

## Отзыв официального оппонента

на диссертационную работу Подрыги Виктории Олеговны «Многомасштабное численное моделирование течений газа в каналах технических микросистем», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Диссертационная работа посвящена созданию многомасштабного математического подхода, численных алгоритмов, их параллельных реализаций и комплексов программ для моделирования сложных физических процессов, происходящих при течении многокомпонентных газовых смесей по каналам технических микросистем, а также для исследования свойств материалов технических микро- и наносистем на молекулярном уровне. Данный круг задач весьма актуален в связи с внедрением нанотехнологий в различных отраслях промышленности. В частности, в современной газовой динамике имеется множество приложений, связанных с использованием матриц микросопел в технологических процессах. Диаметр микросопел может варьироваться от долей миллиметра до нескольких десятков нанометров. Данный диапазон масштабов приводит к газодинамическим задачам с числами Кнудсена 0.1 и более. Разработка эффективной многомасштабной вычислительной методики обуславливает актуальность диссертационной работы.

**Диссертация** состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы.

Во введении описывается общая характеристика работы, актуальность темы исследования, цели и задачи диссертации, научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, методы исследования и основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе дано описание многомасштабного двухуровневого подхода, предложенного для численного моделирования газодинамических процессов в каналах технических микросистем. В основе подхода лежит объединение двух уровней вычислений: микро- и макроскопического уровней. Реализация основана на расщеплении по физическим процессам. На макроскопическом уровне в качестве математической модели рассматривается система квазигазодинамических уравнений, которая представляется в диссертации для случая многокомпонентной смеси реальных газов. На

микроскопическом уровне используется метод молекулярной динамики, с помощью которого рассчитываются транспортные коэффициенты квазигазодинамических уравнений (диффузии, вязкости, теплопроводности), параметры уравнений состояния компонент и смеси в целом, обменные члены, тип и параметры граничных условий.

Во второй главе представляется классификация алгоритмов по реализации предложенного подхода, представляются разработанные алгоритмы, детали параллельных реализаций и результаты тестирования разработанных параллельных программ.

В третьей главе описываются методики и полученные автором результаты по приведению к термодинамическому равновесию систем, находящиеся в разных агрегатных состояниях, разной геометрии (объемная геометрия, геометрия пластины) и при разных условиях по температуре и давлению.

В четвертой главе представлены модели, методы и алгоритмы для моделирования параметров уравнений состояния и кинетических коэффициентов реальных газов. Вычислительные эксперименты проводятся на примере системы молекул азота. Приводятся результаты расчетов, согласующиеся с известными данными.

В пятой главе представляются молекулярно-динамические расчеты по газодинамическим процессам, происходящим на границе с поверхностями твердых материалов. В качестве примера рассмотрено течение молекул азота вблизи стенок микроканала, состоящих из атомов никеля. На этом примере проанализированы этапы эволюции микросистемы газ-металл при заданных итоговых значениях температуры и импульса к квазиравновесному состоянию. Также рассмотрена задача взаимодействия газового потока с металлической пластиной с целью расчета параметров граничных условий.

В шестой главе представляются вычислительные основы моделирования течения бинарной газовой смеси в микроканалах технических систем. В качестве примера рассмотрена задача, где в качестве газов выбраны азот и водород. Описывается математическая постановка задачи о смеси азота и водорода, истекающей со сверхзвуковой скоростью из идеального сопла цилиндрической геометрии в область технического вакуума. Исследуется численная реализация подхода, приводятся результаты расчетов течения азот-водородной смеси после выхода из сопла в свободное пространство, проводится сравнение полученных результатов с экспериментальными и численными данными.

В заключении сформулированы основные результаты выполненной работы, рекомендации по их использованию и перспективы дальнейшей разработки темы исследования.

**Основные результаты** работы заключаются в следующем:

1. Предложен новый многомасштабный двухуровневый подход к математическому моделированию газодинамических течений в микро- и наноканалах технических систем, легко адаптируемый к современной вычислительной технике и охватывающий все стадии моделирования.

2. Разработаны численные алгоритмы реализации многомасштабного подхода в четырех вариантах, отличающиеся назначением и методикой вычислений.

3. Разработаны параллельные версии указанных алгоритмов и реализующие их программы, ориентированные на использование современных компьютеров и суперкомпьютеров с гибридной архитектурой.

4. Разработан комплекс параллельных программ для моделирования течения газовых смесей в сложных технических микросистемах с помощью методов механики сплошной среды и молекулярной динамики в рамках многомасштабных моделей.

5. Разработан комплекс параллельных программ для моделирования свойств материалов технических нано- и микросистем с помощью метода молекулярной динамики.

6. Выполнен ряд тестовых и верификационных расчетов по моделированию отдельных компонент микросистемы (свойств газов и материалов стенок в условиях термодинамического равновесия), а также общего течения в канале, получен репрезентативный набор данных для валидации полученных численных результатов.

7. Выполнено исследование процессов взаимодействия газа с металлической стенкой с учетом атомной структуры поверхности. Разработана методика определения методами молекулярной динамики параметров граничных условий для решения практических газодинамических задач на макроскопическом уровне.

