

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Лаврука Сергея Андреевича

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

Диссертация посвящена, безусловно, актуальной проблеме исследования процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных металлических частиц. Ультрадисперсные частицы широко используются в различных технологических процессах в области энергетики, микроэлектроники, химической промышленности, медицины. Поскольку они являются химически реагирующими, при их транспортировке и хранении особое внимание требуется уделять вопросам пожаро- и взрывобезопасности. Можно вспомнить чудовищную по своим масштабам аварию в августе 2020 года в порту г. Бейрут, Ливан, когда произошла детонация более двух тысяч тонн аммиачной селитры. Это, конечно, не мелкодисперсный порошок, но также, по сути, гетерогенное взрывчатое вещество, которое применялось для гражданских целей, и соответствующие риски были недооценены.

Хотя исследования по тематике детонации мелкодисперсных частиц металлов проводятся давно, включая работы научных руководителей С.А. Лаврука и сотрудников лаборатории, в которой он работает, диссертация отличается научной новизной. Новизна заключается, прежде всего, в комплексном подходе к решению задачи. Данный подход включает моделирование свойств частиц металла методами молекулярной динамики, рассмотрение задачи Стефана о движении границы межфазного перехода (можно сказать, прямое моделирование частиц на «микроуровне»), и двумерное моделирование распространения детонационной волны в канале с расширением с использованием модели запыленного газа (моделирование на «макроуровне»). Будучи дополненным переходными «метамоделями», связывающими прямое численное моделирование и моделирование в рамках механики гетерогенных сред, подобный разномасштабный комплексный подход используется в ведущих мировых лабораториях, занимающихся многофазными задачами. В качестве примера можно привести лаборатории Н.С. Udaykumar (Университет Айовы, США) и S. Balachandar (Университет Флориды, США).

Основная научная ценность результатов диссертации видится в классификации возможных типов течений, реализующихся при дифракции детонационной волны в газозвеси микро- и нанодисперсных частиц алюминия в канале с линейным расширением. Интерес также представляет объяснение немонотонной зависимости критической ширины канала от угла расширения для микродисперсных взвесей частиц. Наибольшей практической значимостью, вероятно, обладают формулы для коэффициентов теплоемкости частиц и объемных образцов металлов в зависимости от температуры, полученные методом молекулярной динамики.

Диссертация состоит из введения, трех глав и общих выводов. Список литературы включает 126 наименований и достаточно полно отражает теоретические и экспериментальные исследования по теме диссертации. Общий объем диссертации 117 страниц.

Во введении обсуждается актуальность и цели работы, научная новизна и практическая ценность, степень достоверность результатов и основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе методами молекулярной динамики с использованием различных потенциалов взаимодействия (Финниса-Синклера, модифицированного Финниса-Синклера, потенциала внедренного атома), среди прочего, для наночастиц алюминия, золота и железа построены формулы для температуры плавления в зависимости от размера частиц и теплоемкости в зависимости от температуры. Аппроксимационные зависимости коэффициентов теплоемкости также получены для объемного материала. Для моделирования использовался свободно распространяемый пакет LAMMPS.

Во второй главе задача о плавлении золота, железа и алюминия рассмотрена уже в рамках задачи Стефана при различных способах задания теплоемкости, включая зависимости, полученные в первой главе. Получено, что использование различных моделей аппроксимации коэффициента теплоемкости приводит к одинаковым результатам при определении времени плавления и распределения температур внутри наночастиц алюминия и золота. Для наночастиц железа времена плавления, определенные по различным коэффициентам теплоемкости, различаются практически в два раза, а распределение температур становится нелинейным. Для описания распространения детонационной волны во второй главе использована модель Зельдовича-Неймана-Деринга.

В третьей главе для микронных и наноразмерных газовзвесей алюминия численно исследована задача о распространении волны детонации в канале с линейным расширением. Результаты моделирования качественно сопоставлены со случаем газовой детонации. Проанализированы качественные отличия в картинах течения для микродисперсных и нанодисперсных смесей.

Автореферат отражает содержание и выводы диссертационной работы. Основные результаты работы полностью опубликованы в журналах Физика горения и взрыва, Физика металлов и металловедение, Челябинский физико-математический журнал.

К диссертационной работе имеются следующие замечания и вопросы.

