

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертацию 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 темы диссертации.

Актуальность диссертационного исследования обусловлена широким распространением дисперсных сред в природе и технических приложениях. Задача изучения их свойств переноса востребована как с точки зрения фундаментального развития современной механики жидкости и газа, так и с прикладной точки зрения.

Разработка многих новых технологий во всех отраслях промышленности сопряжена с использованием сред (газов, жидкостей, суспензий, эмульсий, аэрозолей) ранее не являвшихся базовыми для каких-то технологий в связи с отсутствием как экспериментальных данных, так и основных элементов теории процессов движения этих сред. Последние десятилетия развития техники и технологий показывают, что по-настоящему прорывные (или, как принято говорить в последние годы – инновационные) технологии являются, в основном, следствием фундаментальных исследований (экспериментальных или теоретических). К инновационным принято относить и «нанотехнологии». Несмотря на подчеркнуто повышенное внимание к проблемам с приставкой «нано» со стороны Правительства РФ и многих государственных структур, в настоящее время можно констатировать далеко неоднозначное отношение многих исследователей к этому научному направлению. Причина такой «двойственности» в оценках «нанотехнологий», скорее всего, обусловлена объективными причинами. Несмотря на то, что даже в «Приоритетных направлениях развития науки, технологий и техники в Российской Федерации» (утверждены Указом Президента Российской Федерации от 07 июля 2011 г. № 899) на втором месте стоит направление «Индустрия наносистем», пока нет оснований для вывода о том, что к настоящему времени разработаны научные основы

(в традиционном понимании этого слова) хотя бы какой-то части «нанотехнологий». В первую очередь, это является следствием того, что с наносредами (в большинстве практически значимых случаев наножидкостями) эксперименты проводить очень сложно. Возможно определение каких-то интегральных характеристик (например, теплопроводности, вязкости, температуропроводности), но пока нет методик регистрации характеристик переноса массы, импульса и энергии при движении одиночных наночастиц или их малых групп. При этом типичными для исследования наножидкостей являются не только противоречия в описании физики исследуемых разными авторами идентичных процессов, но и часто диаметрально противоположные зависимости, например, коэффициентов переноса в наножидкостях от численных значений основных значимых факторов.

В этой связи показательным является установленный во многих экспериментах нестационарный характер свойств сред, в которые вводились частицы наноразмеров. Эти закономерности изменения интегральных характеристик наножидкостей до настоящего времени не объяснены в рамках современных моделей жидкостей. Еще большая неопределенность, если судить по материалам обзорных докладов конференций 2016–2017 гг., имеет место с дифференциальными характеристиками наножидкостей (полями основных функций), которые пока в известных экспериментах не зарегистрированы. Отсутствие достаточных для построения моделей экспериментальных данных исключало возможность создания теории процессов переноса в наножидкостях, которая до последнего времени и не разработана.

По этим причинам тема диссертации А.А. Белкина, целью которой является построение из первых принципов замкнутой теории процессов переноса дисперсных жидкостей и молекулярно-динамическое моделирование свойств переноса наножидкостей и нанотечений, безусловно, актуальна. Следует уточнить, что область диссертационного исследования А.А. Белкина относится к той части науки, в которой экспериментальная проверка теоретических моделей и базовых гипотез крайне сложна. Более того, публикации по проблемам наножидкостей последних двадцати лет показывают, что в этом разделе механики жидкости и газа теория, скорее всего, является локомотивом, который может сдвинуть с «мертвой точки» понимание процессов, протекающих в наножидкостях, и создать объективные предпосылки для реального использования особенных свойств наножидкостей в практике.

При оценке актуальности темы диссертации А.А. Белкина необходимо отметить, что по своему содержанию она полностью соответствует не только приоритетному направлению развития науки, технологий и техники в Российской Федерации «Индустрия наносистем», но и п. 8 «Нано-, био-, информационные, когнитивные технологии» Перечня критических технологий Российской Федерации.

Общая характеристика работы.

Диссертация 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.

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. Основные этапы вывода и структура уравнений приведены в первой главе. Здесь же получены выражения для коэффициентов переноса. Во второй главе развита итерационная процедура построения функции распределения, позволяющая учитывать нелинейные по термодинамическим силам вклады в потоки и межфазные силы с любой наперед заданной точностью. Выведены обобщенные соотношения, связывающие вектор потока, тепла, тензор напряжений и другие характеристики с термодинамическими силами. Коэффициенты переноса выражены через временные корреляционные функции, определяемые по равновесной функции распределения.

