

ФАНО России
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук (ИТПМ СО РАН)

Лаврук Сергей Андреевич

НАУЧНЫЙ ДОКЛАД

об основных результатах подготовленной научно—квалификационной
работы

(диссертации)

*«Математическое моделирование гетерогенных течений с учетом
неравновесных фазовых переходов в каналах сложной геометрии»*

Направление подготовки:

01.06.01 — Математика и механика

Специальности подготовки: 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы;

Научные руководители

Д.ф.-м.н., профессор Федоров А.В.

Д.ф.-м.н. Хмель Т.А.

Новосибирск 2018

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы обусловлена вопросами фазовых переходов при различных техногенных аварийных ситуациях в каналах технических устройств. Одной из направлений техногенной безопасности является экологическая безопасность на производстве, в частности предотвращение проливов и утечек различных топлив при эксплуатации, как наземной, так и ракетной техники. Стоит отметить, что в после выполнения своей миссии на борту ракетносителя остается большая масса (более тонны) не вырабатываемого топлива. При падении, баки ракет могут деформироваться, что приводит к проливам топлива и загрязнению почв. В некоторых случаях топливо может проникать в грунтовые воды, что так же негативно сказывается на экологической обстановке. Для борьбы с такими остатками топлива на борту ракет авторы Трушляков В.И. и др. предлагают использовать систему, которая позволит газифицировать топливо на борту ступени ракеты, путем ввода горячих газов теплоносителя (ТН) с последующей их подачей в устройства утилизации (дополнительные маневровые двигатели, дожигатели и т.д.).

Одним из способов интенсификации процесса газификации это добавление наночастиц в жидкость. Рассматривая твердые и гибридные виды топлива, все чаще начинают использоваться включения наноматериалов, в частности наночастиц металлов. При использовании таких наночастиц увеличивается энергетическая эффективность топлива, так как из-за малого размера времена горения частиц соизмеримы с временами горения газовых смесей.

При производстве микро- и нанопорошков особняком стоит вопрос взрывопожаробезопасности. 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. Предотвращение подобных явлений требует изучения поведения ударных и детонационных волн в объемах сложной геометрии.

При исследовании данных явлений остро стоит вопрос о влиянии фазовых переходов (испарения, гетерогенного горения), которые возникают в ходе описанных выше процессов.

Процессы испарения жидкости описаны в работах Фукса Н.А., Салтанова Г.А., Смирнова Н.Н., Терехова В.И. и др. в приложении к различным задачам. Так в работе Фукса Н.А. представлены различные модели для описания испарения и обсуждаются вопросы согласования теоретических моделей и различных экспериментов. Еще один пласт задач, охватывающий процесс испарения, это задачи об испарении топлива при горении капель жидкости. Модели для решения таких задач были построены в работах Смирнова Н.Н. и соавторов, где рассматривались процессы испарения одиночных капель углеводородного топлива, как в стационарной, так и в нестационарной постановке.

В работах Терехова В.И. описываются результаты как теоретических, так и экспериментальных исследований испарения различных жидкостей. Также рассматривается испарение жидкости с добавлением нанотрубок углерода. Аналогичные работы были проделаны авторами Zhang W. и Wei Y. Ими исследовалось добавление наночастиц оксидов, и их влияние на испарение.

Для более точного описания процессов, протекающих при испарении с поверхности наночастиц, необходимо знать их теплофизические свойства. Известно, что с уменьшением размера частиц до 30 нм и меньше происходит изменение теплофизических характеристик наночастиц. Это предположение было сделано еще в начале XX века в работах Павлова П. и подтверждено как экспериментально, так и теоретически. Исследования по изучению теплофизических свойств наноматериалов ведутся как теоретически с помощью методов молекулярной динамики (Киселев С.П., Френкель Д., Пури П., Гафнер Ю.А. и др), так и экспериментально (Трунов М.А., Dalgic S.S., Buffat Ph. и др.).

Исследованиям плавления наночастиц металлов посвящено большое количество работ. Так в работах Shibuta Y. методами молекулярной динамики исследуется плавление некоторых металлов, в частности металлов с ОЦК решеткой, для которых получены температуры плавления и посчитаны их теплоемкости. Работам по исследованию плавления частиц алюминия отражены у авторов Пури П., Янг В. Моделирование плавления золота описано в работе Guenther G.

