

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д003.035.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
И ПРИКЛАДНОЙ МЕХАНИКИ ИМ. С.А. ХРИСТИАНОВИЧА СО РАН, ПО
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА
НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 12.03.2021 №3

О присуждении Лавруку Сергею Андреевичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Математическое моделирование процессов плавления и детонационного горения ультрадисперсных частиц металлов» по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы, принята к защите 30 октября 2020 г. (протокол заседания №8) диссертационным советом Д003.035.02, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки (ФГБУН) Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича (ИТПМ) СО РАН, ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, утвержденным приказом Рособнадзора от 16.11.2007 г. № 2249-1603 и продлением срока полномочий приказом Минобрнауки России от 10.09.2009 (№59 1925-1734), подтверждением полномочий от 11.04.2012 (№ 105/нк) и изменениями от 08.06.2016 (№ 661/нк) и от 3.08.2018 (№59/нк).

Соискатель Лаврук Сергей Андреевич, 1991 года рождения, окончил Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Омский государственный технический университет» по специальности магистр техники и технологии; в 2018 году окончил аспирантуру в ФГБУН ИТПМ СО РАН, работает младшим научным сотрудником в ФГБУН ИТПМ СО РАН.

Диссертация выполнена в лаборатории «Волновые процессы в ультрадисперсных средах» ФГБУН ИТПМ СО РАН.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук **Федоров Александр Владимирович**;
доктор физико-математических наук, Хмель Татьяна Алексеевна, ИТПМ СО РАН, лаборатория «Волновые процессы в ультрадисперсных средах», ведущий научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

Ждан Сергей Андреевич, доктор физико-математических наук, с.н.с., ФГБУН Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, заведующий лабораторией динамики гетерогенных систем;

Уткин Павел Сергеевич, кандидат физико-математических наук, доцент, ФГБУН Института автоматизации проектирования РАН, старший научный сотрудник отдела вычислительных методов и турбулентности дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – ФГБУН Математический институт им. В.А. Стеклова РАН в своем положительном отзыве, подписанном Марковым Владимиром Васильевичем, доктором физико-математических наук, ведущим научным сотрудником отдела механики, указала, что диссертация является завершенным научным исследованием, вносящим заметный вклад в данный раздел современной механики и 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.

Соискатель имеет 73 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 10 работ, из них в рецензируемых научных

изданиях опубликовано 4 работы. Авторский вклад заключается в разработке и доработке программных кодов при моделировании методами молекулярной динамики плавления частиц металлов, феноменологических подходов, а также исследовании детонационного горения частиц алюминия, проведении вычислительных экспериментов, обработке и анализе результатов. Опубликованные работы представляют собой статьи в научных журналах и материалах конференций общим объемом 80 страниц и в полном объеме отражают содержание диссертации. Общий авторский вклад составляет около 65%.

Наиболее значимые результаты диссертации изложены в публикациях:

1. 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.

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. 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.

На диссертацию поступили положительные отзывы со следующими замечаниями:

– официального оппонента д.ф.-м.н. Ждана С.А.: 1. Нет объяснения, почему для одинаковых углов расширения канала при диаметре частиц 400 нм критическая ширина канала меньше чем для частиц с диаметром 200 нм. 2. Имеются неточности в обозначениях и опечатки;

– официального оппонента к.ф.-м.н. Уткина П.С.: 1. Насколько, фактор нестационарности окружающих частицу условий может сказываться на результатах плавления и выводах первой главы? 2. Кажется необоснованной ссылка на работу [96], так как в ней используемые диссертантом уравнения не рассматривались. 3. Почему на графиках в главе 2 зависимости

представлены от времени, а не от пространственной переменной, как это обычно делается в моделях ЗНД? 4. Неясно, какой характерный масштаб физико-химических процессов за фронтом лидирующей волны. 5. Скупо описан численный метод в Главе 3, не понятен порядок аппроксимации и является ли метод по времени и по пространственным переменным консервативным. 6. Почему в качестве начальных условий используется плоская детонационная волна, а не волна с ячеистой структурой, и какой эффект можно наблюдать при смене начальных условий?