В следующих главах приведены результаты моделирования свойств переноса наножидкостей и характеристик течений в наноканалах методом молекулярной динамики.

В третьей главе описаны используемые автором алгоритмы этого метода, предложенная им модификация одного из алгоритмов, результаты моделирования основных равновесных свойств жидкостей и наножидкостей. В четвертой главе исследована действующая на наночастицу сила сопротивления, установлена ее нестационарность. Исследованы механизмы релаксации скорости наночастиц в плотных газах и жидкостях, микрофлуктуации плотности и импульса базовой жидкости при движении наночастицы.

Важной частью работы является определение коэффициентов переноса наножидкостей. В пятой главе диссертации было установлено, что характерной особенностью диффузии наночастиц является наличие двух стадий релаксации ее скорости. Показано, что эффективные коэффициенты вязкости и теплопроводности наножидкостей определяется объемной концентрацией наночастиц, их размером и массовой плотностью материала. Изучены особенности влияния характеристик наножидкости на ее вязкость и теплопроводность, подтвержден экспериментально наблюдаемый эффект насыщения коэффициента теплопроводности. Построены корреляции для определения коэффициентов переноса.

В шестой главе построена неравновесная статистическая механика процессов переноса флюида в стесненных условиях. Установлено, что коэффициенты переноса жидкостей и газов в этом случае определяется не только его собственными свойствами, но и характеристиками всей системы флюид–поверхность. Выполнено моделирование вязкости флюида в наноканале методом молекулярной динамики. Приведены результаты моделирования, которые показали возможность как увеличения вязкости, так и уменьшения, что определяется материалом стенок канала.

В заключении диссертации приведены выводы по работе.

Общая методология и методика исследования.

Известен ряд классических подходов к выводу уравнений гидрогазодинамики многофазных сред и определению коэффициентов переноса. Каждый из них имеет определенные недостатки. Так, применимость кинетических теорий ограничена умеренно плотными газовзвесьями с частицами малого размера, для жидкостей построение кинетического уравнения невозможно. С другой стороны, методы и подходы термодинамики необратимых процессов являются феноменологическими, в этом случае для замыкания уравнений гидродинамики и определения коэффициентов переноса приходится привлекать дополнительные экспериментальные или теоретические методики, строгость которых часто вызывает вопросы. Поэтому примененный автором диссертации подход, основанный на методах неравновесной статистической механики, является вполне обоснованным. Он позволяет получить замкнутые уравнения и строгие выражения для коэффициентов переноса.

Платой за широкую область применения результатов является сложность выражений для коэффициентов переноса и необходимость расчета временных корреляционных функций микроскопических потоков. Однако, поскольку они определяются в равновесной системе, автору удастся это сделать методом молекулярной динамики. С его помощью рассчитаны основные коэффициенты переноса наножидкостей, их структура и некоторые другие характеристики.

Научная новизна полученных результатов.

Критерию новизны соответствует большая группа результатов, полученных А.А. Белкиным при выполнении своего диссертационного исследования. Новизна подтверждается публикациями статей в ведущих международных журналах, журналах РАН, а также входящих в список изданий, рекомендованных ВАК РФ для публикации материалов кандидатских и докторских диссертаций. Наиболее значимыми из них являются следующие:

1. Выведены нелинейные обобщенные уравнения гидромеханики для многофазных режимов течения дисперсных флюидов (в том числе с вращательными степенями свободы), а также обобщенные определяющие соотношения, связывающие потоки и межфазные силы с термодинамическими силами.

2. Получены формулы для коэффициентов переноса, выраженные через временные корреляционные функции соответствующих микроскопических потоков и соответствующие слабо неравновесным процессам.

3. Установлено, что сила сопротивления движению наночастиц характерным размером до 15 нанометров в жидкостях не описывается законом Стокса. При этом коэффициент сопротивления является нестационарной характеристикой (на начальном этапе релаксации его значения существенно превышают вытекающие из формулы Стокса значения).

4. По результатам изучения механизма релаксации скорость наночастиц в плотных газах и капельных жидкостях установлено, что эта релаксация определяется как индивидуальными взаимодействиями частиц с молекулами, так и взаимодействием с микрофлуктуациями плотности и импульса базовой жидкости.