Вопросы феноменологического моделирования процесса плавления наночастиц рассматривались в работах Wu B., Федорова А.В., Myers T.G. и др. В работах Wu B. и Font F. рассматривалась задача плавления наночастиц золота. Решалась задача о движении границы фазового перехода жидкость-твердое-тело. При этом учитывался масштабные эффекты в виде зависимости

температуры плавления от размера частиц. Так же в работе F. Font учитывается изменение плотности наночастиц в зависимости от радиуса.

Для частиц алюминия было установлено, что мелкодисперсные порошки обладают высоким энергетическим потенциалом и являются детонационно-способными. Экспериментальные исследования детонационного горения частиц представлены в работах авторов Strauss W.A., Tulis A.J., Veysiere B., Zhang F. и др. В этих работах получены режимы детонационного горения частиц алюминия в трубах различного диаметра, в объемах и в открытом пространстве. Теоретические модели детонационного горения микродисперсных частиц алюминия представлены в работах Хасаинова Б.А., Левина В.А., Федорова А.В., Хмель Т.А. В работе Хасаинова Б.А. предложена теоретическая модель диффузионного режима горения алюминия, в которой скорость реакции является функцией от числа Рейнольдса частицы, а время горения и диаметр частиц связаны зависимостью $\tau_b \sim d^2$. Аналогичная модель используется в работах Hayashi A.K., Kuhl A.L. для описания детонационного горения микроразмерных частиц алюминия, в рамках ее были получены как одномерные, так и двух- и трехмерные картины распространения детонации в каналах. Стариком А.М. и соавторами была предложена модель дефлаграционного горения наночастиц алюминия с 43 прямыми и обратными реакциями аррениусовского типа. Подобный механизм был предложен как для горения частиц в кислороде, так и был адаптирован для горения частиц в воде. Модель Федорова А.В. основывается на использовании приведенной кинетики горения частиц алюминия с уравнением аррениусовского типа. Модель верифицирована по экспериментальным данным Strauss W.A. и использовалась в работах А.В. Федорова, Т.А. Хмель для численного моделирования распространения ячеистой детонации в плоских каналах.

Стоит отметить, что с уменьшением размера частиц происходит изменения режима горения и для частиц размером менее 3.5 мкм происходит изменение режима горения с диффузионного на кинетический. В результате чего меняется зависимость времени горения от диаметра частиц $\tau_b \sim d^n$, где n – варьируется в диапазоне 0.29...0.33. Такое поведение описано в обзоре Янга Д. и соавторов, а также получено в работе Zhang F.. Для описания кинетического режима горения была предложена модель, доработанная Хмель Т.А., которая учитывает этот переход, а так же может быть использована для описания горения наночастиц алюминия.

Таким образом, одними из основных процессов, происходящих при техногенных авариях можно считать разного рода фазовые переходы, как равновесные, так и неравновесные. При этом большую роль играют волновые картины течений в каналах комбинированной геометрии. Этим вопросам и будет посвящена данная работа.

Объектом исследований является гетерогенная смесь типов газ – твердые частицы или газ – пленка жидкости. Предметами исследования являются неравновесные процессы, протекающие при взаимодействии газа с микро и наночастицами, с пленкой жидкости и с твердыми стенками в ограниченных объемах.

Тем самым, представляется актуальным:

- адаптировать физико-математические модели, основанные на различных подходах, к описанию испарения пленки жидкости с поверхности под воздействием струи горячего газа применительно к задачам газификации ракетного топлива в баках ступеней ракетносителя;
- получить аппроксимирующие зависимости для теплофизических характеристик наночастиц, позволяющие использовать их при феноменологическом моделировании процессов нагрева, плавления и др.;
- в рамках полуэмпирических моделей детонационного горения микро- и нанодисперсных взвесей алюминия изучить волновые структуры и критические условия распространения гетерогенной детонации в каналах сложной геометрии.

Целями настоящей работы являются:

- Разработать методику расчета процесса газификации жидкости с поверхности при наличии потоков горячего газа в замкнутом объеме. Адаптировать физико-математические модели, основанные на различных подходах, к описанию испарения пленки жидкости.
- С помощью методов молекулярной динамики исследовать процессы плавления наночастиц некоторых металлов и их теплофизические

свойства, получить зависимости теплоемкости и температуры плавления частицы от радиуса.

