей.

3. Список цитируемых источников содержит очень много классических работ, опубликованных более пятидесяти лет назад. Количество этих работ можно было сократить, добавив более свежие публикации.

Перечисленные выше замечания практически не снижают значимости полученных результатов, можно утверждать, что диссертационная работа А.А. Белкина представляет собой законченное научное исследование, выполненное автором на высоком уровне, с применением оправданных и адекватных моделей и методов. Все результаты получены диссертантом самостоятельно или при его непосредственном участии. В работе на основании выполненных автором исследований свойств переноса построены теоретические положения, такие как нелинейные обобщенные уравнения гидромеханики, механизмы влияния наночастиц на коэффициенты переноса наножидкостей, статистическую механику процессов переноса флюидов в стесненных условиях, которые можно квалифицировать как научное достижение в механике жидкости, газа и плазмы.

Диссертация написана грамотным, понятным языком и хорошо иллюстрирована.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации и дает ясное представление о постановке задачи и полученных результатах.

Заключение о диссертационной работе А.А. Белкина. Диссертация «Статистическая теория и моделирование процессов переноса в дисперсных жидкостях, включая наножидкости» соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней (утверждено постановлением Правительства Российской Федерации от 21.04.16 г. № 335), ее автор, Белкин Александр Анатольевич, несомненно, достоин присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 «Механика жидкости, газа и плазмы».

Отзыв на диссертацию А.А. Белкина обсужден и одобрен на заседании научного семинара отдела компьютерной теплофизики 27 ноября 2017 г., протокол № 1.

Заведующий отделом компьютерной теплофизики ОИВТ РАН, доктор физико-математических наук (01.04.07 «Физика конденсированного состояния»), доцент

_____ Стегайлов Владимир Владимирович

27.11.2017

Контактные данные организации:
125412, г. Москва, ул. Ижорская, 13, стр. 2,
8 (495) 485-83-45,
webadmin@ihed.ras.ru,
http://www.jiht.ru