

УТВЕРЖДАЮ
ФГБУН Института
прикладной механики
Христиановича СО РАН,
тематических наук,
_____ А.Н. Шиплюк
_____» 10 2020г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук.

Диссертация «Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов» выполнена в лаборатории №12 «Волновых процессов в ультрадисперсных средах» Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук.

В период подготовки диссертации соискатель Лаврук Сергей Андревич работал в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, в лаборатории №12 «Волновых процессов в ультрадисперсных средах» в должности старшего лаборанта с высшим профессиональным образованием и младшего научного сотрудника.

В 2014 г. окончил факультет элитного образования и магистратуры Омского Государственного Технического Университета по направлению «Ракетные комплексы и космонавтика». В 2018 г. окончил аспирантуру Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук по направлению 01.06.01 – Математика и механика.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов №780 от 8 октября 2020 г. выдана Федеральным государственным бюджетным учреждением науки Институте теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель: Хмель Татьяна Алексеевна, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории №12 «Волновых процессов в ультрадисперсных средах» Федерального государственного

бюджетного учреждения науки Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук.

По итогам обсуждения принято следующее заключение.

1. Диссертация посвящена численному исследованию влияния способа определения теплофизических характеристик частиц металлов нанометровой дисперсности на процессы плавления и структуру волн детонации, а также выявлению различий в процессах распространения детонации взвесей частиц алюминия микронного и нанометрового диапазона размеров частиц в областях сложной геометрии.

2. Актуальность темы.

На современном этапе развития промышленности перспективным является использование ультрадисперсных частиц в технологических процессах. Они занимают важную нишу при производстве различных технических устройств, например, микропроцессоров и другой электроники. Микро- и наночастицы применяются также в медицине и фармацевтической промышленности. В ракетно-космической отрасли интерес к ультрадисперсным частицам высокоэнергетических материалов связан с разработкой новых видов топлив. Включения микро- и наночастиц металлов, в состав твердых и гибридных топлив позволяют повысить их энергетическую эффективность, при этом времена горения частиц малого размера соизмеримы с временами горения газовых смесей.

При производстве, транспортировке и хранении ультрадисперсных частиц особняком стоит вопрос взрыво-пожаробезопасности. Особую опасность представляют скопления и распылы мелкодисперсной органической или металлической пыли в ограниченных объемах (помещениях, вентиляционных шахтах, закрытых транспортерах). Ударная волна или иной источник воспламенения могут привести к возникновению гетерогенной детонации, ее усилению из-за многократных отражений волн от стенок.

Говоря об особенностях использования ультрадисперсных частиц металлов, стоит отметить, что с уменьшением диаметра может происходить и изменение их некоторых свойств. Так для частиц алюминия диаметром менее 3.5 – 5 мкм происходит изменение режима горения. При расчетах течений в смесях с частицами размером менее 150 нм необходимо учитывать переход от континуального режима обтекания и теплообмена к свободно-молекулярному. Известно, что для наночастиц менее 30 нм с уменьшением размера происходит изменение их теплофизических свойств.

Из вышесказанного следует, что изучение физических процессов в ультрадисперсных средах может проводиться с применением различных подходов для описания фазовых переходов, горения и детонации.

Из вышесказанного следует, что изучение физических процессов в ультрадисперсных средах может проводиться с применением различных подходов для описания фазовых переходов, горения и детонации.

3. Научная новизна работы.

В работе получены следующие новые результаты:

- разработана и верифицирована методика определения теплофизических характеристик наночастиц металлов на основе прямого моделирования процессов нагрева и плавления методами молекулярной динамики;
- получены новые данные по теплофизическим свойствам наночастиц металлов: определены аппроксимационные зависимости коэффициентов теплоемкости наночастиц и объемного материала железа и золота от температуры, пригодные для дальнейшего использования в феноменологических моделях;
- получены данные о влиянии зависимости теплоемкости от температуры и размера частиц на времена плавления и распределение температур внутри наночастиц: слабом для алюминия и золота и существенном для наночастиц железа.
- получены данные о слабом влиянии зависимости теплоемкости от температуры в моделировании детонационных процессов в ультрадисперсных газовзвесах частиц алюминия;
- впервые получены данные о распространении детонации в ультрадисперсных газовзвесах частиц алюминия в каналах с линейным расширением. Описаны картины течения в различных режимах: закритическом, критическом и докритическом в микродисперсных и нанодисперсных взвесах;
- впервые определены критические условия распространения и срыва детонации в газовзвесах микроразмерных и наноразмерных частиц алюминия в терминах: ширина канала, угол расширения, размер частиц и проведено качественное сопоставление с аналогичными процессами газовой детонации. Установлена немонотонная зависимость критической ширины от угла расширения в микродисперсных взвесах и аналогичная газовой детонации кусочно-линейная зависимость для нанодисперсной взвеси.

4. Достоверность результатов основана на использовании признанных физических моделей и корректного математического аппарата, подтверждается верификацией результатов сопоставлением с данными других авторов и валидацией по экспериментальным данным на каждом этапе исследования. Для обоснования точности численных результатов моделирование проводилось на различных расчетных сетках с подтверждением повторяемости.

5. Научная и практическая значимость работы заключается в получении новых научных данных о процессах плавления наночастиц металлов; данных о теплофизических характеристиках, которые могут быть использованы для оценочных расчетов времени и температуры плавления наночастиц и в феноменологическом моделировании; данных о детонационных течениях в микродисперсных и нанодисперсных газовзвесах частиц алюминия, позволяющих улучшить понимание физики процессов; данных о критических условиях распространения гетерогенной детонации в областях сложной геометрии, полезных для проектирования трактов каналов технических устройств, предполагающих как развитие и распространение детонации, так и ее подавление или предотвращение.