5. По результатам теоретических исследований с применением метода молекулярной динамики установлено, что жидкость вблизи наночастиц анизотропна, последние сильно структурируют жидкость, и максимумы радиальной функции распределения увеличиваются значительно.

6. Выделена вихревая структура, формируемая наночастицами и определяющая дальнейшую релаксацию скорости.

7. Установлено, что классические теории Эйнштейна – Стокса и Энскогго не применимы для описания диффузии наночастиц в капельных жидкостях и плотных газах.

8. Показано, что эффективные коэффициенты вязкости и теплопроводности наножидкостей зависят не только от объемной концентрации дисперсной фазы, но и от размеров и материала наночастиц. Установлено, что важнейшим свойством, определяющим коэффициенты переноса в наножидкостях, является массовая плотность материала наночастиц, с увеличением которой влияние наночастиц на вязкость и теплопроводность становится более значимым.

9. Проведено описание процессов переноса в нанопорах и наноканалах из первых принципов, решая уравнение Лиувилля для «двухжидкостной» модели, автор построил неравновесную функцию распределения и формулы для эффективных коэффициентов переноса.

10. Обоснована возможность управления вязкостью флюида в наноканале за счет изменения материала стенок канала.

Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации.

Достоверность полученных автором диссертации результатов, основных защищаемых положений и выводов безусловна. В первую очередь отмечу логическую связь всех этапов исследований. Математические модели, разработанные автором диссертации, являются следствием фундаментальных законов сохранения массы, импульса и энергии и статистического описания исследовавшихся процессов переноса. А.А. Белкин использовал при решении значительной части задач диссертации популярный во многих отраслях науки и показавший свою высокую эффективность метод молекулярной динамики. Автор диссертации была предложена и реализована модификация алгоритма метода молекулярной динамики, позволившая более чем в два раза сократить время вычислений основных характеристик исследовавшихся процессов. При участии соискателя был разработан пакет программ молекулярно-динамического моделирования, описанный в первом разделе рукописи диссертации. Для описания процессов молекулярного взаимодействия использовалась модель гладких твердых сфер, достаточно хорошо отработанная при решении большого круга сложных задач.

Практическая значимость.

По мнению оппонента, диссертационное исследование А.А. Белкина при всей его фундаментальности имеет и значимое практическое значение. В настоящее время во многих научных, проектных и конструкторских организациях и учреждениях предпринимаются попытки использования в разных целях наножидкостей. Определение же характеристик таких сред проводится экспериментально (современные коммерческие пакеты типа ANSYS FLUENT не обеспечивают возможность достоверного моделирования процессов, протекающих в наножидкостях, и при их использовании в конкретных технологиях). Проведение экспериментов с целью определения теплофизических или вязкостных свойств наножидкостей с учетом зависимости этих свойств от параметров наночастиц конкретных материалов представляет очень сложную задачу, решение которой даже в специализированных организациях и учреждениях зачастую приводит к противоречивым, как уже отмечалось выше, результатам. Разработанные А.А. Белкиным подходы, модели и методы расчета могут использоваться при оценке достоверности результатов такого рода экспериментов.

Также результаты исследований А.А. Белкина могут использоваться при подготовке специалистов по направлению «Нанотехнологии». При всей сложности физических представлений о закономерностях исследуемых процессов и математического аппарата, используемого при моделировании протекающих в наножидкостях процессов, определенная часть теоретических положений, разработанных автором диссертации, будет доступна для усвоения магистрантами таких ведущих технических и классических университетов России, как Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Московский физико-технический институт, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (г. Москва), Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Национальный исследовательский Томский государственный университет, Национальный исследовательский Томский политехнический университет.

Замечания по диссертационной работе.

1. Разработанный автором диссертации подход к численному моделированию коэффициентов переноса в наножидкостях, как и любой численный метод, отягощен статистическими ошибками, обусловленными, в основном, дискретизацией области решения как по пространству, так и во времени на конечное число интервалов. В задачах моделирования наножидкостей размеры расчетных ячеек должны выбираться с учетом двух условий. С одной стороны, размер ячейки должен существенно превышать размер частицы. Но, с другой стороны, исходя из общих положений метода молекулярной динамики, решение задач такого рода должно проводиться на ячейках минимальных размеров. В этой связи остается открытым вопрос о выборе размеров ячейки, потому что в рукописи диссертации конкретных рекомендаций по алгоритму этой важной процедуры нет.

