

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Шульца Дениса Сергеевича «Исследование нестационарных процессов безгазового горения гетерогенных систем», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

1. Актуальность темы

Безгазовое горение используется во многих технических приложениях, например, СВС составы применяются в качестве локального автономного источника нагрева, как источники тепла для импульсных устройств, как метод получения новых материалов, а, следовательно, математическое моделирование процессов безгазового горения имеет важное значение. Актуальность работы в прикладном плане состоит в том, что учёт влияния гетерогенности структуры при нестационарном безгазовом горении позволит прогнозировать режим горения и скорость распространения волны горения, что в свою очередь расширит представления о механизме горения гетерогенных систем, а также позволит учёным-исследователям планировать эксперименты, раскрывающие кинетику и механизм реакций, структуру фронта горения.

2. Структура и содержание диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованной литературы. Объем диссертации составляет 137 страниц. Список использованных источников содержит 124 наименований.

Во введении сформулированы цели и задачи диссертационной работы, обоснована актуальность темы и поставленных задач, представлены положения, выносимые на защиту, научная новизна, научная и практическая значимость результатов исследования.

В первой главе диссертации проведен обзор научно-технической литературы, включающий в себя научные основы метода самораспространяющегося синтеза, приведено описание математических моделей стационарного и нестационарного безгазового горения в теоретических и экспериментальных работах, в том числе с использованием модели реакционной ячейки при решении стационарных задач СВС. Приведены работы, посвященные стационарным моделям, учитывающие гетерогенность с использованием моделей реакционных ячеек.

Во второй главе диссертации представлена физическая и математическая постановка задачи безгазового горения с учетом гетерогенности структуры образцов с использованием двух моделей реакционных ячеек. Математическая модель нестационарного безгазового горения

основана на подходе, предложенным Хайкиным Б.И. Представлена методика численного решения системы уравнений разработанной в главе математической модели нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры и зависимости диффузии от температуры. Также в главе вводится математическая модель безгазового горения, не учитывающая влияние образующегося слоя продукта на диффузию реагентов. Проведено тестирование методики на решении модельных задач, показавшее совпадение с результатами других авторов, а, следовательно, показавшее правильность методики решения. При решении модельных задач автором были определены необходимые параметры разностной схемы (величина числа Куранта, необходимое количество точек разностной сетки), обеспечивающие удовлетворительную точность численных расчётов.

В третьей главе диссертации автор приводит результаты численного решения задачи для математической модели, не учитывающей влияние образующегося слоя продукта на диффузию реагентов. Автором получены зависимости скорости распространения фронта безгазового горения от размера гетерогенной структуры, энергии активации диффузии, качественно согласующиеся с экспериментальными данными. Определена граница существования устойчивого и пульсирующего режимов распространения фронта безгазового горения в поле параметров «размер гетерогенной структуры» - «отношение энергии активации диффузии и химической реакции». Приведены результаты численного моделирования нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры на основе математической модели, представленной в главе 2. Проведено сравнение результатов моделирования с использованием плоских и сферических реакционных ячеек, автором дано объяснение отличию скоростей волны горения для разного типа ячеек. Определено критическое значение параметра γ , при котором наблюдается переход к колебательному режиму, при этом расчёты показали, что значение данного параметра совпадает для плоских и сферических реакционных ячеек. В главе также проведено исследование влияния плавления одного из компонентов на скорость горения. С увеличением теплоты плавления скорость горения уменьшается. Также в главе приведены результаты расчета скорости безгазового горения в зависимости от размера гетерогенной структуры. Представлены результаты расчетно-теоретического анализа скорости горения многослойных биметаллических нанопленок. Получено удовлетворительное согласие значений скорости распространения волны безгазового горения с экспериментальными данными. Расчетно-теоретические значения скорости распространения волны безгазового горения с удовлетворительной точностью совпадают с экспериментальными данными в широком диапазоне величин размера гетерогенной структуры СВС состава.

В четвёртой главе диссертации представлена постановка задачи распространения волны горения в коническом образце при наличии теплоотвода на внешних границах в двумерной

осесимметричной постановке. Посредством вычислительных экспериментов автор определяет критические величины теплоотвода, приводящие к срыву горения в коническом образце без учёта и с учётом гетерогенности структуры образцов, а также с учётом плавления. Математическое моделирование этого процесса необходимо, так как оно может показать степень изменения глубины превращения исходных компонентов после затормаживания фронта горения в процессе его остывания. Для численного решения автор использует переход к системе координат, связанной с формой образца. Показано, что плавление оказывает слабое влияние на скорость распространения волны горения в коническом образце. Все полученные результаты численных исследований влияния теплоотдачи на закономерности распространения волны горения в коническом образце могут быть использованы для планирования экспериментов.

По каждой главе автор приводит развернутые выводы, а основные результаты диссертационного исследования приведены в заключении.

3. Научная новизна

Можно выделить следующие основные элементы научной новизны диссертации:

1. проведено численное моделирование нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры образцов с использованием моделей плоских и сферических реакционных ячеек, учитывающих влияние образовавшегося слоя продукта на диффузию; показана существенная зависимость скорости распространения волны безгазового горения от формы реакционной ячейки;
2. расчётно-теоретическим путём выявлено, что гетерогенность структуры образцов, учитываемая моделями плоских и сферических реакционных ячеек, не влияет на область существования автоколебательного режима распространения волны безгазового горения;
3. проведено численное моделирование нестационарного безгазового горения многослойных биметаллических наноплёнок с использованием модели плоских реакционных ячеек;
4. исследовано влияние теплоотдачи при горении конического образца и определены величины несгоревшей узкой части конуса в зависимости от интенсивности теплоотдачи и угла полураствора конуса.

