

УТВЕРЖДАЮ:  
Директор МИАН  
мик РАН Д.В. Трещев

«24» февраля 2021 г.

## ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу  
Лаврука Сергея Андреевича

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

Ультрадисперсные частицы широко применяются в технологических процессах при производстве различных технических устройств, в медицине и фармацевтической промышленности. В ракетно-космической отрасли интерес к ультрадисперсным частицам высокоэнергетических материалов связан с разработкой новых видов топлив, а включения микро- и наночастиц металлов в состав твердых и гибридных топлив позволяют повысить их энергетическую эффективность, при этом из-за малого размера частиц их времена горения соизмеримы с временами горения газовых смесей.

Однако при производстве, транспортировке и хранении высокоэнергетических ультрадисперсных частиц остро стоит вопрос пожаро-взрывобезопасности. Опасность представляют скопления и взвеси мелкодисперсной органической или металлической пыли в ограниченных объемах. Появление искры или открытого пламени в таких взвесях может привести к возникновению гетерогенной детонации, ее усилению из-за многократных отражений волн от стенок.

Уменьшение размеров ультрадисперсных частиц металлов может приводить к изменению их теплофизических свойств. Может происходить смена режима горения, как это обнаружено для частиц алюминия в диапазоне менее 5 мкм (смена режима горения с диффузионного на кинетический), для частиц менее 30 нм появляется зависимость теплофизических параметров от размера частиц и т.д.

Для исследования задач о плавлении и детонационного горения частиц могут использоваться различные подходы для описания этих процессов. Так для исследования плавления наночастиц используются методы молекулярной динамики, позволяющие получить теплофизические свойства из оценки взаимодействия атомов в частице. Феноменологические подходы, такие как решение задачи Стефана о движении границы фазового перехода жидкость - твердое ядро, позволяют оценить времена плавления и распределение

температуры в частице. Для описания динамических процессов в реагирующих дисперсных средах (газовзвесьях твердых частиц) в макромасштабах, как правило, используются подходы механики взаимопроникающих континуумов. В частности, такой подход применяется для анализа детонационных процессов в газовзвесьях твердых частиц.

Актуальным является вопрос о влиянии моделей теплофизических характеристик частиц металлов, построенных с использованием метода молекулярной динамики, на феноменологические и полуэмпирические подходы для описания процессов плавления и детонационного горения частиц металлов.

Диссертационная работа Лаврука С.А. посвящена анализу влияния способа определения теплофизических характеристик частиц металлов нанометровой дисперсности на результаты расчетов процессов плавления и структуры волн детонации, а также выявлению различий в процессах распространения волны детонации по взвеси частиц алюминия микронного и нанометрового диапазона размеров частиц в объемах сложной геометрии. Ввиду вышесказанного, направление исследовательской работы, несомненно, является актуальным и имеет большое теоретическое и практическое значение.

В качестве методов анализа выбраны три подхода. Первый подход состоит в применении методов молекулярной динамики для определения теплофизических характеристик железа, золота и алюминия с целью получения аппроксимирующих зависимостей теплоемкости частиц от температуры. Второй подход связан с использованием феноменологических подходов для описания плавления с учетом различных моделей теплоемкости частиц. Третий подход основан на применении двухфазной модели механики сплошных сред с привлечением полуэмпирических моделей для описания реакции горения. В результате применения таких подходов диссертантом были решены следующие задачи.

1. С помощью методов молекулярной динамики исследованы процессы плавления наночастиц металлов (золота, железа и алюминия) и изучены их теплофизические свойства.
2. В рамках феноменологических подходов исследовано влияние модели теплоемкости на результаты расчета плавления наночастиц металлов.
3. Исследовано влияние модели теплоемкости в расчетах структуры детонации газовзвесей микро- и наночастиц алюминия.
4. Определены характеристики и критические условия распространения детонации в ультрадисперсных газовзвесьях алюминия в расширяющихся каналах.

В диссертации получен ряд новых научных результатов по моделям детонационного горения частиц алюминия в микронном – субмикронном диапазоне и критическим условиям распространения гетерогенной детонации в каналах с расширением.

