

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу
Брендакова Романа Владимировича
«Моделирование технологии фторидного передела вольфрама»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Диссертационная работа Брендакова Р.В. посвящена созданию и разработке физико-математической модели технологических процессов фторидного передела металлического вольфрама, учитывающих сложные физико-химические явления, вызванные гетерогенными химическими реакциями, протекающими на поверхностях реакционных зон в реакторе фторирования вольфрама и реакторе восстановления гексафторида вольфрама.

Актуальность темы исследования

В современных отраслях промышленности, относящихся к химии, машиностроению, радиоэлектронике, авиа- и автостроению, атомной и военной технике – научный прогресс, экономические и экологические показатели в значительной степени определяются конструкционными материалами, которые используются при создании, эксплуатации производств и выпуске различных видов товарной продукции. Традиционно выпускаемые металлы и их многочисленные сплавы уже не удовлетворяют требованиям по химической стойкости, удельной плотности и физико-механическим свойствам, особенно при работе в коррозионных средах в условиях больших механических нагрузок и высоких температур. Поэтому, сейчас большое внимание уделяется процессам обработки тугоплавких металлов, таких как вольфрам W, молибден Mo, титан Ti, цирконий Zr и др.

В последнее время быстрыми темпами стали развиваться методы осаждения вольфрама из парогазовых фаз. Как показывают работы зарубежных и российских исследователей применение этих методов дает возможность при сравнительной простоте технологического процесса получать как качественные вольфрамовые покрытия, так и изделия из него. Вследствие этого в настоящее время возникла насущная потребность обобщения материала по технологическим процессам получения вольфрама и некоторых его сплавов методом осаждения из парогазовой фазы. Это полностью соответствует теме научных исследований, сформулированной в представленной диссертационной работе и ее актуальность для интенсивно развивающихся современных отраслей производства, связанных с созданием новых образцов оборудования и материалов с уникальными свойствами, не вызывает никакого сомнения.

Структура и объем диссертационной работы

Диссертационная работа представлена на 110 страницах машинописного текста и включает в себя введение, четыре главы, заключение, список использованных источников и литературы из 56 наименований, приложение.

Во введении представлена актуальность темы диссертационного исследования, отражены цели исследования, новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, методы исследования, приведены положения; выносимые на защиту, раскрыта структура диссертационной работы.

Первая глава носит обзорный характер. В ней представлен обзор научно-технической литературы, посвященной исследованию по вопросам газозных методов переработки тугоплавких металлов, а также литературы, касающейся вопросов численного решения технологических задач. Показано, что на данный момент эта тема в научной литературе разработана недостаточно полно. Это связано с тем, что технология получения вольфрамовых изделий до недавнего времени основывалась только лишь на широко известном металлокерамическом методе. В настоящее время развиваются методы плазменного напыления, электродуговой плавки и плавки электронным пучком. Еще более узок перечень технологических способов нанесения вольфрамовых покрытий.

Во второй главе рассматривается физическая и математическая постановка задач фторирования металлического вольфрама и восстановления гексафторида вольфрама водородом. В данной главе подробно описаны этапы создания физических моделей процесса фторирования порошкообразного металлического вольфрама и процесса восстановления гексафторида вольфрама газообразным водородом, которые составляют основу технологии газозного фторидного передела металлического вольфрама.

Рассмотрен как процесс получения газообразного гексафторида вольфрама, который образуется в результате протекания реакции между газовым потоком фтора и порошком вольфрама, так и процесс, составляющим основу технологии фторидного передела вольфрама, восстановления гексафторида вольфрама газообразным водородом.

Так же, в этой главе диссертации представлена математическая постановка двух рассматриваемых в диссертационной работе технологических процессов.

Для описания процесса фторирования порошкообразного металлического вольфрама элементарным фтором используется система дифференциальных уравнений в безразмерной форме, записанная в прямоугольной декартовой системе координат, и состоящая из уравнения неразрывности, трехмерных уравнений движения Навье-Стокса, записанных в естественных переменных, а также уравнения переноса теплоты и вещества при наличии гетерогенной реакции на нижней поверхности рабочей зоны химического реактора.

Предлагаемая математическая модель позволяют получить однозначное решение по распределению компонент вектора скорости, поля температуры и концентрации ключевого компонента в рабочей зоне фторатора при наличие соответствующих начальных и граничных условий.