4. Значимость результатов для науки и практики

Полученные автором результаты диссертационного исследования важны для науки, так как расширяют представления о механизме безгазового горения гетерогенных систем в нестационарной постановке, а значит, могут быть использованы для теоретического анализа нестационарного безгазового горения СВС систем с учётом их гетерогенной структуры.

В практическом плане представленная в диссертации методика расчета скорости нестационарного безгазового горения с учетом гетерогенности образцов позволит прогнозировать скорость распространения волны безгазового горения при заданном размере гетерогенной структуры, в частности для биметаллических наноплёнок. Результаты численных исследований влияния теплоотдачи на закономерности распространения волны горения в коническом образце могут быть использованы для планирования экспериментов, раскрывающих кинетику и механизм реакций.

5. Достоверность результатов

Достоверность результатов диссертационного исследования автор подтверждает выполнением законов сохранения массы и энергии в численной реализации математических моделей, сеточной сходимостью численного решения задач при уменьшении шагов разностной схемы, а также совпадением результатов решения задачи о скорости распространения волны безгазового горения в классической постановке с известными в научной литературе результатами.

6. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, выносимых на защиту.

Обоснованность научных положений, выводов и рекомендаций, выносимых на защиту, подтверждается обоснованностью предположений математической модели безгазового горения, применением классических методов математического моделирования и методов численного решения системы уравнений математической модели безгазового горения. Обоснованность научных положений и выводов исследования подтверждается тестированием методики численного решения, сопоставлением результатов расчётов с данными экспериментально измеренной скорости горения, согласованностью результатов численных исследований с результатами научно-исследовательских работ других авторов.

7. Полнота опубликования результатов исследований.

Материалы диссертационных исследований достаточно полно опубликованы: 3 статьи в журналах («Физика горения и взрыва», «Компьютерные исследования и моделирование», «Известия высших учебных заведений. Физика»), рекомендованных ВАК для публикации научных результатов диссертаций на соискание учёной степени кандидата и доктора наук, из них 1 статья в журнале, переводная версия которого индексируется Web of Science; 7 публикаций в сборниках материалов международного семинара, международной и всероссийских научных и научно-практической конференций.

8. Автореферат

Автореферат логически правильно структурирован и его содержание соответствует содержанию рукописи диссертации.

9. Замечания

По диссертационной работе имеются следующие замечания:

1. Из рисунка 3.27 диссертационной работы видно, что увеличение параметра γ приводит к снижению скорости горения, что противоречит выводам данного параграфа, а также результатам на рис. 3.31 - «Из графика видно, что с увеличением параметра γ скорость фронта горения увеличивается.»
2. Анализ результатов расчётов скорости безгазового горения в Главе 4 для двух моделей с учётом (4.18-4.24) и без учёта (4.5-4.8) гетерогенности структуры показал, что зависимости скорости распространения волны безгазового горения практически совпадают, что подтверждается множеством рисунков (рис. 4.42-4.44, 4.52-4.54, 4.62-4.64). Из этого можно сделать вывод, что диффузией через слой продукта можно пренебречь, и она не играет существенной роли, или этот результат просто отражает «неудачный» выбор параметров? Этот же вопрос можно отнести и к результату, что плавление одного из компонентов практически не сказывается на скорости горения (рис. 4.77-4.79).
3. В автореферате имеется опечатка в уравнении диффузии компонентов в реакционной ячейке (3). Согласно рукописи диссертации уравнение (3) должно быть записано

следующим образом:
$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_0 e^{-E_d/RT} \frac{1}{y^m} \frac{\partial}{\partial y} \left(y^m \frac{\partial c}{\partial y} \right)$$
. При $m=0$ уравнение (3) в автореферате соответствует уравнению (2.3) в диссертации, при $m=2$ – уравнению (2.12).

10. Общая характеристика диссертационной работы

Указанные замечания не снижают научной и практической значимости представленных результатов и общей положительной оценки работы. Диссертация является завершённой научно-квалификационной работой.

Считаю, что диссертационное исследование вносит существенный вклад в развитие исследований в области «Закономерности и механизмы распространения, структура, параметры и устойчивость волн горения, ...» (п. 7 паспорта специальности), соответствует специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Считаю, что диссертация Шульца Дениса Сергеевича «Исследование нестационарных процессов безгазового горения гетерогенных систем» соответствует критериям, установленным

Положением о порядке присуждения ученых степеней, п. 9, утвержденным постановлением Правительства РФ от 24.09.13 г. № 842, а ее автор – Шульц Денис Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Официальный оппонент

Салганский Евгений Александрович
доктор физико-математических наук,
01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика
экстремальных состояний вещества,
ведущий научный сотрудник Федерального
государственного бюджетного учреждения науки
«Институт проблем химической физики Российской
академии наук»

22.11.2018

142432 Московская область, г. Черноголовка, проспект академика Семенова, 1.
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической
физики Российской академии наук (ИПХФ РАН)
тел. +7(495)993-57-07
E-mail: sea@icp.ac.ru
Сайт: <https://www.icp.ac.ru>

Подпись Салганского Е.А. удостоверено
Ученый секретарь ИПХФ РАН,
доктор химических наук



Б.Л. Психа