

**Рецензия на дипломную работу
Баялиной Дарины Куанышевны
“Расчет сечений диссоциации с помощью обратного преобразования Лапласа”**

Работа посвящена получению аналитических формул сечений диссоциации на основе известных поуровневых коэффициентов скоростей диссоциации молекул азота и кислорода (при столкновении с атомами азота и кислорода соответственно) при помощи применения к коэффициентам скоростей обратного преобразования Лапласа. Для этого сначала подбирается подходящая аппроксимация поуровневых коэффициентов, чтобы возможно было применить обратное преобразование Лапласа и получить при этом корректные с физической точки зрения сечения, т.е. неотрицательные во всем диапазоне энергий. В дальнейшем полученные таким образом сечения диссоциации сравниваются с сечениями, получающимися по модели твердых сфер, которые не зависят от номера колебательного уровня и, как показано в работе, довольно грубо описывают процесс диссоциации.

Полученные в работе сечения диссоциации могут быть использованы при решении задач неравновесной азротермодинамики, в частности, методом прямого статистического моделирования (ПСМ). А сам подход может быть обобщен и на другие столкновительные процессы для получения необходимых в методе ПСМ вероятностей.

Работа написана ясным языком, хорошо структурирована и оформлена, содержит большое количество графического материала и достаточно подробные пояснения полученных результатов. Содержание работы полностью соответствует заявленной теме.

К работе имеются некоторые вопросы и замечания:

1. Коэффициенты, приведенные в таблице 4 (последняя строка), не соответствуют графику на Рис. 8: коэффициент C_{2i} для уровня $i=40$, который вычисляется как полином от i с коэффициентами из таблицы, получается отрицательный, а на графике итоговая скорость реакции положительна. Вероятно, коэффициенты в таблице приведены с ошибкой.

2. В формулах (13) и (14) для сечений диссоциации азота и кислорода есть некоторые опечатки:

- в формуле (13) лишний множитель k у коэффициента C_{1i} ;

- в формуле (14) пропущен модуль у коэффициента C_{1i} (в трех местах). Этот коэффициент отрицательный, что можно проверить по формуле (12), а при корректном применении обратного преобразования Лапласа появится либо модуль, либо “минус” перед коэффициентом. Однако, судя по графику на Рис. 10, это было учтено.

3. В таблице 2 в заголовке опечатка: приведены коэффициенты C_{2i} , а не C_{1i} .

4. До конца не очень ясно, почему аппроксимации коэффициентов скорости диссоциации азота и кислорода отличаются друг от друга и были выбраны именно в таком виде: степень температуры в случае азота $-1/4$, а в случае кислорода $-1/10$; множитель C_{2i} в случае азота выражается полиномом 3-й степени от i , а в случае кислорода - полиномом 4-ой степени; коэффициент C_{1i} в экспоненте в случае азота зависит от i ступенчато, а в случае кислорода – полиномиально.

5. Не очень удачно выбрано название параграфа 1.3 “Метод расчета”. В этом параграфе излагается, как применять обратное преобразование Лапласа аналитически, а не численно.

В целом, указанные замечания незначительны и не снижают общей высокой оценки работы. Считаю, что дипломная работа Д.К. Баялиной соответствует требованиям и заслуживает оценки “отлично”.

16 мая 2016 г.

Рецензент:

А.Н. Молчанова

м.н.с. лаб. вычислительной аэродинамики ИТПМ СО РАН

