

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Лаврука Сергея Андреевича "Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов", представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 - Механика жидкости, газа и плазмы.

Исследования детонационного горения газовых и гетерогенных систем являются одним из важных разделов науки – механики и физики горения и взрыва. Проблемы прогнозирования и предотвращения взрывных явлений в дисперсных средах (взрывы металлических порошков в промышленности при их производстве и транспортировке) еще далеки от полного решения. Неполнота фундаментальных знаний о физических механизмах, обуславливающих инициирование и распространение взрывных и детонационных волн в пылевых облаках микро- и наночастиц металлов, ограничивает спектр решаемых прикладных задач и разработку адекватных технологических решений.

Отметим, что в последние два десятилетия к проблеме эффективного детонационного сжигания различных топлив наблюдается повышенный интерес специалистов в различных организациях США, Китая, Франции, Японии, России и др. стран; в связи с разработкой научных основ процессов, использующих детонационные превращения в энергетических и двигательных установках.

Решение указанных задач требует настойчивых экспериментальных и теоретических исследований гетерогенной детонации в каналах различной геометрии, осмысления и обобщения полученных результатов, однозначных выводов о целесообразности и области применения детонационного сжигания различных двухфазных топлив в реальных системах. Поэтому тема диссертации представляется **актуальной**. В ней, основываясь на математических моделях предшественников, в первую очередь на работах В.М. Фомина, А.В. Федорова и Т.А. Хмель, выполнен анализ влияния способа определения теплофизических характеристик наночастиц металлов на результаты расчетов процессов плавления и структуры волн гетерогенной детонации, а также выявление различий в процессах распространения детонации взвесей частиц алюминия микронного и нанометрового диапазона в канале с линейным расширением на основе численного моделирования двумерных нестационарных течений в рамках механики реагирующих гетерогенных сред.

Говоря о **теоретической и практической значимости** результатов, полученных методами молекулярной динамики, то они могут быть использованы для оценочных расчетов времени и температуры плавления частиц в диапазоне от 5 до 15 нм с помощью феноменологических моделей. Исследование детонационного горения с учетом теплофизических

характеристик показало слабое влияние расширенной модели зависимости теплоемкости от температуры на структуру детонационной волны.

**Практическая** же ценность работы определяется возможностью использования примененных численных методов для исследования детонационных течений в ультрадисперсных газовзвесах частиц алюминия, позволяющих улучшить понимание физики процессов и данных о критических условиях распространения гетерогенной детонации в областях сложной геометрии. Полученные результаты могут применяться для проектирования трактов каналов технических устройств, предполагающих как развитие и распространение детонации, так и ее подавление или предотвращение.

Все положения выводы и рекомендации, сделанные автором диссертации хорошо обоснованы. **Достоверность результатов** основана на использовании признанных физических моделей и корректного математического аппарата, подтверждается верификацией результатов сопоставлением с данными других авторов и сравнением с экспериментальными данными. Для обоснования точности численных результатов моделирование проводилось на различных расчетных сетках с подтверждением повторяемости.

**Научная новизна** диссертационного исследования определяется применением комплексного подхода к исследованию задач плавления и детонации частиц в диапазоне размеров от 10 нм до 3.5 мкм, объединяющему методы молекулярной динамики и феноменологические модели. В диссертации рассматривается вопрос применимости зависимостей теплофизических характеристик от температуры и размера частиц, в частности, полученных методом молекулярной динамики, в расчетах процессов плавления и детонации. Также проводится анализ картин течения и критических условий распространения детонации газовзвесей микро- и наночастиц алюминия в кислороде в каналах сложной геометрии.

На мой взгляд, следует согласиться с автором, говорящим о **новизне** следующих результатов:

- методика анализа процессов плавления и определения коэффициентов теплоемкости наночастиц металлов в рамках моделирования методами молекулярной динамики; параметрические исследования плавления наночастиц металлов, показавшие зависимость расчетного времени плавления и распределения температур внутри частиц от способа задания коэффициента теплоемкости;

- впервые проведены параметрические исследования детонации газовзвеси микро- и наночастиц алюминия в кислороде стехиометрического состава при варьировании способа задания коэффициента теплоемкости;

- впервые выполнено численное моделирование процессов распространения гетерогенной детонации в стехиометрических взвесах микро- и наноразмерных частиц алюминия в кислороде в плоских каналах с линейным расширением (картины течения в различных режимах, критерии распространения).

Возвращаясь к структуре диссертационной работы и краткому изложению ее содержания, отмечу наиболее удачные разделы и не оставлю без внимания некоторые недостатки.