1. Судя по тексту, см. раздел 1.1.4, результаты первой главы были получены в предположении о том, что частица металла находилась при постоянных фиксированных параметрах окружающего газа – температуре и скорости нагрева. Однако в дальнейшем найденные зависимости для теплоемкостей частиц использовались в нестационарных расчетах распространения детонационной волны. Насколько, по мнению автора, фактор нестационарности окружающих частицу условий может сказываться на результатах и выводах первой главы?

2. Во второй главе автор исследует распространение волны детонации в гетерогенной смеси кислорода и металлических частиц в рамках модели Зельдовича-Неймана-Деринга (ЗНД). Обычно данная модель используется для получения представления о пространственной структуре стационарной детонации и характерного пространственного масштаба зоны протекания химических реакций. Во-первых, записывая определяющую систему уравнений, автор ссылается на [96], где данная система уравнений не рассматривается. Было бы интересно узнать о модели ЗНД для запыленного газа более подробно с

точки зрения поведения звуковой особенности за лидирующим скачком. Во-вторых, вызывают вопросы Рис. 2.5 – 2.8. На них по оси абсцисс отложено время, а не пространственная координата, как это обычно бывает в модели ЗНД. Как понимать эти рисунки? В какой точке строятся эти профили решения, которое должно быть стационарным. В-третьих, рассмотрение модели ЗНД не отвечает на основной напрашивающийся вопрос – какой же характерный пространственный масштаб физико-химических процессов за фронтом лидирующей волны? Соответственно, нет понимания, насколько детальным относительно стационарного решения ЗНД является сеточное разрешение 0.2 мм, с которыми проводились расчеты в главе 3.

3. Описание численного метода в главе 3 дается очень скупо, его фактически нет. Не понятен порядок аппроксимации метода по времени и по пространственным переменным, является ли он монотонным в том или ином смысле, является ли он консервативным. Последний вопрос связан с тем, как автор описывает устройство численного метода для учета наклонной стенки на стр. 79. Давно существуют схемы на криволинейных сетках, конечно-объемные схемы на неструктурированных сетках, методы декартовых сеток. Не понятно, с чем, кроме, может быть, исторических причин, связано использование, судя по описанию, конечно-разностной схемы, которая требует каких-то нестандартных усилий для описания, казалось бы, простой ситуации с линейным расширением канала. Не похоже, что такая методика обобщается на каналы с более сложной геометрией.

Кажется, на Рис. 3.2 на стр. 81 опечатка в легенде графика или ошибка в поясняющем тексте на стр. 80. Различия между штрихпунктирной и сплошной линиями, больше, а не меньше, чем между сплошной и штриховой линиями.

Резюмируя замечания данного пункта, с моей точки зрения, у автора временами прослеживается излишне утилитарное отношение к принципам численного моделирования. Как будто имеющиеся инструменты для проведения вычислительных экспериментов являются совершенными, и можно всецело сосредоточиться только на анализе механики процесса. Да, работа защищается по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы, а не 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, и поэтому акцент на механику задачи, а не на инструменты, понятен. Но в каком-то смысле защищать результаты по МЖГ, полученные в результате численного моделирования, гораздо сложнее, чем численные методы сами по себе, поскольку требуется повышенное внимание к обоснованию корректности и общности выносимых на защиту результатов с точки зрения механики изучаемых процессов. Хотелось бы рекомендовать диссертанту обратить на это внимание в его дальнейшей научной работе.

4. Почему при рассмотрении дифракции детонационной волны в канале с расширением в последней главе автор выбрал постановку, когда в узком канале распространяется плоская детонационная волна без развитой ячеистой структуры? Как следует, например, из одной из недавних статей автора – [Lavruk S.A. et al. // Shock Waves. – 2020. – V. 30. – P. 273 – 286] – для монодисперсной смеси частиц алюминия ячеистая структура гетерогенной детонации является вероятным сценарием. А как следует из многочисленных исследований по дифракции газовой детонации в каналах с резким или постепенным расширением, наличие поперечных волн и, как следствие, ячеистой структуры является важным фактором процесса.



5. Большая часть диссертации написана очень аккуратно с минимальным количеством неточностей и опечаток. Исключение составляют некоторые фрагменты в главе 3. Например, на стр. 80 появляется предложение без подлежащего и сказуемого «Так как для задания граничных условий...». На этой же странице вместо «рис. 3.2» встречается «рис. 2».