– Ведущей организации – Математический институт им. В.А. Стеклова РАН: 1. Чем обоснован выбор потенциалов взаимодействия для каждого из материалов? 2. Не совсем ясна физическая интерпретация постановки начально-краевой задачи о нагреве наночастицы; 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. 3. 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? 4. 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? 5. Результаты, представленные на рис. 3.5.б подобны картине течения в задаче Солоухина, воспроизведенной в расчетах Левина, Маркова, Мануйловича (ДАН, 2011, 439(1)). Однако эта работа не упомянута и сравнение не проведено.

На автореферат поступили положительные отзывы со следующими замечаниями:

1. Отсутствует информация об исследованиях других теплофизических характеристик (д.ф.-м.н., профессор Крайнов А.Ю);

2. Отсутствует подробное описание моделей (д.ф.-м.н., доцент Луценко Н.А.; д.ф.-м.н., профессор Зарко В.Е.).

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что официальные оппоненты являются признанными высокопрофессиональными специалистами в области исследований процессов происходящих в многофазных средах и детонационного горения, а ведущая организация проводит успешные исследования в области механики многофазных сред.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- предложен алгоритм расчета плавления и кристаллизации наночастиц металлов (золота, железа и алюминия) на основе методов молекулярной динамики и способ определения коэффициентов теплоемкости наночастиц на основе анализа калорических кривых;

- установлено, что использование различных коэффициентов теплоемкости (объемного материала, либо зависящего от размера наночастиц) не влияет на расчетные времена плавления и распределение температур внутри наночастиц алюминия и золота, при этом времена плавления наночастиц железа различаются практически в 2 раза;

- обнаружено, что при моделировании детонационного горения микро- и наночастиц алюминия эффект зависимости теплоемкости от температуры во временах задержки воспламенения и структурах детонации отсутствует; различия наблюдаются на узких участках структуры детонационной волны и не превышают 5%;

- определены характеристики волновых картин основных режимов распространения детонации в каналах с линейным расширением: докритического, критического и закритического. Выявлены их существенные различия в микронных (2–3,5 мкм) и субмикронных (200–400 нм) взвесах;

– установлено влияние геометрических параметров: ширины канала, угла расширения, размера частиц на режимы распространения детонации в расширяющихся каналах.

Теоретическая значимость работы заключается в том, что полученные методами молекулярной динамики результаты могут быть использованы для оценочных расчетов времени и температуры плавления частиц в диапазоне от 5 до 15 нм с помощью феноменологических моделей. Классификация режимов и данные по критическим условиям распространения детонации в расширяющихся каналах позволяют улучшить понимание физики взрыва и процессов гетерогенной детонации.

Практическая значимость работы заключается в том, что использованные в ней численные методы могут применяться для исследования детонационных течений в газовзвесьях ультрадисперсных частиц алюминия, а полученные результаты – для проектирования трактов каналов технических устройств, предполагающих как развитие и распространение детонации, так и ее подавление или предотвращение.

Достоверность результатов основана на использовании признанных физических моделей и корректного математического аппарата, подтверждается удовлетворительным согласованием с данными других авторов и экспериментальными данными, а также численными результатами, полученными на различных расчетных сетках с подтверждением повторяемости.

Личный вклад автора состоит в самостоятельной разработке алгоритмов для моделирования методами молекулярной динамики плавления частиц металлов, феноменологических подходов, а также в доработке алгоритмов для исследования детонационного горения частиц алюминия в областях сложной геометрии. Автор проводил численные расчеты, обработку и анализ результатов, а также участвовал в обсуждении и подготовке статей по результатам исследований.

На заседании 12 марта 2021 г. диссертационный совет принял решение присудить Лавруку С.А. ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 12 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены в состав совета 0 человек, проголосовали: за – 19, против – 1, не действительных бюллетеней – 0.

Председатель
диссертационного совета



Фомин Василий Михайлович

Учёный секретарь
диссертационного совета

Гапонов Сергей Александрович

15.03.2021