- Исследовать влияние способов задания коэффициента теплоемкости наночастиц металлов в рамках феноменологических математических моделей на результаты расчетов плавления наночастиц.
- Исследовать влияния зависимости коэффициента теплоемкости от температуры на результаты расчетов процессов детонационного горения микро- и наночастиц алюминия.
- Методами численного моделирования в рамках полуэмпирических моделей детонационного горения взвесей микронных, субмикронных и наноразмерных частиц алюминия исследовать волновые структуры и критические условия распространения детонации в каналах с участком линейного расширения.

Научная новизна работы заключается в следующем.

1. Рассмотрены несколько моделей для описания процесса газификации жидкости с поверхности в замкнутом объеме. На основе сравнения результатов в рамках различных моделей выявлено, что основным механизмом газификации является массонос при взаимодействии струи газа с пленкой жидкости.
2. С помощью методов молекулярной динамики получены зависимости теплоемкости и температуры плавления частицы от радиуса для наночастиц золота, железа и алюминия. Для частиц железа получено заметное влияние представлений теплоемкостей на результаты расчетов плавления наночастиц: время плавления различается почти в 2 раза. Для алюминия и золота использование различных подходов к описанию теплоемкости практически не влияет на результаты моделирования времени плавления и распределений температур в частице.

3. Показано, что применение различных способов описания теплоемкости к модели детонационного горения микро- и наночастиц алюминия дает минимальный вклад в результаты расчетов детонационного горения частиц.
4. Показано, что волновые картины и основные режимы распространения детонации в газовзвесах субмикронных и микронных частиц алюминия в кислороде в линейно-расширяющихся каналах (критический, докритический, закритический) аналогичны процессам распространения детонации за прямоугольным уступом.
5. Получены зависимости критической ширины канала от угла расширения и размера частиц. Для взвеси микронных частиц установлена нелинейная зависимость ширины канала от угла в интервале от 45° до 60° . Дано физическое объяснение эффекту. Для субмикронного диапазона критические условия распространения детонации аналогичны газовой детонации: ширина канала линейно зависит от угла расширения до 30° и не зависит при дальнейшем увеличении угла расширения.

Практическая ценность работы заключается в адаптации моделей различного уровня приближения для анализа процессов испарения топлива на борту ступеней ракет; получении аппроксимирующих зависимостей теплофизических характеристик наночастиц металлов, которые могут быть использованы при феноменологическом моделировании; а также получении критических условий распространения детонации в каналах с линейным расширением для взвесей микронных и субмикронных частиц алюминия.

Достоверность результатов подтверждается верификацией физико-математических моделей по большому набору экспериментальных данных в широком диапазоне изменения начальных параметров, соответствием результатов известным экспериментальным данным и расчетным данным других авторов, тестированием расчетных методик с повторяемостью результатов на различных расчетных сетках.

Апробация работы:

Основные результаты докладывались на семинарах под руководством академика РАН Фомина В.М., профессора Федорова А.В. (ИТПМ СО РАН), а

также на XIV и XV Всероссийском семинаре "Динамика Многофазных Сред" (Новосибирск, 2015 и 2017гг.), IX Всероссийской научной конференции «Проблемы разработки, изготовления и эксплуатации ракетно-космической техники и подготовки инженерных кадров для авиакосмической отрасли» (Омск, 2015г), XVIII Международной конференции по методам аэрофизических исследований, ISMAR 2016 (Пермь, 2016г.), 6-я Всероссийской научной конференции с международным участием «Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред» (Москва, 2016г.), XX Международной конференции по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам, ВМСППС'2017 (Алушта, 2017г.), Международной конференции «XIII ЗАБАБАХИНСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ» (Снежинск, 2017 г.), Всероссийской конференции с международным участием "Современные проблемы механики сплошных сред и физики взрыва" (Новосибирск, 2017г.), XXV Всероссийской конференция с международным участием «Высокоэнергетические процессы в механике сплошной среды» (Новосибирск, 2017г.), 9 Международном семинаре по структуре пламени, (Новосибирск, 2017г.), XI и XII Всероссийских конференциях молодых ученых «Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии» (Новосибирск - Шерегеш, 2017 и 2018гг.). Общее число публикаций по материалам диссертации – 12, в том числе 8 статей в рецензируемых научных журналах из списка ВАК.