Методами молекулярной динамики автором разработана и верифицирована методика определения теплофизических характеристик наночастиц металлов. Получены новые данные по теплофизическим свойствам наночастиц металлов: определены аппроксимационные зависимости коэффициентов теплоемкости наночастиц и объемного материала, пригодные для дальнейшего использования в феноменологических моделях. Получены данные о влиянии зависимости теплоемкости от температуры и размера частиц на времена плавления и на распределение температуры внутри наночастиц. Установлена слабая зависимость результатов численного моделирования детонации ультрадисперсных газозвесей частиц алюминия от модели теплоемкости дисперсной фазы. Новыми являются данные сравнительного анализа результатов численных расчетов критических условий распространения детонации в микронных и субмикронных взвесах частиц алюминия.

Основными результатами диссертации можно считать следующие.

1. На основе численных расчетов методами молекулярной динамики разработан алгоритм расчетов процесса плавления наночастиц металлов (алюминия, золота и железа).
2. В расчетах тепловой динамики наночастиц железа с учетом процессов плавления и кристаллизации обнаружен эффект гистерезиса, при котором точка фазового перехода по температуре при кристаллизации отличается от точки фазового перехода при нагреве на величину более 500 К.
3. На основе обобщения результатов для металлов с объемно-центрированной решеткой (для железа, вольфрама, хрома и молибдена) и для металлов с гранецентрированной решёткой (золота, никеля и меди) предложено универсальное соотношение, связывающее температуру плавления и радиус частицы.
4. На основе анализа калорических кривых предложен способ расчета коэффициентов теплоемкости наночастиц металлов и получены аппроксимирующие зависимости теплоемкости наночастиц от температуры для золота, железа и алюминия, которые могут быть использованы в расчетах в рамках феноменологических подходов.
5. Показано, что при различных способах задания коэффициента теплоемкости расчетные времена плавления и распределения температуры внутри наночастиц алюминия и золота одинаковы, а различие результатов расчетах детонационного горения микро - и наночастиц алюминия незначительно.
6. По результатам расчетов представлена классификация режимов распространения детонации в микронных и наноразмерных газозвесах частиц алюминия в каналах с линейным расширением: докритические (со срывом детонации), критические (с частичным срывом и восстановлением в поперечных волнах) и закритические (с непрерывным распространением детонации).

7. Установлено, что реализация определенного режима детонации зависит от геометрических параметров (канала и частиц), сопровождается интенсивным развитием неустойчивости Рихтмайера-Мешкова в докритических режимах и увеличением размера детонационной ячейки в закритических.

Теоретическая и практическая ценность диссертации заключается в получении новых научных данных:

- о процессах плавления наночастиц металлов и данных о теплофизических характеристиках, которые могут быть использованы для оценочных расчетов времени и температуры плавления наночастиц и в феноменологическом моделировании;
- о течениях с волнами детонации в микродисперсных и нанодисперсных газозвесах частиц алюминия, позволяющих понять механизмы процессов;
- о критических условиях распространения гетерогенной детонации в областях сложной геометрии, полезных для проектирования трактов каналов технических устройств, предназначенных для реализации или подавления (предотвращения) детонации.

Достоверность полученных результатов основана на использовании признанных физических моделей и корректного математического аппарата, подтверждается сопоставлением полученных результатов с теоретическими результатами других авторов и с экспериментальным данным на каждом этапе исследования. Для обоснования точности численных расчетов моделирование проводилось на различных расчетных сетках с подтверждением повторяемости.

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Материал диссертации изложен на 117 страницах, содержит 39 рисунков, 6 таблиц и список литературы из 126 наименований.

Во введении с представлен литературный обзор по теме диссертационного исследования, обоснована ее актуальность, сформулированы цель и задачи работы, показана ее научная и практическая значимость, научная новизна, теоретическая и практическая ценность, дано обоснование достоверности полученных результатов, представлены основные положения, выносимые на защиту, указан личный вклад автора.

В первой главе представлены результаты моделирования нагрева и плавления наночастиц металлов (золота, железа и алюминия). Данные о теплофизических параметрах (температуре плавления в зависимости от радиуса частиц и теплоемкости в зависимости от радиуса частиц), используемых в феноменологических моделях, получаются методами молекулярной динамики и сравниваются с опубликованными в литературе результатами.

Во второй главе в рамках феноменологического подхода, используя полученные данные о теплофизических характеристиках наночастиц,

рассмотрены задачи о нагреве и плавлении частиц металлов, помещенных в высокотемпературное поле, а также рассмотрены задачи детонационного горения нанодисперсных и микродисперсных взвесей частиц алюминия при различных аппроксимациях коэффициента теплоемкости. Проведен анализ процессов нагрева, плавления и детонационного горения частиц металлов с применением различных подходов и получены данные о влиянии способов представления теплофизических характеристик на результаты моделирования.