Такой подход к моделированию технологического процесса, осложненного химической реакцией, позволяет использовать минимальное количество упрощений и является наиболее точным, но и он, как отмечается в диссертации, имеет определенные недостатки. В первую очередь, это дополнительные трудности, возникающие при численной реализации такой модели процесса. Переменная плотность в уравнениях переноса импульса вызывает дополнительные итерации вычислительного процесса, что ведет к существенному увеличению времени расчета.

Для получения высокой эффективности процесса фторирования в реальных химических реакторах используются малые значения скорости газов. Для получения высокой эффективности процесса фторирования в реальных химических реакторах используются малые значения скорости газов. Это позволяет по аналогии с приближением Буссинеска не учитывать изменение плотности среды в инерционных слагаемых переноса импульса, что упрощает постановку задачи для процесса фторирования.

Вторую часть технологии фторидного передела вольфрама составляет процесс восстановления гексафторида вольфрама газообразным водородом.

Процесс восстановления гексафторида вольфрама водородом в работе математически описывается системой дифференциальных уравнений аналогичной предыдущей только в цилиндрической системе координат и с учетом осесимметричности задачи. При этом учитывается, что при протекании смеси газов возле подогреваемой подложки, на ее поверхности интенсивно протекает химическая реакция, происходит изменение химического состава смеси и ее плотности.

В реальных условиях производства, для повышения эффективности использования входной смеси газов, она подается в реактор восстановления с линейной скоростью, не превышающей сантиметры в секунду. Такой тип течения полностью соответствует допущениям о незначительном влиянии изменения плотности среды в инерционных слагаемых уравнения движения на характер течения. Это обстоятельство позволяет автору, по аналогии с приближением Буссинеска, учитывать изменение плотности потока смеси газов только при записи внешней силы. Причем, в отличие от приближения Буссинеска, в данной работе, при рассмотрении силы Архимеда, учитывается не только градиент температуры, но и изменение концентрации ключевого компонента смеси газов в рабочем объеме реактора восстановления.

В третьей главе диссертации обосновывается выбор численного метода и описывается схема его реализации для решения систем дифференциальных уравнений второго порядка с частными производными. Все задачи, представленные в работе, решались численно методом конечных разностей.

Основной проблемой решения уравнений движения несжимаемой вязкой жидкости является присутствие в этих уравнениях неизвестной функции гидродинамического давления. В отличие от задач о течении сжимаемой среды, давление не может быть выражено через какие-либо физические переменные. Так как в рассматриваемой системе уравнений не присутствует частной производной от давления по времени, то для него нельзя сформулировать задачу с начальными условиями. Отсюда вытекает, что поле давления должно формироваться на каждом временном шаге так, чтобы обеспечивать соленоидальность поля скорости.

В настоящее время наиболее перспективным подходом является метод решения уравнений переноса импульса в физических переменных «скорость – давление». Поэтому в работе решение задач выполнялось в переменных «скорость – давление». Одним из эффективных способов решения уравнений движения несжимаемой среды в переменных «скорость – давление» является метод физического расщепления по времени полей скорости и давления.

Для решения систем дифференциальных уравнений, типа уравнений переноса скалярной транспортабельной субстанции, в работе использовалась неявная двухслойная схема переменных направлений, предложенная Дугласом и Ганом и записанная в «дельта» форме. Для решения инженерных задач и в том числе задач газовой металлургии перспективными являются трехточечные разностные схемы, которые не зависят от сеточного числа Рейнольдса. В работе рассматривалась одна из наиболее известных, и апробированных, трехточечная разностная схемы, так называемая «экспоненциальная схема».

Четвертая глава посвящена анализу результатов численных расчетов, выполненных по созданной математической модели технологии фторидного передела вольфрама.

На рисунках изображены результаты численных исследований двух процессов, составляющих основу технологии фторидного передела вольфрама. Процесс фторирования порошка металлического вольфрама фтором и процесс восстановления гексафторида вольфрама водородом.

Достоверность численного решения динамики жидкости для установившегося течения в канале, квадратного сечения определялась сопоставлением с аналитическим решением, приведены результаты тестовых исследований на сеточную сходимость численного решения.

Модель процесса восстановления гексафторида вольфрама водородом так же прошла тщательную апробацию на сеточную сходимость, сравнение с аналитическими решениями упрощенных вариантов течения, сравнением с численными результатами других авторов.