На защиту выносятся:

1. разработка физико-математических моделей различных уровней приближения для описания процессов газификации жидкости с поверхности при взаимодействии струи горячего газа с пленкой жидкости в замкнутом объеме;
2. алгоритмы расчета теплофизических параметров наночастиц металлов методами молекулярной динамики:
 - аппроксимирующие зависимости температуры плавления от радиуса частиц для наночастиц золота, железа и алюминия;
 - аппроксимирующие зависимости для коэффициента теплоемкости наночастиц железа радиусом 1.5, 2, 3 и 4 нм;
3. результаты расчетов выхода гетерогенной детонации в стехиометрических кислородных взвешах микронных и субмикронных частиц алюминия в канал с линейным расширением: волновые картины течения, критические условия распространения, выражающие

зависимость ширины канала от угла расширения для частиц различного размера.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** дан обзор литературы, посвященной вопросам испарения жидкости, моделированию плавления наночастиц металлов, а так же вопросам гетерогенной детонации частиц алюминия. Обоснована актуальность темы диссертации, сформулирована цель диссертации и дано краткое изложение полученных результатов.

Первая глава посвящена математическому моделированию испарения пленки жидкости в замкнутом объеме.

В §1 описана актуальность проблемы экологической безопасности ракетной техники. В частности показаны особенности, которые возникают при пусках космических ракет на территории Российской Федерации. Рассмотрены способы увода ступеней ракет различных авторов, а так же представлена собственная, основанная на газификации остатков ракетного топлива. Описаны задачи, которые будут решаться в данной главе.

В §2 представлена обработка экспериментальных данных, полученных в Омском государственном техническом университете. Описан экспериментальный стенд, а так же результаты, которые были получены в ходе моделирования испарения жидкости. Предложена релаксационная модель, позволяющая описать поведение температур в ходе эксперимента. Показана обработка результатов, позволяющая определить коэффициент массоотдачи в ходе проведения эксперимента. Описаны недостатки полученной модели, основанной на релаксационных уравнениях.

В §3 рассмотрена более сложная модель на основе уравнения теплового баланса. Описаны основные уравнения и допущения, которые были сделаны в ходе построения модели. Получено зависимость температур различных поверхностей участников теплообмена от времени газификации и проведено сравнение этих зависимостей с теми, что были получены в предыдущем параграфе (Рис. 1а). Получено большое расхождение по температурам для

жидкости и пластины, на которой расположена жидкость, и неплохое совпадение для газа внутри экспериментальной емкости и ее стенок в конце эксперимента. Также проведено сравнение коэффициентов массоотдачи, которая была получена в ходе обработке эксперимента, а также полученной из модели, получено удовлетворительное совпадение коэффициентов Рис. 1б. Значения коэффициентов близки в начальные моменты времени, а в дальнейшем расходятся.

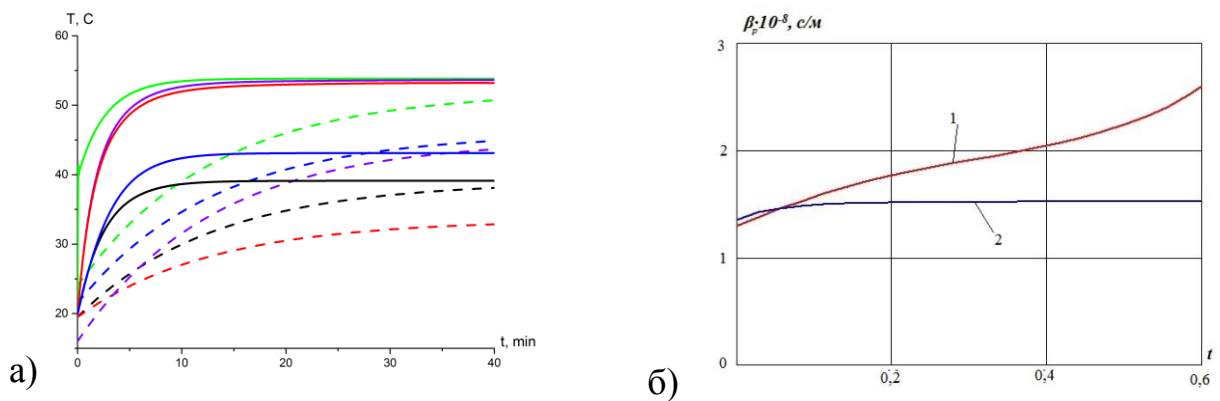


Рис. 1. Сравнение результатов обработки эксперимента и математического моделирования. а) Температуры поверхностей участников теплообмена. Сплошные линии – результаты математического моделирования, пунктирные линии – аппроксимация по с помощью релаксационного уравнения. Зеленая линия – воздух, синяя – стальная стенка, фиолетовая – алюминиевая подложка, черная – стеклянная стенка, красная линия – вода; б) коэффициент массоотдачи, 1- обработка экспериментальных данных; 2 – математическое моделирование.