Диссертация С.А. Лаврука состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы, содержит 117 страниц, включая 39 рисунков, 6 таблиц.

**Введение** содержит литературный обзор теоретических и экспериментальных работ в рассматриваемой диссертантом проблемной области динамики ультрадисперсных частиц металлов. Проанализированы различные методы изучения физических процессов в дисперсных средах для описания фазовых переходов, горения и детонации: методы молекулярной динамики, методы численного моделирования в рамках феноменологических подходов, методы механики взаимопроникающих континуумов.

**Первая глава** посвящена результатам моделирования нагрева и плавления наночастиц металлов (золота, железа и алюминия) на основе использования методов молекулярной динамики. Для описания указанных процессов, происходящих на атомно-молекулярном уровне, в п. 1.1 сформулированы основные уравнения движения системы из  $N$  атомов, для замыкания которых применяется потенциал внедренного атома, основанный на потенциале Финниса-Синклера. При соответствующих начальных условиях и условиях на свободной границе наночастиц решалась задача об их нагреве. Расчеты автор проводил с использованием пакета прикладных программ LAMMPS.

Сначала, с целью отработки методики, было проведено моделирование задачи о нагреве наночастиц золота (радиусом 2-10 нм), получена зависимость температуры плавления от радиуса частиц, которая коррелирует с экспериментами данными. Согласно данным табл. 1.2 с ростом радиуса наночастиц до 10 нм, число атомов увеличивается до  $N = 261560$ , а время расчета одного варианта до 12 часов. Затем моделирование расширено на новые объекты наночастицы железа и алюминия. В результате трудоемких расчетов получены новые данные о теплофизических параметрах (температуры плавления в зависимости от радиуса частиц, теплоемкости) и проведено сравнение с данными, опубликованными в литературе. Аппроксимационные зависимости теплоемкости наночастиц далее использованы автором в расчетах по феноменологическим моделям.

Во **второй главе** рассматриваются задачи о нагреве и плавлении частиц золота, железа и алюминия, помещенных в высокотемпературное поле, в рамках феноменологического подхода с применением полученных в гл. 1 данных о теплофизических характеристиках, зависящих от размера наночастиц. На основе методики Федорова А.В. и Шульгина А.В. [82], основанной на решении однофазной задачи Стефана, соискателем проведено численное исследование влияния представления коэффициента теплоемкости на процесс плавления наночастиц. Скрупулезный анализ результатов расчетов задачи Стефана для трех представлений зависимостей теплоемкости от температуры показал, что для частиц железа (6 нм) – учет зависимости теплоемкости от температуры приводит к увеличению времени их плавления



в два раза, а для наночастиц золота (6 нм) и алюминия (6 нм) - способ представления теплоемкости слабо влияет на времена плавления. Последний результат служит обоснованием возможности не учитывать переменность теплоемкости наночастиц алюминия в полуэмпирических моделях.

Далее сформулирована замкнутая физико-математическая модель и численно решена стационарная задача о структуре детонации Чепмена-Жуге взвесей микро- и наночастиц алюминия в кислороде (диаметрами 50 нм, 100 нм и 1 мкм) при трех способах представления коэффициента теплоемкости частиц. Для описания кинетических процессов за основу принята модель воспламенения и приведенной кинетики горения алюминия Федорова А.В., Хмель Т.А. [59]. Анализ проведенных расчетов структуры стационарной детонационной волны для исследованных способов представления коэффициента теплоемкости частиц показал, что различия в параметрах детонационной волны не превышают 5%.

Итогом данной главы являются не только результаты расчетов структуры детонации с переменной теплоемкостью частиц алюминия, но и обоснование возможности применения, с указанной выше точностью, постоянного коэффициента теплоемкости частиц в математической модели детонации.

Наиболее сильными и интересными, с моей точки зрения, являются результаты **третьей главы** по многопараметрическому численному исследованию задачи о динамике выхода гетерогенной детонации газозвеси частиц алюминия из плоского канала в канал с линейным расширением.

На основе двумерных нестационарных уравнений механики двухфазных реагирующих сред в п. 3.2 формулируется математическая модель гетерогенной детонации микро- и нанодисперсных взвесей частиц алюминия в кислороде. Замыкание модели горения частиц алюминия опирается на известные работы научных руководителей соискателя, в которых при уменьшении диаметра частиц учитывается переход от диффузионного к кинетическому механизму горения.