Несмотря на указанные замечания, диссертация Лаврука С.А. выполнена на высоком уровне, содержит научную новизну и практическую значимость. Активность автора в области сохранения и развития идей, подходов и, в целом, наследия д.ф.-м.н., профессора А.В. Федорова заслуживает всецелой поддержки и уважения.

Диссертация Сергея Андреевича Лаврука «Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов» полностью удовлетворяет критериям ВАК, установленным Положением о присуждении ученых степеней (п. 9), утвержденным Правительством Российской Федерации от 24 сентября 2013 года №842, по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы; а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Старший научный сотрудник ИАП РАН,  
к.ф.-м.н.

Уткин Павел Сергеевич

17 февраля 2021 года

Организация – место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт автоматизации проектирования РАН

Должность: старший научный сотрудник

Почтовый адрес: 123056, Москва, 2-ая Брестская ул, д.19/18

Телефон: 8 (499) 250-02-62

Адрес электронной почты: [icad@icad.org.ru](mailto:icad@icad.org.ru)

Web-сайт организации: [www.icad.org.ru](http://www.icad.org.ru)

Подпись и сведения заверяю.

Ученый секретарь ИАП РАН  
к.т.н.

Сызранова Нина Геннадьевна

Председателю  
диссертационного совета  
Д 003035.02  
академику В.М. Фомину

### ЛИЧНОЕ СОГЛАСИЕ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

Я, Уткин Павел Сергеевич, 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	К.ф.-м.н.
Научные специальности, по которым защищена диссертация	05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ
Ученое звание	Доцент
Академическое звание	Нет
Тел:	+7 (926) 276-65-60
E-mail:	utkin@icad.org.ru
Должность	Старший научный сотрудник
Подразделение организации	Отдел вычислительных методов и турбулентности
Полное наименование организации, являющейся основным местом работы	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт автоматизации проектирования Российской академии наук
Ведомственная принадлежность орг.	Министерство науки и высшего образования РФ
Адрес служебный: Почтовый индекс, город, улица, дом	123056, Российская Федерация, г. Москва, ул. 2-ая Брестская, 19/18
Web-сайт организации.	<a href="http://www.icad.org.ru/">http://www.icad.org.ru/</a>
Телефон организации.	+7 (499) 250-02-62
E-mail организации.	icad@icad.org.ru

По теме рассматриваемой диссертации имею 210 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	Poroshyna Ya., Lopato A., Utkin P.	Nonlinear dynamics of pulsating detonation wave with two-stage chemical kinetics in the shock-attached frame	Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. – 2021. DOI: 10.1515/jiip-2020-0032.	Статья, 2021
2	Сидоренко Д.А., Уткин П.С.	Численное моделирование взаимодействия проходящей ударной волны со слоем частиц методом декартовых сеток	Горение и взрыв. – 2020. – Т. 13, № 2. – С. 62 – 74. DOI: 10.30826/CE20130207.	Статья, 2020
3	Порошина Я.Э., Уткин П.С.	Численное моделирование взаимодействия нормально падающей ударной волны со слоем частиц в рамках уравнений Баера-Нунциато	Горение и взрыв. – 2020. – Т. 13, № 1. – С. 95 – 104. DOI: 10.30826/CE20130109.	Статья, 2020
4	Utkin P.S., Lopato A.I., Vasil'ev A.A.	Mechanisms of detonation initiation in multi-focusing systems	Shock Waves. – 2020. – V. 30. DOI: 10.1007/s00193-020-00969-6.	Статья, 2020
5	Elesin V.V., Sidorenko D.A., Utkin P.S.	Three-dimensional Cartesian grid method for the simulations of flows with shock waves in the domains with varying boundaries	International Journal of Computational Methods. – 2020. – Paper 2050046. – 20 P. DOI: 10.1142/S0219876220500462.	Статья, 2020
6	Utkin P.S.	Numerical simulation of shock wave – dense particles cloud interaction using Godunov solver for Baer-Nunziato equations	International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow. – 2019. – V. 29, No. 9. – P. 3225 – 3241. DOI: 10.1108/HFF-10-2018-0587.	Статья, 2019
7	Сидоренко Д.А., Уткин П.С.	Численное моделирование релаксации тела за проходящей ударной волной	Математическое моделирование. – 2018. – Т. 30, № 11. – С. 91 – 104.	Статья, 2018

Не являюсь членом экспертного совета ВАК

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

25 января 2020 года

Подпись П.С. Уткина и сведения заверяю.  
Ученый секретарь ИАП РАН, к.т.н.

на