

ОТЗЫВ

официального оппонента Саженова Сергея Александровича
на диссертацию Мерзликиной Дарины Александровны
«Моделирование нелинейной вязкоупругости расплавов разветвленных
полимеров как следствие мезоскопического подхода к описанию их динамики»,
представленную на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
01.02.05 — Механика жидкости, газа и плазмы

Актуальность темы диссертации

Полимерные материалы находят широкое применение в оборонной, автомобильной, космической, деревообрабатывающей и многих других отраслях промышленности. Естественным образом их можно разделить на два класса: естественные (природные) и искусственные (синтетические). Создание новых полимеров, во-первых, мотивируется стремлением заменить используемые в промышленности в настоящее время редкие и дорогостоящие материалы, делая тем самым продукцию более дешёвой и доступной. Во-вторых, дизайн более совершенных материалов, и как следствие, конструкций, механизмов и т.п., содержащих эти материалы, требует создания и использования полимеров с улучшенными химическими и физическими свойствами. Поведение полимера определяется его реологическими свойствами, которые в математическом описании имеют вид конечных алгебраических, дифференциальных и (или) интегро-дифференциальных уравнений, называемых реологическими определяющими соотношениями (уравнениями состояния, реологическими уравнениями). Соответственно, проблема конструирования реологических соотношений, их верификации посредством аналитических, численных и лабораторных исследований, является очень актуальной. Исследованию этой проблемы как раз и посвящена диссертация Д. А. Мерзликиной. Целью работы соискателя является конструирование реологической модели полимерной жидкости (концентрированного раствора или расплава полимера) с учётом многомодового характера релаксационных процессов на основе уже существующей одномодовой модели. Исторически существует несколько подходов к построению реологических соотношений, из которых со временем в качестве основных выделились два: феноменологический и мезоскопический. В настоящее время мезоскопический подход, применяемый в диссертации, выглядит предпочтительным. Он базируется на методе многомасштабного моделирования, в котором принимается во внимание поведение полимеров на микро- и макроскопическом уровнях и исследуются механизмы взаимодействия между этими уровнями. Следует отметить, что реализация такого подхода достаточно трудоёмка в части численных экспериментов и стала относительно широко доступной совсем недавно, благодаря развитию компьютерной техники.

Ввиду изложенного выше, актуальность исследований, проводимых в диссертации, сомнений не вызывает.

Структура и содержание работы

Диссертационная работа состоит из введения, трёх глав и заключения. Работа изложена на 99 страницах машинописного текста, содержит 50 рисунков, одну таблицу, одно приложение. Список литературы состоит из 123 наименований.

Во введении обоснована актуальность диссертационного исследования, сформулированы цели и задачи, показаны научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, даны сведения об апробации результатов на региональных, российских и международных конференциях. Представлено краткое описание структуры и содержания диссертации.

Первая глава имеет обзорный характер. В ней проводится классификация реологических моделей; рассматриваются реологические модели мезоскопического и феноменологического типов. Обсуждаются основные черты обоих типов модели, их преимущества и слабые места. В качестве примеров мезоскопических моделей в диссертации приводятся и обсуждаются модель Дои — Эдвардса (M. Doi, S. F. Edwards), ‘pom-pom’ модель Маклейша — Ларсона (T. C. B. McLeish, R. G. Larson) и некоторые другие модели репационного типа. Также кратко упоминаются модели дифференциального типа (модель Гизекуса (H. Giesekus), модель РТТ, модель RHL).

Из феноменологических моделей обсуждаются классические модели Максвелла, Олдройда (Oldroyd-B модель), а также модель Леонова — Прокунина. Завершается глава достаточно подробным описанием вывода нелокальной модели Бернштейна — Керсли — Запаса (B. Bernstein, E. A. Kearsley, L. J. Zapas: модель К-ВКЗ) с памятью формы и представлением различных модификаций этой модели.

Вторая глава является центральной в диссертации. В ней во всех подробностях рассмотрена одномодовая реологическая модель. Указывается, какие физические механизмы в ней учтены и какие исключены из рассмотрения ввиду малой значимости. После этого проводится обобщение: производится модификация закона внутреннего трения, конструируется корректная многомодовая модель типа реологической модели Виноградова — Покровского. Затем модель верифицируется на соответствие вискозиметрическим течениям конкретных полимерных жидкостей при простом сдвиге и одноосном растяжении. Изучается влияние числа мод на точность описания соотношений линейной вязкоупругости.

В третьей главе выявляются зависимости между значениями параметров и характером получаемых графиков стационарных и нестационарных вискозиметрических функций. Приводится алгоритм оценки параметров реологической модели. Формулы для подбора параметров выбираются в работе субъективно, исходя из наилучшего соответствия имеющимся экспериментальным данным. Такой подход оказывается вполне корректен.

Также в третьей главе уделяется внимание описанию численных экспериментов. Проводится сравнение перспективных численных методов для проведения таких экспериментов. Указывается, что наиболее подходящими являются методы семейства Рунге — Кутты. Утверждается, что для разработки комплекса программ по моделированию вискозиметрических функций оптимальной является среда Mathlab. Такой комплекс построен (в соавторстве), что подтверждается в приложении диссертации свидетельством о государственной регистрации программ для ЭВМ.

В заключении выписаны основные выводы по результатам диссертационной работы. Даны рекомендации по использованию результатов диссертации.

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

Результаты исследований, изложенные в диссертации, получены на основе теории термодинамически согласованных мезоскопических реологических моделей полимерных сред методами многомасштабного моделирования с применением современных хорошо апробированных вычислительных инструментов. Достоверность результатов диссертации обеспечивается непротиворечивостью построенной многомодовой модели; хорошим соответствием результатов расчётов, проведённых на основании многомодовой модели, и имеющихся данных лабораторных экспериментов.

