

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 004.036.01 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ
ПЕРМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
(ФИЛИАЛ – ИНСТИТУТ МЕХАНИКИ СПЛОШНЫХ СРЕД)
УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК
аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 03.03.2022 № 88

О присуждении Прокопьеву Сергею Анатольевичу, гражданину России, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Моделирование одно- и двухфазных течений бинарных и трехкомпонентных жидких сред» по специальности 1.1.9 (01.02.05) «Механика жидкости, газа и плазмы» принята к защите 28.12.2021, протокол № 86, диссертационным советом Д 004.036.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермский федеральный исследовательский центр (филиал – Институт механики сплошных сред) Уральского отделения Российской академии наук, 614013, г. Пермь, ул. Академика Королева, д. 1, утвержденным приказом Минобрнауки России № 87/нк от 26 января 2018 г.

Соискатель Прокопьев Сергей Анатольевич 1992 г. рождения, в 2017 г. окончил ФГБОУ ВО "Пермский государственный национальный исследовательский университет" по направлению «Физика». В 2021 г. окончил аспирантуру очной формы обучения в Институте механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук (ИМСС УрО РАН) по научной специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы. В настоящее время работает младшим научным сотрудником лаборатории технологической гидродинамики ИМСС УрО РАН. Диссертация выполнена в ИМСС УрО РАН – филиале ФГБУН "Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук".

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор, заведующая лабораторией вычислительной гидродинамики ИМСС УрО РАН Любимова Татьяна Петровна.

Официальные оппоненты:

1. Демёхин Евгений Афанасьевич, доктор физико-математических наук (01.02.05), профессор кафедры математики и информатики ФГБОУ ВО "Финансовый университет при правительстве РФ (Краснодарский филиал)", г. Краснодар;
 2. Полежаев Денис Александрович, кандидат физико-математических наук (01.02.05), ФГБОУ ВО "Пермский государственный гуманитарно-педагогический университет", доцент кафедры физики и технологии, г. Пермь;
- дали положительные отзывы на диссертацию

Ведущая организация: Федеральное государственное учреждение "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук", г. Москва, в своем положительном заключении, составленном главным научным сотрудником, и.о. заведующего отделом № 11, д.ф.-м.н. Н.П. Галаниным; ведущим научным сотрудником отдела № 11, д.ф.-м.н. О.С. Мажоровой и утвержденном директором ИПМ РАН, чл.-корреспондентом РАН,

д.ф.-м.н., профессором А.И. Аптекаревым, указала, что диссертация является законченным научным исследованием, содержащим новые результаты в области математического моделирования гидродинамических процессов в многокомпонентных средах. Задачи, решаемые в работе, являются актуальными, обладают научной новизной и практической значимостью. Результаты диссертации докладывались на многочисленных конференциях и изложены в рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК. Представленная диссертационная работа «Моделирование одно- и двухфазных течений бинарных и трехкомпонентных жидких сред» удовлетворяет требованиям Положения «О присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением правительства РФ №842 от 24.09.2013, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Прокопьев Сергей Анатольевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы.

Соискателем опубликовано 8 статей в ведущих рецензируемых журналах, входящих в перечень, рекомендованный ВАК:

1. Lyubimova T., Vorobev A., **Prokopen S.** Rayleigh-Taylor instability of a miscible interface in a confined domain // *Physics of Fluids*. 2019. Vol. 31, № 1. P. 014104.

Численно исследована неустойчивость Релея-Тейлора при условии, что первоначально компоненты двухслойной системы не находятся в состоянии термодинамического равновесия.

2. **Prokopen S.**, Vorobev A., Lyubimova T. Phase-field modeling of an immiscible liquid/liquid displacement in a capillary // *Physical Review E*. 2019. Vol. 99, № 3. P. 033113.

Численно в рамках теории фазового поля исследована динамика вытеснения одной жидкости другой, несмешивающейся с первой, в капилляре

3. Vorobev A., **Prokopen S.**, Lyubimova T. Phase-field modelling of a liquid/liquid immiscible displacement through a network of capillaries // *Journal of Computational Physics*. 2020. Vol. 421. P. 109747.

Численно в рамках теории фазового поля исследована динамика вытеснения в сети капилляров, представляющей собой пористую среду на микромасштабе; представлен численный алгоритм расчёта на графических процессорах.

4. Vorobev A., **Prokopen S.** Lyubimova T. Nonequilibrium capillary pressure of a miscible meniscus // *Langmuir*. 2021. Vol. 37, № 16. P. 4817-4826.

Численно в рамках теории фазового поля исследована динамика вытеснения одной жидкости другой, смешивающейся с первой, в капилляре при учете неравновесных капиллярного давления и поверхностного натяжения.