2. Полученные автором диссертации результаты существенно расширяют представления о влиянии наночастиц на эффективную вязкость несущей жидкости, но к недостаткам работы следует отнести отсутствие гипотез о физических механизмах влияния исследовавшихся факторов на эту характеристику наножидкостей. Так, например, установлено (рис. 5.10, стр. 203), что эффективная вязкость таких жидкостей зависит не только от объемной концентрации частиц (известно со времен Эйнштейна), но также от размеров и массы одиночных фрагментов дисперсной фазы («при одинаковом радиусе и конфигурации частиц более массивные сильнее увеличивают вязкость»). Механизм влияния размеров наночастиц можно объяснить, исходя из общих представлений о физике жидкостей. Но нет простого ответа на вопрос: «Почему при одинаковых радиусах и конфигурациях более массивные наночастицы сильнее увеличивают вязкость?».

3. Установленные по результатам численного моделирования значения нормированных коэффициентов вязкости в зависимости от объемной концентрации частиц при различных отношениях радиусов частицы и молекул (рис. 5.13, стр. 204) достигают максимальных значений 1,3. В то же время методическая погрешность расчета коэффициентов вязкости при разном числе осреднений (рис. 3.2, стр. 100) изменяется от 10 % до 100 %. Соотношение максимального изменения нормированной вязкости и погрешности ее определения оставляет открытым вопрос о достоверности некоторых приведенных в пятой главе результатов.

4. К недостаткам работы следует отнести и отчетливо проявляющуюся сдержанность автора диссертации в сопоставлении полученных им результатов и экспериментальных данных. Известно, что эти данные иногда противоречивы по существу. Есть как прямо пропорциональные зависимости функции от конкретного фактора, так и обратно пропорциональные. Логична была бы попытка автора диссертации провести хотя бы качественную оценку основных результатов экспериментов, опубликованных в рецензируемых журналах.

5. В рукописи диссертации недостаточно полно определена область применимости разработанных автором диссертации подходов, моделей и методов решения задач. Часто используемые в тексте термины «жидкости и плотные газы» недостаточно конкретны. Читателю интересными были бы оценки диапазонов изменения не только концентраций, размеров и массы частиц, в которых теория автора обеспечивает получение достоверных результатов, но, скорее всего, и свойства несущих жидкостей, которые также должны влиять на закономерности изменения численных значений коэффициентов переноса при введении в жидкость наночастиц определенного типа.

Ценность полученных в диссертации А.А. Белкина результатов, положений и выводов отмеченные недостатки не снижают. Диссертация А.А. Белкина является законченной научно-квалификационной работой, выполненной автором самостоятельно, она содержит результаты теоретических исследований, соответствующие критерию новизны, и представляющие собой новые крупные достижения в развитии механики дисперсных сред, включая наножидкости.

Автореферат полностью соответствует тексту диссертации, которая написана правильным русским языком, в доказательном стиле и хорошо иллюстрирована. Автор опубликовал 18 статей в журналах, рекомендованных ВАК РФ для публикации материалов кандидатских и докторских диссертаций и одну монографию.

Заключение о соответствии диссертации критериям.

На основании анализа содержания рукописи и автореферата диссертации А.А. Белкина «Статистическая теория и моделирование процессов переноса в дисперсных жидкостях, включая наножидкости» можно сделать обоснованное заключение о том, что диссертационная работа соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением

Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (с изменениями, внесенными постановлением Правительства Российской Федерации от 21 апреля 2016 г. № 335), а ее автор, Александр Анатольевич Белкин, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы.

Официальный оппонент
заведующий кафедрой теоретической
и промышленной теплотехники
федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский
Томский политехнический университет»,
доктор физико-математических наук
(01.04.14 – Теплофизика),
профессор



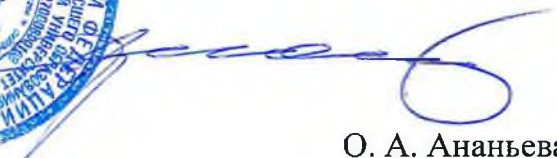
Кузнецов Гений Владимирович

08.12.2017

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего
образования «Национальный исследовательский
Томский политехнический университет»
Адрес: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30,
Тел.: 8(3822) 60-63-33
E-mail: tpu@tpu.ru
Сайт: <http://tpu.ru>



Подпись Г.В. Кузнецова удостоверяю:
Ученый секретарь Ученого совета НИ ТПУ



О. А. Ананьева