**Научная новизна** работы заключается в построении нового многомасштабного подхода к моделированию течений газов их смесей в технических микросистемах, основанном на использовании системы квазигазодинамических уравнений и методов молекулярной динамики. Подход применяется в условиях широкого диапазона чисел Кнудсена и позволяет

согласованно определять уравнения состояния, транспортные коэффициенты и граничные условия. До настоящего времени определение вида и параметров уравнений состояния, транспортных коэффициентов газовой среды было отдельной задачей, а значения параметров были весьма приблизительными и не всегда согласовывались между собой. Предложенный в диссертации подход позволяет устранить эти недостатки с помощью использования метода молекулярной динамики. Также во многих случаях приближенно без согласования свойств газа и твердой стенки вычисляются условия на границах газ–твердое тело. Разработанная автором методика позволяет определять их путем прямых молекулярных расчетов.

**Теоретическую ценность** представляет предложенный и численно исследованный многомасштабный двухуровневый подход к моделированию свойств и течений смесей реальных газов в каналах технических микросистем с учетом молекулярных взаимодействий. При реализации подхода исследованы различные численные алгоритмы определения параметров уравнений состояния реальных газов (коэффициенты сжимаемости и теплоемкости) и транспортных коэффициентов (диффузии, сдвиговая и объемная вязкости, теплопроводности), из которых выбраны наиболее адекватные физической реальности и наименее затратные при вычислениях. Предложены численные алгоритмы определения условий на границе газ–металл, а также алгоритмы численной коррекции макропараметров смеси газов в потоке. Исследованы различные технологии параллельной программной реализации. Численно исследован ряд модельных задач о течениях газов в микроканалах.

**Практическую значимость** представляет разработанный вычислительный инструмент и комплексы программ для моделирования различных макропараметров состояния газовых и металлических сред как независимых, так и взаимодействующих между собой. Полученные с их помощью результаты моделирования представляют практическую ценность для исследования газодинамических процессов в широком диапазоне параметров.

**Обоснованность** научных положений, выводов и результатов, сформулированных в диссертации Подрыги В.О., подтверждена апробацией на международных и всероссийских научных конференциях, а также публикациями результатов исследования в рецензируемых научных изданиях.

**Достоверность** полученных результатов подтверждается известными теоретическими и экспериментальными данными, а также корректным использованием предложенного математического аппарата, который включает

комбинации традиционных методов, с успехом применявшихся ранее в других приложениях. Совокупный подход, базирующийся на известном методе расщепления по физическим процессам, верифицирован по известным из литературы данным. Разработанные параллельные алгоритмы и программные решения верифицированы на широком круге модельных задач.

### **Замечания**

1. В диссертации не сказано, можно ли в рамках многомасштабного подхода использовать двух- и трёхтемпературные модели газовой среды.

2. В диссертации также не сказано, можно ли сформулировать общее условие устойчивости предложенного многомасштабного подхода.

3. В диссертации не приведены конкретные примеры разбиения сеток по узлам гибридных вычислительных систем, а также нет графиков масштабируемости.

4. Имеются опечатки в подписях к рисункам: в Главе 3 у рисунков 3.1, 3.13, 3.15, 3.17, 3.20 на оси ординат стоит знак запятой.

### **Заключение**

Диссертационная работа В.О. Подрыги является самостоятельным, завершённым научным исследованием в области математического моделирования, численных методов, алгоритмизации и создания компьютерных программ, выполненным автором на высоком научном уровне. В работе предложен и реализован новый многомасштабный двухуровневый подход к решению широкого класса газодинамических задач микро- и нанотехнологий. Основные результаты, приведенные в диссертации, получены впервые и лично автором. Основные положения диссертации докладывались на научных семинарах, всероссийских и международных конференциях и опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК РФ или входящих в системы Web Of Science или Scopus. Автореферат диссертации полностью отражает содержание диссертации. Отмеченные выше замечания не снижают общей высокой оценки результатов диссертации.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертация В.О. Подрыги «Многомасштабное численное моделирование течений газа в каналах технических микросистем» соответствует требованиям ВАК Российской Федерации, предъявляемым к докторским диссертациям по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», а ее автор В.О. Подрыга заслуживает присуждения ей ученой степени доктора физико-математических наук.

Доктор физико-математических наук,  
научный сотрудник отдела

Мартыненко Сергей Иванович

01.06.2017

«Специальные авиационные двигатели и химмотология»,

ФГУП «ЦИАМ им. П.И. Баранова»

[Martynenko@ciam.ru](mailto:Martynenko@ciam.ru)

тел. 8(495) 362-00-23

специальность докторской диссертации – 05.13.18 («Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»)

**Подпись С.И. Мартыненко заверяю**

Учёный секретарь ФГУП «ЦИАМ им. П.И. Баранова»,

доктор экономических наук, доцент

Екатерина Викторовна Джамай



Федеральное государственное унитарное предприятие

«Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова»

111116 г. Москва, ул. Авиамоторная, 2. Тел. (495)-362-40-25

[www.ciam.ru](http://www.ciam.ru)