В третьей главе исследуется влияние дисперсности взвеси от микронного до субмикронного диапазона размеров частиц алюминия на характеристики и условия распространения детонации в каналах с расширением.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе.

Следует отметить, что полученные в диссертации результаты представлены последовательно и хорошо изложены.

Вместе с тем к содержанию работы имеется ряд вопросов и замечаний.

1. В первой главе диссертации при описании методологии молекулярно-динамического расчета недостаточно полно представлено обсуждение влияния выбора потенциала взаимодействия. Поскольку ряд авторов, цитируемых в диссертации, использует альтернативные потенциалы, сравнение с их результатами может быть только качественным. Чем обоснован выбор потенциалов взаимодействия для каждого из материалов?

2. Не совсем ясна физическая интерпретация постановки начально-краевой задачи о нагреве наночастицы, которая решается методами молекулярной динамики в Главе 1. Нагрев поверхностный или объемный?

3. В Главе 2 для анализа тепловой динамики наночастицы использовался метод прямых. В настоящее время существуют более точные и эффективные методы решения таких задач.

4. В Главе 3 диссертации для описания химических реакций принята простейшая одностадийная модель кинетики и температурный критерий воспламенения частиц. Насколько такое приближение правомерно для анализа критических условий распространения детонации?

5. В Главе 3 результаты получены с применением схемы TVD Хартена-Лакса для газа. Почему автор не использует известную схему Годунова, которая физически адекватно воспроизводит граничные условия и хорошо себя зарекомендовала для решения подобных задач?

6. Результаты, представленные на рис. 3.5.б подобны картине течения в задаче Солоухина, воспроизведенной в расчетах Левин, Марков, Мануйловича (Доклады академии наук, 439(1), 2011, с. 48 – 50). Однако эта работа не упомянута и сравнение не проведено.

Указанные вопросы и замечания не снижают достоинств диссертационной работы С.А. Лаврука, ее основные положения достаточно полно и правильно раскрыты в автореферате и публикациях диссертанта.

На основании вышесказанного можно сделать следующие выводы.

1. Тема диссертации С.А. Лаврука важна и актуальна. Работу следует отнести к специальности 01.02.05 – «Механика жидкости, газа и плазмы».

2. Основные результаты являются новыми.

3. Полученные результаты опубликованы в 10 работах, четыре из которых – в ведущих рецензируемых журналах, определенных Высшей аттестационной комиссией Министерства науки и образования РФ. Результаты диссертации апробированы на 12 Международных и Всероссийских научных конференциях.

4. В целом диссертация является завершенным научным исследованием, вносящим заметный вклад в данный раздел современной механики.

5. Автореферат диссертации полно и правильно отражает ее содержание.

6. Представленные в диссертации результаты будут востребованы при дальнейшем изучении течений газовзвесей ультрадисперсные частицы. Они могут быть интересны для научных и образовательных учреждений, где ведутся теоретические и экспериментальные исследования по затронутым в диссертационной работе проблемам. К их числу относятся Математический институт имени В.А. Стеклова РАН, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Институт химической физики имени Н.Н. Семенова РАН, Институт автоматизации проектирования РАН, Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Центральный институт авиационного моторостроения имени П.И. Баранова, Институт гидродинамики имени М.А. Лаврентьева СО РАН.

Таким образом можно заключить, что диссертация Лаврука Сергея Андреевича «Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов» соответствует требованиям пункта 9, «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года, и «Изменений, которые вносятся в Положение о присуждении ученых степеней», утвержденных постановлением Правительства Российской Федерации №335 от 21 апреля 2016 года, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 - «Механика жидкости, газа и плазмы».

Отзыв на диссертацию заслушан и обсужден на заседании отдела механики Математического института имени В.А. Стеклова РАН 24 февраля 2021 г.

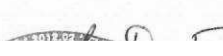
Отзыв составил:  
Д.ф.-м.н., в.н.с.  
отдела механики МИАН

В.В. Марков

Заместитель директора  
по научной работе МИАН,  
академик РАН  
Дмитриевич

Л.Д. Беклемишев

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Математический институт  
им. В.А. Стеклова Российской академии наук».  
Адрес: 119991, г. Москва, ул. Губкина, д. 8, Россия.  
Телефон: +7 (495) 984 81 41, E-mail: [steklov@mi-ras.ru](mailto:steklov@mi-ras.ru), веб-сайт: <http://www.mi-ras.ru>.