Построен график изменения массы пленки жидкости, из которого видно, что при учете только тепловых потоков, полного испарения жидкости не происходит. Следующим этапом предложено рассмотреть газодинамическую картину течения в экспериментальном баке.

В §4 описана картина течения в трехмерной модели экспериментальной емкости. Описаны основные уравнения, начальные и граничные условия при которых проводилось моделирование. В данном параграфе картины течения получены без учета жидкой фазы. Далее были описаны газодинамические картины течения при различных углах ввода струи горячих газов. Проведено

сравнение по скоростям течения вдоль пластины для различных углов ввода, а также представлено сравнение распределения скоростей вдоль пластины со скоростями, полученными при моделировании ввода струи горячих газов в бак модельной ступени ракетносителя (рис. 2). Получено неплохое совпадение результатов по средней скорости в одном и том же сечении (сплошная и штрих-пунктирная кривые).

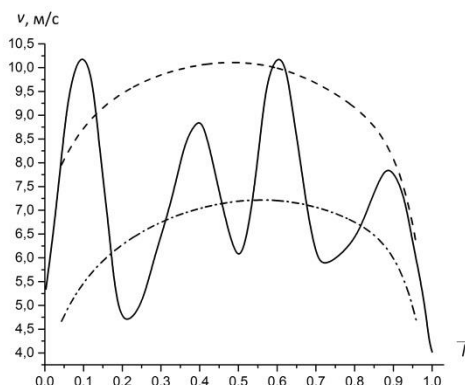


Рис. 2. График изменения скорости (м/с) вдоль характерного обезразмеренного линейного размера. Сплошная линия – для бака первой ступени [1], пунктирная линия – для модельной емкости, штрих-пунктирная линия – для модельной емкости на характерной высоте $6 \cdot 10^{-3}$.

Проведено сравнение чисел Нуссельта, которые были получены в ходе этого моделирования с полуэмпирическими зависимостями, которые использовались в модели из §3. Получено хорошее совпадение результатов.

В §5 рассмотрено двумерное моделирование процесса массоноса жидкости с поверхности пластины. Моделирование проводилось с помощью модели Эйлер – Эйлер. Описаны начальные и граничные условия для данной задачи. Получено качественное совпадение поведения жидкости в эксперименте и при моделировании.

¹ 1. Трушляков В.И., Куденцов В.Ю. Моделирование газодинамических потоков внутри типовых конструкций топливных баков ракет // Вестник СибАДИ, выпуск 5 (33), 2013. С. 116 – 122.

Вторая глава посвящена исследованию плавления наночастиц металлов и их оксидов с использованием различных методик.

В §1 описана актуальность вопроса масштабных эффектов, которые наблюдаются для наночастиц. Описаны способы, используемые при исследовании плавления наночастиц, а также описана цель данной главы.

В §2 описано плавление наночастиц металлов и их оксидов с помощью метода молекулярной динамики (ММД). Описаны основные уравнения и потенциалы, используемые при моделировании, а также начальные и граничные условия. Описаны результаты, полученные для железа, золота и алюминия. Для железа, получены калорические кривые, которые позволяют найти температуру фазового перехода для наночастиц. Проведено сравнение с результатами других авторов. Аналогичные исследования были проделаны для наночастиц золота и алюминия. Для наночастиц металлов были построены зависимости температур плавления от **обратного радиуса частиц** (Рис. 2), которая имеет линейный вид ($T_{mp}/T_{mvol}=1-\beta/r_p$).

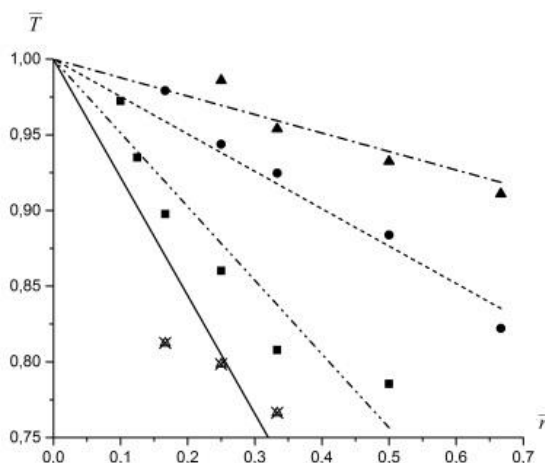


Рис. 2. Зависимость температуры плавления от радиуса частицы для золота, алюминия и железа. Полные треугольники – алюминий, полые треугольники – результаты экспериментов из [2], зачеркнутые треугольники – результаты моделирования из [3],

² Lai S. L., Carlsson J. R. A., Allen L. H. Melting point depression of Al clusters generated during the early stages of film growth: Nanocalorimetry measurements // Applied Physics Letters. 1998. Vol. 72, No. 9. P. 1098 – 1100.

