

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

Целью диссертационной работы А.А. Белкина являлось решение актуальной научной проблемы построения из первых принципов замкнутой теории процессов переноса дисперсных жидкостей и молекулярно-динамического моделирования свойств переноса наножидкостей и нанотечений.

Актуальность диссертационного исследования обусловлена несколькими факторами. Дисперсные среды широко распространены в природе и используются в многочисленных технологических процессах. Важнейшими свойствами таких сред являются свойства переноса, которые исследуются давно и достаточно активно. Однако методы, традиционно используемые для вывода уравнений переноса и определения коэффициентов переноса, имеют важные ограничения. Подход, основанный на решении кинетических уравнений, неприменим для эмульсий, суспензий и плотных газозвесей, есть ограничения на размер дисперсных частиц. Методы термодинамики необратимых процессов являются по существу феноменологическими, они не позволяют замкнуть уравнения гидродинамики и получить соотношения для коэффициентов переноса.

Понятна важность развития теории процессов переноса, которая с одной стороны была бы применима для широкого круга дисперсных сред, а с другой – позволяла бы получить уравнения переноса и коэффициенты переноса из первых принципов. В этой ситуации применение автором диссертации методов неравновесной статистической механики является **оправданным и обоснованным**. Этот подход также известен достаточно давно, но применялся ранее в основном для гомогенных сред.

Часть работы посвящена исследованию таких специфичных дисперсных сред, как наножидкости и пористые системы. Они востребованы для развития многих критических технологий, связанных с созданием новых материалов с уникальными свойствами, эффективных устройств транспортировки тепла и охлаждения, катализаторов, фильтров.

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

Во введении на основе обзора исследований по тематике работы показана ее актуальность, сформулирована цель, основные задачи и выносимые на защиту положения, обоснованы используемые методы.

В первой главе работы на основе решения уравнения Лиувилля для N -частичной функции распределения построена замкнутая теория процессов переноса дисперсных жидкостей. Выведены уравнения гидродинамики, соответствующие многожидкостному уровню описания. Методом проектирования построена неравновесная функция распределения, с ее помощью тензор напряжений, вектор потока тепла, межфазные силы выражены через термодинамические силы: градиенты скорости и температуры, разности скоростей и температур разных компонентов. Наконец, получены флуктуационно-диссипативные соотношения для коэффициентов переноса.

Во второй главе приведено описание разработанной итерационной процедуры построения следующих приближений, нелинейных по градиентам и разностям неравновесной функции распределения. Выведены соответствующие определяющие соотношения, связывающие потоки и межфазные силы с термодинамическими силами, выписаны соотношения для новых коэффициентов переноса. Полученные результаты обобщаются на случай систем с вращательными степенями свободы.

В третьей главе приводится описание метода молекулярной динамики, который автор использует в дальнейшем для расчета коэффициентов переноса и изучения свойств переноса наножидкостей. Описана новая методика, позволившая автору увеличить эффективность алгоритма. Приведены результаты моделирования равновесных характеристик гомогенных сред и наножидкостей.

В четвертой главе изучены особенности действующей на наночастицу силы сопротивления, показано, что она не описывается законом Стокса, установлена ее зависимость от времени. Исследованы механизмы релаксации скорости наночастиц в жидкостях, флуктуации плотности и импульса, генерируемые движущейся наночастицей. Особое внимание уделено влиянию исследованных эффектов и характеристик на свойства переноса наножидкостей.

В пятой главе на основе данных молекулярно-динамического моделирования определяются коэффициенты переноса наножидкостей. Здесь установлено, что отличия коэффициента диффузии наночастиц от закона Эйнштейна–Стокса обусловлены двухстадийным механизмом релаксации частицы. Показано, что эффективные коэффициенты вязкости и теплопроводности наножидкостей сильно зависят от плотности материала частицы, увеличиваясь с ее ростом. Важным фактором является и размер частиц. Проведено сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными, показавшее адекватность используемых моделей и методов.

В шестой главе приведены результаты моделирования течений в наноканалах и построена теория процессов переноса в наноканалах и нанопорах. Изучены зависимости сопротивления нано-каналов разного размера от констант потенциала взаимодействия молекул жидкости и стенок канала. Показано, что коэффициенты переноса жидкости в этом случае

определяются не только ее собственными свойствами, но и характеристиками всей системы жидкость–поверхность. Установлено, что вязкость жидкостей в нано-канале можно регулировать, как уменьшая, так и увеличивая. Эффект определяется материалом стенок канала.

В заключении диссертации сформулированы выводы, приведено краткое описание перспектив исследований по тематике работы.

В работе получены следующие **новые результаты**:

- построены нелинейные уравнения гидромеханики для многожидкостного режима течения дисперсных сред;
- изучены флуктуации плотности и скорости базовой жидкости, создаваемые наночастицами, установлена их связь с коэффициентами переноса;
- установлено, что сила сопротивления движению наночастиц в жидкостях не описывается законом Стокса;
- показано, что коэффициент вязкости наножидкостей зависит от размера частиц и массовой плотности их материала;
- построена статистическая теория процессов переноса в стесненных условиях;
- показано, что вязкостью жидкости в наноканалах можно управлять, меняя свойства стенок канала.