Подпись В.В. Марков   
Ученый секретарь М

Л.Д. Беклемишев

С.А. Толкуров

Сведения о ведущей организации по диссертации  
**Лаврука Сергея Андреевича**  
**" Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения**  
**ультрадисперсных частиц металлов "** по специальности 01.02.05 — Механика  
 жидкости, газа и плазмы  
 на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Полное наименование организации в соответствии с уставом:	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук
Сокращенное наименование организации в соответствии с уставом:	МИАН
Ведомственная принадлежность организации	Российская академия наук
Полное наименование структурного подразделения, составляющего отзыв:	Отдел механики
Почтовый адрес организации:	119991, г. Москва, ул. Губкина, д. 8, Россия
Веб-сайт	<a href="http://www.mi-ras.ru">http://www.mi-ras.ru</a>
Телефон	+7 (495) 984 81 41
Адрес электронной почты	<a href="mailto:steklov@mi-ras.ru">steklov@mi-ras.ru</a>

**Список основных публикаций работников структурного подразделения,** составляющего отзыв, в рецензируемых научных изданиях за последние пять лет по теме диссертации (не более 15 публикаций).

№	Авторы	Название	Издательство, журнал, год, №, страницы	Вид, год
1	В. А. Левин, И. С. Мануйлович, В. В. Марков	Исследование вращающихся волн детонации в кольцевом зазоре.	Тр. МИАН, -2020, - Т.310, -С. 199–216.	Статья, 2020
2	В.А. Левин, И.С. Мануйлович, В.В. Марков.	Вращающаяся детонация в камере сгорания с радиальной подачей горючей смеси.	ХII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики: сборник трудов в 4 томах. Т. 2: Механика жидкости и газа. Уфа: РИЦ БашГУ. - 2019. - С. 822-824.	Статья, 2019
3	В. А. Левин, И. С. Мануйлович, В. В. Марков,	Вращающаяся волна детонации в кольцевом зазоре.	Тр. МИАН, -2018, - Т.300, -С. 135–145.	Статья, 2018



4	V. A. Levin, I. S. Manuylovich, V. V. Markov, Igor P. Bolshiyarov, Nikolay N. Zakharov, Yu. K. Levin.	Effect of nanosized additives on the improvement of the efficiency of composite fuel.	Nanosci. Technol. Int. J., -2018, -V.9, -№.1,- P. 69–76.	Статья, 2018
5	V.A. Levin, I.S. Manuylovich, V.V. Markov.	Formation of 3D Detonation in Supersonic Flows by Solid Walls of Special Shape.	30th Int. Symp. on Shock Waves 1. Springer, Cham, -2017, DOI 10.1007/978-3-319-46213-4_75, P. 441–446.	Статья, 2017
6	V.A. Levin, I.S. Manuylovich, and V.V. Markov.	Cellular and Spin Detonation in 3D Channels.	30th Int. Symp. on Shock Waves, 1. Springer, Cham, -2017, DOI 10.1007/978-3-319-46213-4_76, P. 447–452	Статья, 2017
7	V.A. Levin, I.S. Manuylovich, and V.V. Markov.	Galloping Detonation in a Fuel Mixture Jet.	30th Int. Symposium on Shock Waves 1. Springer, Cham, -2017, DOI 10.1007/978-3-319-46213-4_77, P. 453–456	Статья, 2017
8	Vladimir A. Levin, Ivan S. Manuylovich, Vladimir V. Markov.	Numerical Simulation of Multidimensional Modes of Gaseous Detonation.	Combustion Science and Technology, - 2016, -V.188, Issue 11–12, -P. 2236–2249.	Статья, 2016
9	Vladimir A. Levin, Ivan S. Manuylovich, Vladimir V. Markov.	On Analogy of 2D and 3D Combustible Mixture Flows.	Combustion Science and Technology, - 2016, -V.188, Issue 11–12, -P. 2250–2266.	Статья, 2016
10	В.А. Левин, И.С. Мануйлович, В.В. Марков.	Численное моделирование спиновой детонации в каналах круглого сечения	Ж. выч. матем. и матем. физики. – 2016, -Т.56, -№ 6. -С. 1122–1137.	Статья, 2016

Первый заместитель ди  
МИАН

А.Д. Изаак