Численная реализация канала с линейным расширением потребовала доработки алгоритма и программного кода, а именно, специальной организации расчетной сетки, так чтобы узлы сетки находились на стенке расширяющегося канала. Проверка численного метода на вложенных сетках позволила приступить С.А. Лавруку к серии очень трудоемких расчетов сформулированной задачи, в которых варьировались: ширина узкой части канала  $H = (0.005 - 0.1)$  м, угол расширения канала  $\alpha = (15 - 60)^\circ$  и размер частиц алюминия  $d = (0.2 - 3.5)$  мкм.

В результате впервые удалось получить и проанализировать докритические и сверхкритические режимы гетерогенной детонации взвесей микрочастиц алюминия в расширяющейся части канала. Подробно описана динамика формирования поперечных волн и ячеистой структуры детонации для сверхкритических режимов, а также переход к докритическим режимам при уменьшении ширины канала. Установлены общие свойства с соответствующими процессами в реагирующих газах. Выявлены и отличия, связанные с размерами частиц дисперсной фазы.

Из массива расчетов для микронных частиц (диаметром 2-3.5 мкм) и субмикронных частиц (диаметром 400 и 200 нм) построены и проанализированы карты режимов течения в переменных ширина плоского канала – угол расширения. Установлено влияние геометрических параметров: ширины канала, угла расширения, размера частиц на режимы распространения. Численно получен эффект немонотонности критической ширины канала от диаметра субмикронных частиц (рис. 3.16). Так, согласно расчетным данным, для одинаковых углов расширения канала  $\alpha$  при диаметре частиц 400 нм критическая ширина канала в 1.5-2 раза меньше, чем для частиц диаметром 200 нм. К сожалению, в п. 3.4 нет объяснения, почему это происходит? Существование этого эффекта еще ждет своего экспериментального подтверждения.

**В заключении** сформулированы основные результаты диссертации.

При решении поставленных задач С.А. Лаврук применял методы молекулярной динамики, численного моделирования в рамках феноменологических подходов и механики взаимопроникающих континуумов. Диссертация содержит богатый иллюстративный материал в виде рисунков, графиков и таблиц, представительный список литературы. Автореферат написан достаточно подробно и правильно отражает все основные положения диссертации.

Сделаем несколько замечаний по тексту диссертации.

*Неточности в обозначениях и опечатки.*

(Стр. 24) – Здесь буквой  $\beta$  обозначен коэффициент пропорциональности в зависимости температуры плавления от радиуса частицы (формулы (1.3) и (1.4)), а на стр. 38 этой же буквой – коэффициент в аппроксимационной зависимости теплоемкости (формула 1.7).

Имеются опечатки в тексте (стр. 20, 23, 26, 38, 50, 52, 54, 56, 65, 70, 75, 84, 86, 90). На стр. 61 ссылка на работу [59] должна стоять перед формулой (2.10). На рис. 2.5а (справа) размерность скорости указана на три порядка меньшей. На стр. 75 в матрице правой части законов сохранения  $\Gamma$  не должно быть последнего слагаемого –  $\Gamma_3$ . На стр. 76 в матрице  $\Gamma_2$  во второй и третьей строке вместо символа  $f_2$  должно быть  $f_x$  и  $f_y$ , соответственно. На стр. 78 дается отсылка на формулы (3.8), (3.9). Это явная опечатка, так как таких формул в диссертации нет. В списке литературы десять статей из российских журналов «Физика горения и взрыва» и «Доклады академии наук» (номера: 55, 59, 82, 104, 108, 109, 120, 122, 123, 124) приведены на английском языке.

Отмеченные замечания не снижают общей положительной оценки, которая сложилась у меня после прочтения диссертационной работы. Автору удалось преодолеть существенные трудности, возникающие при реализации и отладке численных технологий. Проведен большой объем расчетов задач механики гетерогенных сред, особенно при многопараметрическом исследовании докритических и сверхкритических режимов выхода гетерогенной детонации газозвеси частиц алюминия из плоского канала в канал с линейным расширением.

Таким образом, диссертация С.А. Лаврука является завершенной научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором численных исследований получены новые знания о процессах плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов. Совокупность результатов, полученных в диссертации, соответствует паспорту специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы, имеет теоретический характер, выполнена на высоком научном уровне и содержит новые результаты в области механики гетерогенных систем, в том числе, динамики гетерогенной детонации взвесей микро- и наночастиц металлов.

Результаты работы были представлены на всероссийских и международных конференциях и с достаточной полнотой опубликованы в 10 печатных работах, из них 4 – в журналах, входящих в перечень ВАК РФ.