Можно отметить, что первые работы по изучению наножидкостей автор и его коллеги опубликовали более пятнадцати лет назад, когда актуальность этой тематики еще не была очевидна.

Достоверность результатов определяется использованием адекватных математических моделей и методов, протестированных алгоритмов моделирования, сопоставлением с известными теоретическими законами, экспериментальными данными и данными моделирования. Основные результаты и выводы, сформулированные в диссертации, прошли апробацию на международных и российских конференциях.

Результаты работы являются **обоснованными**. Теоретические положения строятся на выводе уравнений гидродинамики из первых принципов, автор не использует феноменологические подходы и получает замкнутые уравнения с точными соотношениями для коэффициентов переноса. В молекулярно-динамическом моделировании используются эффективные алгоритмы, грамотные методы построения моделей и анализа результатов, а также потенциалы взаимодействия, учитывающие специфику наножидкостей.

Теоретическая и практическая значимость работы, ее актуальность подтверждается использованием результатов диссертации при выполнении проекта Российского научного фонда, пяти проектов целевых программ Министерства образования и науки Российской Федерации, пяти проектов Российского фонда фундаментальных исследований. Результаты работы используются в учебном процессе НГАСУ (Сибстрин), в частности в новом курсе по моделированию микро-течений.

Результаты исследования достаточно полно представлены в 35 публикациях, среди которых:

- 18 статей в журналах, включенных в Перечень ВАК РФ;
- 1 коллективная монография;
- 13 публикаций в сборниках материалов международных и всероссийских научных конференций;
- 3 препринта.

По диссертации можно сформулировать следующие **замечания**:

1. Из текста диссертации непонятна необходимость вариационных производных при выводе неравноточной функции распределения.

2. В главе 4 методом молекулярной динамики вычислена сила сопротивления движению наночастицы в жидкости. На рис. 4.11 показано, что сила сопротивления уменьшается с течением времени и выходит на постоянное значение, равное силе Стокса, через 40–50 времен между столкновениями молекул. В диссертации обнаружена зависимость силы сопротивления от времени, которая объясняется многостадийностью процесса релаксации (см. интерполяционную формулу (4.19)). Однако возможна другая интерпретация зависимости силы от времени, показанной на рис. 4.11. При ускоренном движении частицы либо жидкости, на частицу действуют присоединенная сила и сила Бассэ. Когда происходит ускорение частицы, сила Бассэ велика, с течением времени ее значение уменьшается. По этой причине нужно было бы сравнивать силу, рассчитанную методом молекулярной динамики с полной гидродинамической силой, которая кроме силы Стокса включает в себя силу присоединенных масс и силу Бассэ.

3. В шестой главе при определении вязкости жидкости в нано-канале предполагалось, что стенки нано-канала, в которых находится жидкость, образованы атомами, положения которых зафиксированы. В этом случае не учитывается влияние тепловых колебаний атомов в стенках нано-канала на эффекты переноса, которое может привести к значительному увеличению вязкости жидкости.

4. На рис. 4.11 на оси абсцисс отложено безразмерное время, а не размерное, как указано на рис. 4.11.

5. По данным моделирования эффективных коэффициентов переноса наножидкости автор получил корреляции, связывающие эти коэффициенты с ее характеристиками, в частности с объемной концентрацией наночастиц. Сопоставляя результаты по теплопроводности наножидкостей с экспериментальными данными, он использует эти корреляции для диапазона объемных концентраций, в котором результаты моделирования получены не были, не аргументируя правомерность такого подхода.

6. На рис. 6.17 приведены результаты расчета зависимости вязкости от ширины нано-канала. Из этого рисунка следует, что вязкость жидкого аргона уменьшается с увеличением ширины нано-канала, а вязкость жидкого углерода увеличивается с увеличением ширины нано-канала. Из текста диссертации не ясно, чем объясняется такое различное поведение двух жидкостей.

7. Данные о вязкости жидкостей в наноканалах следует подтвердить молекулярно-динамическим моделированием течения с расчетом

коэффициента сопротивления этих каналов. Это замечание можно рассматривать как рекомендацию к дальнейшему развитию исследований автора по тематике работы.

Несмотря на указанные выше замечания, диссертационная работа А.А. Белкина является законченным научным исследованием, выполненным автором самостоятельно и на высоком уровне.

Автореферат диссертации полностью отражает ее содержание.

Диссертация «Статистическая теория и моделирование процессов переноса в дисперсных жидкостях, включая наножидкости» соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Белкин Александр Анатольевич, достоин присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы.

Официальный оппонент

ведущий научный сотрудник лаборатории № 6 физики многофазных сред Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, доктор физико-математических наук (01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы, 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела), профессор

Киселев Сергей Петрович

05.12.2017

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук

Россия, 630090, Новосибирск, ул. Институтская, 4/1,
(383) 330-85-34, admin@itam.nsc.ru, <http://www.itam.nsc.ru>

Подпись С.П. Киселева заверяю

Учёный секретарь ИТПМ СО РАН



Ю.В. Кратова