5. Lyubimova T.P., Sadilov E.S., **Prokopen S.A.** Onset of Soret-induced convection in a horizontal layer of ternary fluid with fixed vertical heat flux at the boundaries // *The European Physical Journal E*. 2017. Vol. 40. P. 15.

Проведен линейный анализ устойчивости задачи механического равновесия трехкомпонентных смесей с эффектом Соре в плоском слое при заданном тепловом потоке через границы.

6. Lyubimova T.P., **Prokopen S.A.** Nonlinear regimes of Soret-driven convection of ternary fluid with fixed vertical heat flux at the boundaries // *The European Physical Journal E*. 2019. Vol. 42. P. 76.

Численно исследованы нелинейные режимы конвекции трехкомпонентных смесей с эффектом Sore в плоском слое при заданном тепловом потоке через границы.

7. Lyubimova T., Prokopen S., Shevtsova V. Behaviour of a ternary mixture with the net separation ratio close to zero // Journal of Physics: Conference Series. 2021. Vol. 1945. P. 012030.

Численно исследовано механическое равновесие смеси толуол-метанол-циклогексан с суммарным отношением, близким к нулю, в замкнутой ячейке при подогреве сверху.

8. Prokopen S., Lyubimova T., Mialdun A., Shevtsova V. A ternary mixture at the border of Soret separation stability // Physical Chemistry Chemical Physics. 2021. Vol. 23. P. 8466-8477.

Численно исследовано механическое равновесие смеси толуол-метанол-циклогексан с суммарным отношением, близким к нулю, в замкнутой ячейке при подогреве сверху, изучено влияние начальных условий, проведено сравнение с экспериментом.

Публикации содержат в сумме 101 страницу и в полной мере отражают основные научные результаты работы. Недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах в тексте диссертации отсутствуют.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы: от оппонентов и ведущей организации.

1. Положительный отзыв официального оппонента Демёхина Е.А. В отзыве отмечено, что актуальность диссертации обусловлена необходимостью улучшения понимания различий между однофазными и двухфазными средами, реализованные алгоритмы расчета имеют перспективы дальнейшего применения при решении различных задач гидродинамики, полученные результаты имеют высокий научный уровень. Оппонент отмечает следующие замечания по диссертации и автореферату:

- замечание о том, что в тексте диссертации присутствуют редко используемые математические символы. Например, в уравнении 1.8 присутствует тензорное произведение векторов. Было бы полезно явно об этом упомянуть в тексте; некоторые рисунки в диссертации выглядят неоправданно большими;
- замечание о том, что непонятны роль и место задачи неустойчивости Релея-Гейлора методом фазового поля в рассматриваемой диссертации и почему были выбраны другие система обезразмеривания, функция свободной энергии и численный алгоритм;
- замечание о том, что при объяснении результатов моделирования смеси толуол-метанол-циклогексан не приводятся сравнительных данных о параметрах других смесей, в большинстве которых, как молчаливо подразумевается в диссертации, коэффициенты кросс-диффузии малы;
- пожелание о том, что было бы полезно более подробно описать методику получения показателя преломления и возникающие при этом сложности; при сравнении полей показателя преломления теоретических и экспериментальных данных было бы более наглядно выбрать одинаковую шкалу единиц;
- замечание о том, что в работе присутствует незначительное количество орфографических и пунктуационных ошибок; математические формулы в ряде случаев написаны небрежно, например, во второй главе ряд выражений для потоков обозначены полужирным шрифтом, тогда как в других случаях шрифт обычный.

2. Положительный отзыв официального оппонента Полежаева Д.А. В отзыве представлен анализ содержания диссертации, отмечается актуальность темы диссертации, обоснованность и достоверность результатов и выводов, новизна, практическая и теоретическая значимость, ценность для научного сообщества и перспективу применения в технологических приложениях. Оппонент отмечает следующие замечания:

- замечание о том, что на стр. 29 вводятся параметры фазового поля, среди которых присутствует параметр ε , физический смысл которого не раскрыт;
- вопрос о том, какое можно дать объяснение образованию вихрей вблизи межфазной границе на рис. 1.8 и известны ли экспериментальные свидетельства этому явлению;
- вопрос о том, почему в задаче неустойчивости Релея-Тейлора коэффициент поверхностного натяжения меняется со временем немонотонным образом;
- вопрос о том, какой физический смысл имеют синие линии на рис. 1.26;
- вопрос о том, чем объясняется такое сложно начальное распределение концентрации в задаче об изучении неустойчивости Релея-Тейлора (формула 1.52);
- замечание о том, что в тексте присутствуют неточности и опечатки, в частности, в первой главе в выражениях вида «см. рис.» между словами написана лишняя запятая; другой пример – в тексте по-разному написана одна и та же фамилия: Релей или Рэлей;

3. Положительный отзыв ведущей организации. В отзыве отмечается, что диссертация представляет собой законченную научно-исследовательскую работу в области математического моделирования гидродинамических процессов в многокомпонентных средах. Полученные результаты имеют как фундаментальное значение, так и существенную практическую значимость – результаты могут быть использованы в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Институте проблем механики им. А.Ю. Ишлинского, НИИ механики МГУ им. М.В. Ломоносова, ПГТУ им. Н.Э. Баумана.

