

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОММИСИИ

диссертационного совета Д 003.035.02 при ИТПМ СО РАН

о диссертационной работе Лаврука Сергея Андреевича

«Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы

Диссертация Лаврука Сергея Андреевича «Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, посвящена численному моделированию процессов плавления и распространения детонации в газовзвесах ультрадисперсных частиц металлов. Целью исследования является анализ влияния аппроксимаций теплофизических характеристик частиц на результаты расчетов процессов плавления и структуры волн детонации, а также выявление различий в процессах распространения детонации взвесей частиц алюминия микронного и нанометрового диапазона частиц в объемах сложной геометрии.

В диссертации были поставлены и решены следующие задачи:

1. С помощью методов молекулярной динамики исследованы процессы плавления наночастиц некоторых металлов и определены их теплофизические свойства;
2. Исследовано влияние способа представления коэффициента теплоемкости на результаты расчетов плавления наночастиц металлов, полученные в рамках феноменологических моделей;
3. Исследовано влияние способа представления коэффициента теплоемкости частиц на результаты расчетов детонации в микродисперсных и нанодисперсных взвесах частиц алюминия;
4. На основе численного моделирования процессов распространения гетерогенной детонации в каналах с линейным расширением в газовзвесах частиц алюминия микронного или нанометрового размера определены основные характеристики течений и критические условия распространения.

В диссертации получены следующие основные результаты:

1. Разработан алгоритм расчета плавления и кристаллизации наночастиц металлов (золота, железа и алюминия) на основе методов молекулярной динамики. Предложен способ определения коэффициентов теплоемкости наночастиц на основе анализа калорических кривых. Определены аппроксимационные зависимости коэффициентов теплоемкости наночастиц и объемного материала от температуры;
2. В феноменологическом моделировании процессов плавления установлено, что использование различных моделей для описания коэффициентов теплоемкости (объемного материала, либо зависящего от размера наночастиц) не влияет на времена плавления и распределение температур внутри наночастиц алюминия и золота. Для наночастиц железа времена плавления различаются практически в два раза, распределение температур сильно отклоняется от линейной функции. Дано физическое обоснование этому факту, связанное с существенными различиями теплоемкости наночастиц и объемного материала железа;
3. В феноменологическом моделировании детонационного горения взвесей микроразмерных и наноразмерных частиц алюминия в рамках полуэмпирической модели приведенной кинетики эффект зависимости теплоемкости от температуры во времена задержки воспламенения и структурах детонации не выявлен, что позволило для дальнейших расчетов принять модель с постоянным значением теплоемкости;
4. Методами численного моделирования двумерных течений детонации в газовзвесах частиц алюминия в рамках кинетики, учитывающей переходной характер режима горения от диффузионного к кинетическому, исследованы процессы распространения детонации в расширяющихся каналах. Установлено влияние геометрических параметров: ширины канала, угла расширения, размера частиц на режимы распространения детонации в расширяющихся каналах. Для взвесей микроразмерных частиц определена немонотонная зависимость критической ширины канала, обеспечивающей восстановление детонации, от угла расширения. Для взвесей наноразмерных частиц установлена промежуточная зависимость между газовой детонацией и гетерогенной детонацией микронных частиц.

Рассмотрев содержание диссертации и автореферата, комиссия пришла к выводу, что тема диссертации, а также ее содержание, соответствуют научной специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы.

По теме диссертации опубликовано 10 работ, в том числе 4 статьи в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК. Основные результаты были представлены на 7 российских и 6 международных конференциях. Таким образом, полученные соискателем ученой степени результаты в полной мере представлены в отечественных и зарубежных изданиях, Требования к публикациям, предусмотренные пунктами 11, 13 «Положения о присуждении ученых степеней», соблюдены.

Все результаты, представленные в работе, получены при участии автора. Автору принадлежит: разработка и доработка программных кодов при моделировании ММД плавления частиц металлов, феноменологических подходов, а также исследовании детонационного горения частиц алюминия в областях сложной геометрии, проведение вычислительных экспериментов и анализ результатов. Материалы других авторов, использованные в диссертации Лаврука Сергея Андреевича, во всех случаях содержат ссылку на источник и удовлетворяют требованиям пункта 14 «Положения о присуждении ученых степеней».

Экспертная комиссия рекомендует принять к защите диссертационную работу Лаврука Сергея Андреевича «Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов» по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы.

Председатель комиссии:

д.ф.-м.н

Гапонов С. А.

Члены комиссии:

д.ф.-м.н

Бойко В. М.

д.ф.-м.н

Ковалев О. Б.