6. Личный вклад автора: 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.

7. Автором представляется к защите:

– Методика анализа процессов плавления и определения коэффициентов теплоемкости наночастиц металлов в рамках моделирования методами молекулярной динамики.

– Результаты параметрических исследований плавления наночастиц металлов, показавшие зависимость расчётного времени плавления и распределения температур внутри частиц от способа задания коэффициента теплоемкости

– Результаты параметрических исследований детонации газовзвеси микро- и наночастиц алюминия в кислороде стехиометрического состава при варьировании способа задания коэффициента теплоемкости.

– Результаты численного моделирования процессов распространения гетерогенной детонации в стехиометрических взвесах микро- и наноразмерных частиц алюминия в кислороде в плоских каналах с линейным расширением.

8. Апробация работы.

Основные результаты диссертационной работы докладывались семинарах под руководством академика РАН Фомина В.М., профессора Федорова А.В., а также на российских и международных конференциях:

- XIV Всероссийский семинар "Динамика Многофазных Сред" (Новосибирск, 2015 г.);
- IX Всероссийская научная конференция «Проблемы разработки, изготовления и эксплуатации ракетно-космической техники и подготовки инженерных кадров для авиакосмической отрасли» (Омск, 2015г.);
- 18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research, ICMAR 2016 (Пермь, 2016г.);
- 6-я Всероссийская научная конференция с международным участием «Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред» (Москва, 2016г.);
- 20 Международная конференция по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам, ВМСППС'2017 (Алушта, 2017г.);
- Международная конференция «XIII ЗАБАБАХИНСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ» (Снежинск, 2017 г.);
- Всероссийская конференция с международным участием "Современные проблемы механики сплошных сред и физики взрыва" (Новосибирск, 2017г.);
- XXV Всероссийская конференция с международным участием «Высокоэнергетические процессы в механике сплошной среды» (Новосибирск, 2017г.);
- 9th International Seminar on Flame Structure, (Новосибирск, 2017г.);
- XI Всероссийская конференция молодых ученых «Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии» (Новосибирск - Шерегеш, 2017г.);
- XII Всероссийская конференция молодых ученых «Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии» (Новосибирск - Шерегеш, 2018г.);
- 11th International Colloquium on Pulsed and Continuous Detonations (Санкт-Петербург, 2018г.);

- 19th International Conference on the Methods of Aerophysical Research, ISMAR 2018 (Новосибирск, 2018г.).

9. Публикации

По теме диссертации опубликовано 10 работ, в том числе 4 в научных изданиях, рекомендованных ВАК.

1. Фёдоров А.В., Хмель Т.А., Лаврук С.А. Выход волны гетерогенной детонации в канал с линейным расширением. II. Критические условия распространения // Физика горения и взрыва. 2018. Т. 54. № 1. С. 81-91.
2. Фёдоров А.В., Хмель Т.А., Лаврук С.А. Выход волны гетерогенной детонации в канал с линейным расширением. I. Режимы распространения // Физика горения и взрыва. 2017. Т. 53. № 5. С. 104-114.
3. Лаврук С.А. Моделирование распространения гетерогенной детонации в монодисперсной и бидисперсной смеси алюминия за косым уступом // Челябинский физико-математический журнал. 2018. Vol. 3, № 1. Р. 111–123.
4. Федоров А.В., Шульгин А.В., Лаврук С.А. Исследование физических свойств наночастиц железа при плавлении и кристаллизации // Физика металлов и металловедение. 2017. Т. 118. № 6. С. 603-609.

Учитывая вышеизложенное, постановили:

Диссертация Лаврука Сергея Андреевича «Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов» удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Диссертация является законченной научной работой, содержащей новые результаты по актуальной теме. Опубликованные по теме диссертации научные работы отражают ее содержание.

Диссертация Лаврука Сергея Андреевича «Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов» рекомендуется к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы.

Заключение принято на заседании семинара «Математическое моделирование в механике» Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук.

На заседании присутствовали: академик РАН Фомин В.М., к.ф.-м.н. Бондарь Е.А., д.ф.-м.н. Хмель Т.А., д.ф.-м.н. Поздняков Г.А., д.ф.-м.н. Гапонов С.А., д.т.н. Лебига В.А., д.ф.-м.н. Козлов В.В., д.ф.-м.н. Кудрявцев А.Н., д.ф.-м.н. Медведев А.Е., д.ф.-м.н. Бардаханов С.П., к.ф.-м.н. Бедарев И.А., к.ф.-м.н. Вальгер С.А., к.ф.-м.н. Болеста А.В., к.ф.-м.н. Тропин Д.А., к.ф.-м.н. Шоев Г.В., к.ф.-м.н. Шершнёв А.А., к.ф.-м.н. Кратова Ю.В., к.ф.-м.н. Казанин И.В. и другие. Всего присутствовало 18 сотрудников с учёной степенью.

Результаты голосования: «за» – 18 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел., протокол № 5 от 8 октября 2020 г.

Председатель семинара,
академик РАН, профессор



В.М. Фомин

Сопредседатель семинара,
к.ф.-м.н.



Е.А. Бондарь

И.о. секретаря семинара
к.ф.-м.н.

А.А. Шершнёв