По актуальности, новизне и прикладной значимости диссертационная работа Сергея Андреевича Лаврука "Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов" удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата, согласно Положению о присуждении ученых степеней в текущей редакции, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – «Механика жидкости, газа и плазмы».

Официальный оппонент:

зав. лабораторией динамики гетерогенных систем  
Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН,  
доктор физико-математических наук по  
специальности 01.02.05 – «Механика жидкости, газа и плазмы»

Ждан Сергей Андреевич

«18» февраля 2021 г.

ФГБУН Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева  
Сибирского Отделения Российской академии наук  
630090, г. Новосибирск, проспект Лаврентьева, 15  
Раб. тел.: 8 (383) 333-22-89 Моб. тел. 8 913 741 49-58  
E-mail: zhdan@hydro.nsc.ru

на удостоверяю:  
ИГиЛ СО РАН

 /А.К. Хе/

Председателю  
диссертационного совета  
Д 003035.02  
академику В.М. Фомину

### ЛИЧНОЕ СОГЛАСИЕ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

Я, Ждан Сергей Андреевич, даю свое согласие выступить в качестве официального оппонента по диссертации Лаврука Сергея Андреевича на тему: Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы.

О себе сообщаю:

Ученая степень, отрасли науки	Д.ф.-м.н.
Научные специальности, по которым защищена диссертация	01.02.05 - механика жидкости, газа и плазмы
Ученое звание	С.н.с.
Академическое звание	
Тел:	8 (383) 333 22-89,
E-mail:	<a href="mailto:zhdan@hydro.nsc.ru">zhdan@hydro.nsc.ru</a>
Должность	Заведующий лабораторией
Подразделение организации	Лаборатория динамики гетерогенных систем
Полное наименование организации, являющейся основным местом работы	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук
Ведомственная принадлежность орг.	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Адрес служебный: Почтовый индекс, город, улица, дом	630090, Российская Федерация, г. Новосибирск, , просп. Академика Лаврентьева, д. 15
Web-сайт организации.	<a href="http://www.hydro.nsc.ru/">http://www.hydro.nsc.ru/</a>
Телефон организации.	8 (383) 333-16-12
E-mail организации.	<a href="mailto:igil@hydro.nsc.ru">igil@hydro.nsc.ru</a>

По теме рассматриваемой диссертации имею более 40 научных работ, в том числе в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 работ):

№	Авторы	Название	Издательство, журнал, год, №, страницы	Вид, год

1	Ждан С.А., Рыбников А.И., Симонов Е.В.	Моделирование непрерывной спиновой детонации водородо-воздушной смеси в кольцевой цилиндрической камере сгорания	Физика горения и взрыва. -2020, -Т. 56, № 2, - С. 95-106.	Статья, 2020
2	Быковский Ф.А., Ждан С.А., Ведерников Е.Ф. и др.	Continuous detonation of a hydrogen-oxygen gas mixture in a 100-mm plane-radial combustor with exhaustion toward the periphery	Shock Waves, 2020, V. 30, Iss. 3, p. 235-243	Статья, 2020
3	Быковский Ф.А., Ждан С.А., Ведерников Е.Ф.	Непрерывная детонация смеси жидкий керосин-воздух с добавкой водорода или синтез-газа.	Физика горения и взрыва. -2019, -Т. 55, № 5, - С. 83-92.	Статья, 2019
4	Ждан С.А., Рыбников А.И., Симонов Е.В.	Calculation of continuous spin detonation a hydrogen-air mixtures in an annular combustor.	AIP Conf. Proc. - 2018, Vol. 2027, Art. 030007 (8 p).	Статья, 2018
5	Быковский Ф.А., Ждан С.А., Ведерников Е.Ф.	Непрерывная детонация смесей метан/водород-воздух в кольцевой цилиндрической камере сгорания.	Физика горения и взрыва. -2018, -Т. 54, № 4, -С. 96-106.	Статья, 2018
6	Быковский Ф.А., Ждан С.А., Ведерников Е.Ф. Самсонов А.Н.	Масштабный фактор при непрерывной спиновой детонации смесей синтез-газ-воздух.	Физика горения и взрыва. -2017, -Т. 53, № 2, -С. 71-83.	Статья, 2017

Не являюсь членом экспертного совета ВАК

Согласен на включение моих персональных данных в аттестационное дело соискателя и их дальнейшую обработку.

26.01.2021г

/ Ждан С.А. /

Подпись  
зав. кафедрой  
Федерального государственного бюджетного  
учреждения науки  
Института гидроаэродинамики им. М.А.П.