круги – результаты моделирования плавления железа, полные квадраты – результаты моделирования плавления золота в, полые квадраты - результаты экспериментов из [4].

Проведено сравнение коэффициента пропорциональности β для различных металлов. Получено что для рассмотренных металлов с ОЦК решеткой коэффициент пропорциональности $\beta=0.4$. При моделировании плавления наночастиц оксида алюминия на калорических кривых скачка энергии не наблюдалось. Для описания фазового перехода использовался другой параметр: среднеквадратичное расстояние между атомами, который позволил описать фазовый переход для частиц периодическими граничными условиями (моделирование объемного образца). Далее описан процесс аппроксимации коэффициента теплоемкости и теплопроводности для частиц железа и сравнение с результатами, представленными в работе других авторов.

В §3 представлено описание плавления наночастиц металлов с помощью феноменологического подхода, основанного на рассмотрении задачи Стефана. Описаны граничные и начальные условия. Моделирование проводилось для определения влияния способов задания коэффициента теплоемкости металлов на модель плавления частиц алюминия. Рассмотрены три способа задания коэффициента теплоемкости: с помощью аппроксимации результатов ММД моделирования, описанного выше; с помощью зависимости коэффициента теплоемкости от температуры для объемного материала; с помощью константы. Получено что для наночастиц золота и алюминия способ задания коэффициента теплоемкости практически не влияет ни на время плавления, ни на распределение температур в частице. Для железа время плавления с использованием аппроксимации значений для наночастиц в 2 раза больше, чем для других способов задания коэффициентов теплоемкости.

³ Федоров А.В., Шульгин А.В. Молекулярно-динамическое и феноменологическое моделирование нагрева нанобъекта алюминия // Физика горения и взрыва. 2016. Т.52, № 3. С. 45 – 50.

⁴ Buffat Ph., Borel J-P. Size effect on melting temperature of gold particles // Physical Review A. 1976. Vol. 13, No. 8. P. 2287 –2298.

Глава три посвящена исследованию детонации ультрадисперсных взвесей частиц алюминия.

В §1 описана актуальность проводимых исследований. Описаны цели, поставленные в данной главе.

В §2 рассмотрено влияние способов задания теплофизических параметров на структуру детонационной волны. Для этого описаны основные уравнения, начальные и граничные условия для задания процесса детонационного горения частиц алюминия. Рассматривалось два способа задания коэффициента теплоемкости для частиц алюминия: с помощью зависимости коэффициента теплоемкости от температуры для объемного материала, а также с помощью констант, для оценки «сверху» и «снизу» получившихся результатов. Моделирование проводилось для частиц 50 нм, 100 нм и 1 мкм. На рис. 3 представлены результаты для частиц 100 нм и 1 мкм. Для частиц 100 нм (Рис. 3а) после наступления температурного равновесия значения для красной кривой ($c_{v,2}(T)$ для объемного материала) и черной кривой ($c_{v,2}=880$ Дж/кг·К) достаточно близки. Для частиц 1 мкм (Рис. 3б) наблюдаются небольшие различия в температурах в области достижения температурного равновесия, однако, после достижения температурного равновесия значения практически идентичны. Из полученных результатов следует, что способ задания коэффициента теплоемкости слабо влияет на процесс моделирования детонационного горения частиц алюминия в рассмотренных смесях.