Ведущая организация отмечает следующие замечания:

- замечание, что в диссертации используются разностные схемы сравнительно невысокого качества и возникает сомнение в выполнимости законов сохранения энергии, массы, завихренности;
- замечание о том, что аппроксимация граничных условий, описанная в приложении, не согласована с аппроксимацией уравнений во внутренних узлах, что приводит к снижению точности алгоритма; избежать серьезных ошибок удастся благодаря проведению расчетов на подробных сетках, что будет сделать значительно сложнее в областях большего размера или в трехмерных расчетах.

На автореферат поступило 7 отзывов:

1. Положительный отзыв от Жукова М.Ю., д.ф.-м.н., профессора, заведующего кафедрой вычислительной математики и математической физики Института математики, механики и компьютерных наук им. И.И.Воровича ФГАОУ ВО "Южный федеральный университет", г. Ростов-на-Дону (без замечаний);
2. Положительный отзыв от Кривилева М.Д., д.ф.-м.н., заведующего лабораторией физики конденсированных сред; и Груздь С.В., к.ф.-м.н., научного сотрудника лаборатории физики конденсированных сред ФГБОУ ВО "Удмуртский государственный университет", г. Ижевск (без замечаний);

3. Положительный отзыв от Перминова А.В., д.ф.-м.н., доцента, заведующего кафедрой общей физики ФГАОУ ВО "Пермский национальный исследовательский политехнический университет", г. Пермь (1 замечание);
4. Положительный отзыв от Рыжкова И.Г., д.ф.-м.н., ведущего научного сотрудника Института вычислительного моделирования ФГБУН "Красноярский научный центр СО РАН", г. Красноярск (1 замечание);
5. Положительный отзыв от Самойловой А.В., к.ф.-м.н., доцента кафедры теоретической физики ФГАОУ ВО "Пермский государственный национальный исследовательский", г. Пермь (1 замечание);
6. Положительный отзыв от Соболевой Е.Б., д.ф.-м.н., ведущего научного сотрудника лаборатории механики сложных жидкостей ФГБУН "Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН", г. Москва (2 замечания);
7. Положительный отзыв от Чеверды В.В., к.ф.-м.н., заведующего лабораторией энергоэффективных технологий для наземных и космических применений ФГБУН "Институт теплофизики им. Кутателадзе РАН", г. Новосибирск (3 замечания).

В отзывах на автореферат содержатся следующие замечания:

- замечание о том, что в задаче о неустойчивости Релея-Тейлора неясно, как определяется масштаб скорости при обезразмеривании параметров;
- замечание о том, что используемый параметр M , называемый числом Маха, не соответствует классическому определению в гидродинамике;
- замечание о том, что в автореферате в ряде случаев плохо описана постановка задачи;
- вопрос об учете контактных углов при моделировании в капилляре, а также вопрос, что подразумевается под одиночным капилляром;
- замечание о том, что не указаны размеры численной сетки и сходимость результатов при ее уточнении;
- замечание об отсутствии доказательств использования численного моделирования;
- замечание о неясности физического смысла константы капиллярности;
- замечание об отсутствии сравнения полученных теоретических результатов с экспериментальными данными.

В отзывах отмечено, что диссертация является законченным исследованием и представляет научный интерес, прошла достаточную апробацию, содержит новые результаты, достоверность которых обоснована, тема работы является актуальной, результаты имеют высокую научную ценность и большое прикладное значение.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается следующим:

официальные оппоненты являются одними из ведущих специалистов в области физики, механики жидкости и газа, имеют большое число публикации с результатами теоретических и экспериментальных исследований; обладают достаточной квалификацией, позволяющей оценить новизну представленных на защиту результатов, их научную и практическую значимость, обоснованность и достоверность полученных выводов;

ведущая организация ФИЦ Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН является одним из ведущих научных центров в области прикладной математики и математического моделирования, в нем активно ведутся фундаментальные и

прикладные исследования по физике плазмы, механике жидкости и газа, управлению термоядерного синтеза, математической биологии, робототехнике. Разрабатываются численные схемы и алгоритмы. Ведутся работы по созданию распределенных вычислительных систем на основе объединения нескольких суперкомпьютеров. В Институте работают 2 совета, принимающие к защите диссертации в области физико-математических наук по 5 специальностям. Институт является учредителем 5 научных журналов.