Основные результаты диссертации адекватно описаны в разделе «Заключение» и состоят в следующем:

1. описан немонотонный участок зависимости при растяжении с помощью модификации закона внутреннего трения в мезоскопической модели Виноградова — Покров-

ского;

2. путём введения большего количества мод учтена множественность релаксационных процессов при деформировании полимерного расплава;
3. на основе сформулированной реологической модели рассчитаны стационарные и нестационарные вискозиметрические функции;
4. проведено сравнение экспериментальных зависимостей с теоретическими, выявлено хорошее согласование между ними;
5. на основе вискозиметрических измерений разработана методика оценки параметров реологической модели;
6. исследовано влияние параметров модели на характеристики получаемых стационарных и нестационарных зависимостей.

Значимость результатов для науки и производства

Выведенная многомодовая реологическая модель позволяет описывать наблюдаемые в опытах явления с повышенной точностью как в линейном, так и нелинейном случае. Соответственно, её можно положить в основу описания сложных течений, например, течений в каналах с переменным сечением, течений на выходе из экструдера, электроспиннинга и т.д. Модель может быть использована для расчётов в стандартных пакетах на суперкомпьютерах.

Недостатки в диссертации и автореферате

Имеются некоторые несущественные недостатки.

1. В тексте имеются недочёты и шероховатости, затрудняющие восприятие материала, несмотря на в целом достаточно подробное изложение:
 - Замечено несколько опечаток, например в формуле (2.30) вместо буквы ρ (ρ — в диссертации это длина радиус-вектора относительного движения бусинок в нормальных координатах) должна быть буква p (гидростатическое давление); в начале п. 2.4 на странице 39 вместо «Вернёмся к уравнениям (2.6) и (2.7).» должно быть «Вернёмся к уравнениям (2.7) и (2.8).».
 - Желательно было составить отдельный список обозначений функций, независимых переменных, констант, параметров и т.п. и разместить его в конце диссертации в виде приложения. Создание такого вида списков широко принято в объёмных трудах по механике и физике, там где количество обозначений доходит до ста и более; и их наличие сильно облегчает чтение.
 - При ссылках на конкретные модели или отдельные формулы в монографиях желательно было указать конкретные формулы или параграфы в этих монографиях, облегчая читателю сверку с первоисточником. Это замечание относится, например, к ссылке на монографию [34] в связи с моделью Каргина — Слонимского — Рауза (на странице 54) и к ссылке на монографию [111] в связи с определением тензора трения ζ_{ij} (на странице 40).
2. Формула (2.19) на странице 37 очевидно должна иметь вид

$$\delta(\vec{x} - \vec{r}^\alpha) = \delta(\vec{x} - \vec{q}^\alpha) - (r_i^\alpha - q_i^\alpha) \frac{\partial}{\partial x_i} \delta(\vec{x} - \vec{q}^\alpha),$$

а не $\delta(\bar{x} - \bar{r}^\alpha) = \delta(\bar{x} - \bar{q}^\alpha) - \delta(r_i^\alpha - q_i^\alpha) \frac{\partial}{\partial x_i} \delta(\bar{x} - \bar{q}^\alpha)$, как в тексте.

К слову, ряд Тейлора дельта-функции Дирака, частичная сумма которого (до первого порядка включительно) фигурирует в (2.19), имеет ясный и строгий смысл в теории распределений (по Л. Шварцу), а не только чисто формальный смысл, как упомянуто в диссертации.

3. На странице 35 вывод третьего уравнения, то есть уравнения диффузии бусинок относительно друг друга, заключается в простом выбрасывании слагаемого $\frac{\partial(\psi_j^\circ W)}{\partial \rho_j^\circ}$ во втором уравнении, то есть уравнении Смолуховского, записанного в нормальных координатах. Желательно было пояснить обоснованность пренебрежения этим слагаемым.

Других замечаний к тексту диссертации не имеется. Сделанные замечания ни в какой мере не снижают ценности полученных в диссертации результатов.

Соответствие содержания диссертации указанной специальности

Диссертационная работа Д. А. Мерзликиной полностью соответствует специальности 01.02.05 — «Механика жидкости, газа и плазмы», а по своей направленности и методам исследования может быть отнесена к физико-математическим наукам.

Соответствие автореферата содержанию диссертации

Автореферат диссертации полностью соответствует содержанию диссертационной работы и отражает её основные результаты, положения и выводы.

Заключение о соответствии работы требованиям ВАК

Диссертация «Моделирование нелинейной вязкоупругости расплавов разветвленных полимеров как следствие мезоскопического подхода к описанию их динамики» является законченной научно-квалификационной работой, направленной на решение актуальной проблемы механики сплошных сред со сложной реологией, соответствует требованиям пп. 9, 10 «Положения о порядке присуждения учёных степеней» (Постановление правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842) в части, касающейся учёной степени кандидата наук, а автор диссертации, Мерзликина Дарина Александровна, безусловно заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 — «Механика жидкости, газа и плазмы».

Официальный оппонент

Доктор физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник лаборатории математического моделирования фазовых переходов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института гидродинамики им. М. А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук,

30 октября 2018 г.


С. А. Саженов

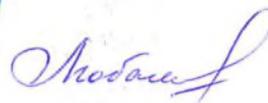
Почтовый адрес, телефон, адрес электронной почты:

630090 Новосибирск, просп. Академика М. А. Лаврентьева 15, Институт гидродинамики, тел. +7 961 2214357, sazhenkovs@yandex.ru

Подпись Саженова С. А. заверяю:

Ученый секретарь ИГиЛ СО РАН
к.ф.-м.н.





И. В. Любашевская