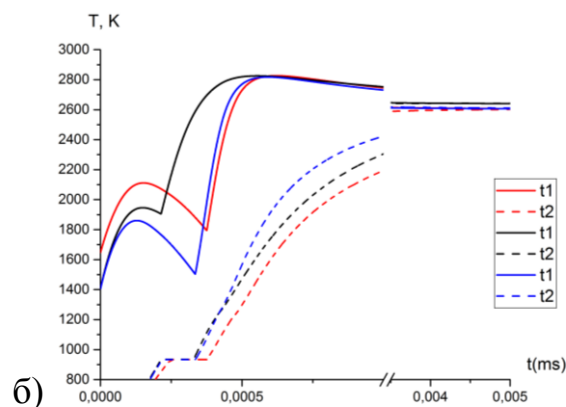
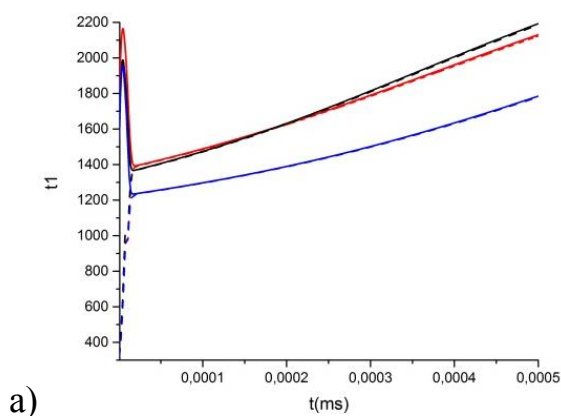


Рис. 3. Температуры частиц алюминия размером: а) 100нм и б) 1 мкм. $c_{v,2}=880$ Дж/кг·К – черные кривые, $c_{v,2}(T)$ для объемного материала – красные кривые, $c_{v,2}=1176$ Дж/кг·К – синие кривые.

В §3 исследовалась дифракция детонационной волны в канале с линейным расширением во взвеси микронных и субмикронных частиц алюминия. Представлены основные уравнения, граничные и начальные условия для решения данной задачи, а также описан способ задания наклонно стенки. Показана достоверность результатов, с помощью расчетов на различных сетках. Для микронных и субмикронных частиц получены основные режимы распространения детонации (докритический, критический и закритический), а так же построены карта режимов распространения детонации. Для микронных частиц в диапазоне от 45° до 60° получена нелинейная связь между углом расширения и критической шириной канала (Рис. 4.а), которая связана с перестроением структуры течения в канале. Для субмикронных частиц карта режимов близка к тому, что наблюдается в газовой детонации [5] (Рис. 4б). До некоторого критического значения угла расширения существует зависимость между критической шириной канала и угла расширения. При рассмотрении детонации в канале с углом расширения больше критического критическая ширина канала не зависит от угла расширения. Подобное поведение говорит о близости гетерогенной детонации в субмикронном диапазоне к газовой детонации.

⁵ Khasainov B., Presles H.-N., Desbordes D., Demontis P., Vidal P. Detonation diffraction from circular tubes to cones // Shock Waves, 2005, V. 14, N 3, p. 187–192.

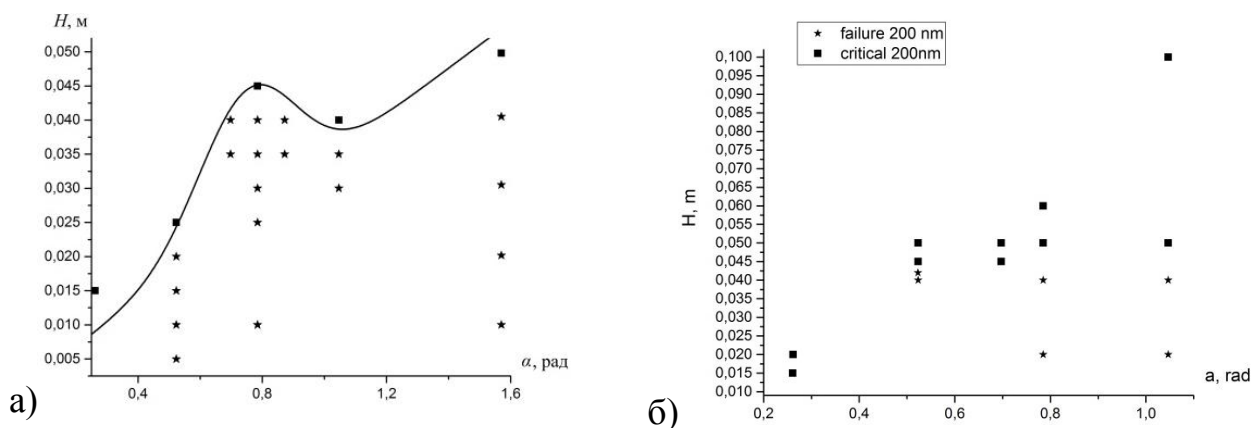


Рис. 4. Карта режимов течения: а) частиц 3.5 мкм, б) частицы 200 нм. звездочки — срыв детонации, темные — критический режим, сплошные линии — аналитические критерии.