Представлены новые результаты численных расчётов распределения составляющих вектора скорости, температуры, относительной массовой концентрации исходных реагентов и продуктов химических реакций фторирования металлического вольфрама и восстановления гексафторида вольфрама водородом внутри соответствующих химических реакторов. Рассмотрено влияние как режимных, так и геометрических параметров химических реакторов фторирования и восстановления на эффективность и интенсивность соответствующих процессов. Впервые показано влияние закрутки осевого стержня вместе с подложкой на скорость протекания реакции восстановления гексафторида вольфрама водородом. Представлено также влияние температурного поля газовой среды на скорость протекания реакции фторирования металлического вольфрама и скорость протекания реакции восстановления гексафторида вольфрама водородом.

Анализ проведённых численных исследований показал, что для процесса фторирования и для процесса восстановления можно получить подобные картины протекания соответствующей химической реакции при различных режимных и геометрических параметрах. Это позволяет сократить область поиска оптимальных режимов протекания процесса до одного геометрического размера аппарата, а затем провести масштабный переход до нужных размеров без потери найденной эффективности.

В заключении диссертационной работы сформулированы основные выводы по проведённому исследованию. Выводы являются обоснованными.

Содержание **автореферата** полностью отражает содержание диссертации; а сам автореферат отвечает всем предъявляемым требованиям.

Соответствие паспорту специальности.

Диссертационная работа соответствует паспорту специальности 01.04.14 согласно п.7 «Экспериментальные и теоретические исследования процессов совместного переноса тепла и массы в бинарных и многокомпонентных смесях веществ, включая химически реагирующие смеси».

Таким образом, диссертационная работа Брендакова Р.В. представляет завершённое научное исследование с логической взаимосвязью между разделами, выполненное на высоком уровне, достаточно хорошо и грамотно оформлено.

Степень обоснованности научных положений и выводов, сформулированных в диссертации

Работоспособность модели и достоверность полученных результатов подтверждается применением апробированных вычислительных методов, проведением тестовых расчётов,

сравнением результатов расчётов с аналитическим решением и известными экспериментальными данными, а также сравнением полученных результатов с результатами других исследователей.

Научная новизна работы заключается в формулировке физических моделей технологических процессов фторидного передела вольфрама и создании адекватных математических моделей, позволяющих на основе разработанных программных модулей получить новые численные результаты распределения переноса импульса, теплоты и вещества в рабочей зоне реактора фторирования и химического реактора для восстановления гексафторида вольфрама газообразным водородом.

Представлены новые результаты численных расчётов распределения ключевых компонент внутри соответствующих химических реакторов. Рассмотрено влияние как режимных, так и геометрических параметров химических реакторов фторирования и восстановления на эффективность и интенсивность соответствующих процессов. Впервые показано влияние закрутки осевого стержня вместе с подложкой на скорость протекания реакции восстановления гексафторида вольфрама водородом.

Значимость результатов диссертационного исследования

1. Разработанная оригинальная физико-математическая модель технологии фторидного передела металлического вольфрама позволяет оценить эффективность процессов фторирования вольфрама и восстановления гексафторида вольфрама водородом. Полученные, с помощью созданной модели, результаты позволяют более полно разобраться в физике рассматриваемого явления.

2. Численные результаты расчётов двухкомпонентных газовых потоков могут быть использованы при исследовании процессов фторирования и восстановления тугоплавких металлов, а также могут быть полезны при разработке новых способов и конструкций аппаратов технологии фторидного передела тугоплавких металлов.

3. Полученные в диссертации численные результаты могут быть применены при моделировании установившегося течения закрученного потока двухкомпонентной смеси газов переменной плотности.

4. Результаты научной исследовательской работы по моделированию технологии фторидного передела вольфрама имеют практическую значимость, что подтверждается актом внедрения методики расчета процесса фторидного передела вольфрама применительно к аддитивным технологиям в практическую деятельность научно-технической ассоциации «Порошковая металлургия» г. Москва.

5. Результаты выполненных научных исследований способствовали оформлению заявки и получению патента на изобретение «Способ получения вольфрамового изделия послойным нанесением вольфрама и устройство для его осуществления» № 2641596 от 18.01.2018 г.

Основные результаты диссертационного исследования апробированы на всероссийских и международных конференциях. Основные материалы диссертационной работы опубликованы в 16 работах, из них 2 статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, 3 статьи в зарубежном электронном издании, индексируемом в международной базе Web of Science, 10 публикаций в сборниках материалов научного семинара, международных и всероссийских (в том числе с международным участием) научных и научно-практических конференций, 1 патент на изобретение РФ.