Отзыв ведущей организации, содержащий подробную, по главам, характеристику содержания диссертационной работы; высокую положительную оценку актуальности темы исследования, достоверности, новизны, теоретической и практической значимости изложенных результатов обсужден и одобрен на заседании научного семинара "Вычислительные методы и математическое моделирование" им. Ю.П. Попова ИПМ РАН в присутствии признанных авторитетных специалистов по теме защищаемой диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана методика численного исследования течений гетерогенных и неоднородных гомогенных жидких сред, не находящихся в состоянии термодинамического равновесия, в условиях, когда степень смешения компонентов зависит от стадии рассматриваемого процесса;

предложены оригинальные численные алгоритмы, адаптированные для расчетов на графических процессорах и позволяющие на два порядка ускорить выполнение прямого численного моделирования;

доказана необходимость учета неравновесного капиллярного давления и частичной смешиваемости компонентов при анализе процессов в многофазных средах;

введена классификация установившихся режимов течения в капилляре и режимов конвекции смесей в условиях заданного теплового потока на границах.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

Доказано, что:

– неравновесные капиллярное давление и поверхностное натяжение оказывают существенное влияние на динамику систем со смешивающимися компонентами даже в тех случаях, когда в состоянии термодинамического равновесия жидкость является гомогенной;

– с помощью теории фазового поля возможно эффективно оценить значение капиллярного давления;

– при рассмотрении конвекции трехкомпонентных смесей в условиях заданного теплового потока наиболее опасными являются возмущения с максимально возможной длиной волны;

– в трехкомпонентных смесях с близким к нулю значением суммарного отношения разделения развитие конвекции вблизи границы устойчивости определяется на начальных этапах совместным действием диффузии, перекрестной диффузии и термодиффузии.

Применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов):

использован комплекс численных методов моделирования гидродинамических процессов и современные технологии параллельного программирования;

изложены результаты решения линейных и нелинейных задач тепло- и массообмена в неравновесных средах при различной смешиваемости компонентов;

раскрыты преимущества используемого подхода к решению задач межфазной гидродинамики, в которых учитывается эффект неравновесного капиллярного давления;

изучено влияние процессов диффузии и теплопроводности на характер протекания гидродинамических процессов в гомогенных и гетерогенных средах;

проведена модернизация алгоритмов численного исследования течений неоднородных по составу жидких сред.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработана и внедрена методика прямого численного моделирования конвекции трехкомпонентных смесей, позволившая подтвердить корректность измерений коэффициентов диффузии и термодиффузии в рамках эксперимента DCMIX (Diffusion coefficients in mixtures – «коэффициенты диффузии в смесях») на Международной космической станции;

определены пределы применимости использованных математических моделей и численных алгоритмов;

создана программа для численного исследования эволюции многокомпонентных жидких сред, адаптированная для высокопроизводительных вычислений на графических процессорах;

представлены рекомендации для эффективного управления процессами вытеснения при движении в капиллярах и процессами конвективного тепло- и массообмена в сосудах с низкой теплопроводностью окружающих массивов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

теория построена на известных и проверяемых приближениях и моделях механики жидкости и газа;

идея базируется на обобщении имеющегося опыта теоретического и численного исследования течений неоднородных жидкостей;

использовано сравнение полученных результатов численных расчетов с известными экспериментальными данными и аналитическими решениями;

установлено качественное и количественное согласие результатов, полученных с помощью различных численных методов, а также соответствие известным из литературы результатам теоретических и экспериментальных исследований в предельных случаях;

использованы апробированные численные методы и современная программно-аппаратная архитектура параллельных вычислений.

Личный вклад соискателя состоит в участии в постановке задач, разработке и отладке вычислительных программ, выполнении моделирования изучаемых процессов, анализе полученных результатов и подготовке публикаций.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи (проблемы) и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследования, концептуальности и взаимосвязи основных выводов. Диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует требованиям п. 9 "Положения о присуждении ученых степеней" № 842, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г.: в ней содержится решение задач математического моделирования течений двухфазных и неоднородных однофазных жидких сред в зависимости от осложняющих факторов.

На заседании 03 марта 2022 г. диссертационный совет принял решение присудить Прокопьеву С.А. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человека, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящего в состав совета, дополнительно введено на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за – 14, против – 0, не проголосовало – 0.

Председатель
диссертационного совета Д 004.036.01
д.т.н., профессор, академик РАН
Матвеев Валерий Павлович

 / Матвеев В.П.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 004.036.01
д.ф.-м.н., доцент
Зуев Андрей Леонидович

 / Зуев А.Л.

04 марта 2022 г.