Основные выводы научной работы.

1. разработаны физико-математические модели с тремя уровнями приближения, описывающие процессы испарения и уноса жидкости с поверхности под воздействием струи горячего газа в замкнутом объеме. Проведен сравнительный анализ моделей, выявлены преимущества и недостатки каждой из них. В рамках двухфазной модели получено качественное соответствие данных расчета процесса взаимодействия струи горячего воздуха с пленкой воды на плоской подложке с имеющимися экспериментальными данными;
2. разработаны алгоритмы расчета теплофизических параметров наночастиц металлов методами молекулярной динамики:
 - определены аппроксимирующие зависимости температуры плавления от радиуса частиц для наночастиц золота, железа и алюминия;
 - определены аппроксимирующие зависимости для коэффициента теплоемкости наночастиц железа радиусом 1.5, 2, 3 и 4 нм;
 - получено качественное и количественное согласование с имеющимися в литературе данными;
3. Проведено численное моделирование распространения гетерогенной детонации в стехиометрических кислородных взвешах микронных и субмикронных частиц алюминия в каналах с линейным расширением. Проанализированы волновые картины течения, показано их соответствие задаче выхода за прямоугольный уступ. Определены критические условия распространения, выражающие зависимость

ширины канала от угла расширения для частиц различного размера. Для *микроразмерных* частиц установлена линейная зависимость критической ширины от угла расширения при углах до 30° и от 60° до 90° . Установлена немонотонная зависимость от угла расширения в среднем диапазоне (от 40° до 50°). Для *субмикронных* частиц установлена линейная связь между углом наклона стенки и критической шириной канала линейна до угла расширения в 30° , далее при $\alpha > 30^\circ$ критическая ширина канала не зависит от угла наклона стенки, что аналогично известным в литературе данным для газовых смесей.

Практически все представленные материалы исследований опубликованы в следующих работах, рекомендованных в списке ВАК:

1. Трушляков В.И., Лаврук С.А. Теоретико-экспериментальное исследование взаимодействия горячих газов с жидкостью в замкнутой модельной ёмкости/ Тепловые процессы в технике, 2014. Т. 6. № (6) с. 246-253.
2. Tryshlyakov V.I., Lavruk S.A. Theoretical and experimental investigations of the interaction of hot gases with liquid in closed volume // Acta Astronautica, 2015, Т. 109, С. 241-247.
3. Трушляков В.И., Лаврук С.А. Теоретико-экспериментальное исследование взаимодействия горячих газов с жидкостью в замкнутой модельной емкости // Тепловые процессы в технике, 2015, № 10, С. 434-438.
4. Fedorov A. V., Lavruk S.A. Two-phase flows simulation in closed volume / AIP Conference Proceedings 1770, 2016.
5. Fedorov A. V., Shulgin A.V., Lavruk S.A. Study of iron nanoparticle melting/ AIP Conference Proceedings 1770, 2016.
6. 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.
7. Федоров А.В., Хмель Т.А., Лаврук С.А. Выход волны гетерогенной детонации в канал с линейным расширением. 1. Режимы распространения// Физика горения и взрыва, 2017, т. 53, №5. С. 104 – 114.

8. Федоров А.В., Хмель Т.А., Лаврук С.А. Выход волны гетерогенной детонации в канал с линейным расширением. 2. Критические условия распространения// Физика горения и взрыва, 2018, т. 54, №1. С. 81 – 91.
9. Лаврук С.А. Моделирование распространения гетерогенной детонации в монодисперсной и бидисперсной смеси алюминия за косым уступом// Челябинский физико-математический журнал. 2018. Т. 3. № 1. С. 111-123.
10. Федоров А.В., Бедарев И.А., Лаврук С.А., Трушляков В.И., Куденцов В.Ю. Определение поля течения в топливном баке ракетного двигателя после выполнения миссии// Инженерно-физический журнал. 2018. Т. 91. № 2. С. 345-352.
11. Fedorov A.V., Khmel T.A., Lavruk S.A. Modeling of heterogeneous detonation propagation in variable cross-section channels with consideration of transient combustion of aluminum// AIP Conference Proceedings. 2018. № 1939. С. 020024.
12. Fedorov A. V., Lavruk S.A. Mathematical modeling of melting of alumina nanoparticles// AIP Conference Proceedings. 2018. № 1939. С. 020026.