

ОТЗЫВ
официального оппонента
на диссертационную работу Яковенко Ивана Сергеевича

**«Режимы распространения пламени в химически активных газах и газовзвесах»
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических
наук по специальности 01.04.14 - Теплофизика и теоретическая теплотехника.**

Исследования горения газовых смесей в замкнутых и открытых объемах и перехода их в детонацию в настоящее время выходят на новый этап развития благодаря появлению многопроцессорных вычислительных комплексов терафлопного уровня. Актуальность этих исследований связана, в частности, с повышением водородной безопасности АЭС и проектированием двигателей внутреннего сгорания нового типа.

Целью работы является компьютерное моделирование нестационарных и переходных режимов распространения волн горения и детонации в газовых смесях различного состава, в том числе при наличии мелкодисперсных твердых частиц. Математическое моделирование позволяет отрабатывать и уточнять методы и результаты диагностики этих процессов в лабораторных экспериментах.

Диссертация состоит из введения, пяти глав основного текста, заключения и списка литературы, включающего 151 наименование.

Во введении обосновывается актуальность исследований, формулируется цель, описываются задачи и основные результаты, выносимые на защиту. Приводится список из 10 публикаций автора по теме диссертации в изданиях, рекомендованных ВАК и список конференций (22 конференции) на которых докладывались основные результаты.

В первой главе диссертации дан краткий обзор современных работ по теоретическим и экспериментальным исследованиям, а также математическому моделированию процессов горения и детонации газовых смесей и газовзвесей. Здесь же описываются основные блоки используемых в работе математических моделей:

- полная система уравнений газовой динамики с учетом сжимаемости, вязкости, теплопроводности, многокомпонентной диффузии;
- уравнения состояния газовой смеси, заданные таблично с учетом температурных зависимостей теплоемкостей и энтальпии образования каждой из компонент смеси;
- методика расчета химических реакций с учетом детальных кинетических механизмов окисления водородокислородных и водородовоздушных смесей;
- двухскоростная континуальная модель для описания динамики взвешенных микрочастиц в случае высоких массовых концентраций;
- приближение Стокса для низких массовых концентраций взвешенных частиц;

- методика расчета коэффициентов переноса теплового излучения в рамках диффузионного приближения.

Во второй главе диссертации приводится описание вычислительных алгоритмов. Основу здесь составляет явный метод крупных частиц «Белоцерковского – Давыдова» с модификацией конвективных потоков, обеспечивающей второй порядок аппроксимации. Кратко описана параллельная объектно – ориентированная платформа для создания пакетов программ вычислительной гидродинамики, разработанная на языке Fortran 2008 с использованием технологии MPI. Дано описание библиотеки классов, включающей такие пользовательские типы данных (классы), как скалярные, векторные и тензорные поля. Использование библиотеки классов позволяет разбить процедуру решения задачи на два этапа – постановку задачи с помощью отдельного интерфейсного приложения и ее решения вычислительным пакетом, состоящим из набора эффективных «солверов», отвечающих за различные физические процессы (расщепление по физическим процессам). Так отдельные решатели используются для расчета газодинамических потоков, учета теплопроводности, молекулярной диффузии, решения уравнений химической кинетики и расчетов уравнения состояния.

В третьей главе диссертации описываются трехмерные расчеты процесса ускорения пламени и перехода к детонации в гладких прямоугольных каналах, наполненных как высокоактивной стехиометрической смесью водорода и кислорода, так и низко активной смесью водорода и воздуха.

В первом случае волна горения инициировалась вблизи закрытого торца в плоском слое с температурой 3000К. Размеры канала: 250x10x10 мм. Расчеты проводились на кубической сетке с длиной ребра 0.1 мм. Общее количество расчетных ячеек составило 25 миллионов.

Помимо этой основной задачи решались и вспомогательные в более узком канале, а также на более подробной сетке в двумерной постановке.

При решении вспомогательных задач было установлено, что топология фронта пламени в высокоактивных смесях зависит от начальных возмущений, однако в целом динамика развития волны горения остается неизменной. Сравнение двумерных и трехмерных расчетов показало, что наличие дополнительной степени свободы ведет к более стремительному развитию процесса.

Анализ трехмерных газодинамических полей, полученных в основном расчете, дает основание утверждать, что газодинамический поток перед фронтом пламени остается ламинарным на протяжении всего процесса ускорения вплоть до перехода к детонации. Фронт пламени, при этом, имеет сложную нерегулярную структуру, что раньше в литературе трактовалось как свидетельство турбулентного характера процесса ускорения пламен. Специальная графическая обработка расчетных данных, выполненная автором, и моделирующая преломление проходящего светового пучка в теневых и штрилен съемках показала хорошее соответствие расчетных и наблюдаемых характеристик.

Для более детального анализа роли волн сжатия в процессе ускорения пламени были выполнены трехмерные расчеты по модели движущегося источника

энерговыведения, в рамках которой фронт пламени заменялся как набор источников конечного размера. Полученные результаты позволили выделить важный механизм усиления пикового давления, связанный с влиянием давления на время индукции воспламенения смеси. Зависимость времени индукции от давления для стехиометрической водородо – кислородной смеси является немонотонной и включает как области спада, так и участок роста.

Для анализа особенностей перехода медленного горения к детонации в условиях возрастания времени индукции с давлением была рассмотрена модельная задача в двумерной постановке, в рамках которой для уменьшения времени расчетов ускорение пламени до скорости звука в продуктах горения проводилось в потоке, формирующемся при движении поршня в канале. Было показано, что скорость пламени колеблется вблизи скорости звука в продуктах горения, а волна горения распространяется в виде двухфронтного комплекса, состоящего из ведущей ударной волны и фронта реакции, следующего за ней на некотором расстоянии. Как фронт пламени, так и ударная волна двигаются относительно свежей смеси со сверхзвуковой скоростью.

Далее, в третьей главе рассматриваются особенности развития волн горения в низко активных смесях.

Воспламенение бедной смеси, за исключением специальных случаев, не может инициировать устойчивого распространения пламени, однако, возникающие при этом очаги горения, за счет конвективного переноса, могут стать источником в областях большей концентрации водорода. В рецензируемой диссертации описаны проведенные автором исследования нестационарного процесса распространения пламени в бедных водородо-воздушных смесях. Рассматривается развитие горения в цилиндрическом замкнутом объеме диаметром 20 см и высотой в 10 см. и концентрацией водорода в 5,6 %. Для демонстрации различий динамики пламени в околопредельных случаях была также рассмотрена задача о горении в протяженной полуоткрытой трубе диаметром 4 см, заполненной 16% смесью водорода с воздухом.

Для численного решения этих задач использовалась двумерная модель движущегося источника энерговыведения. Показано, что при горении околопредельных смесей, взаимодействие отраженных волн сжатия с нагретым не полностью прореагировавшим газом внутри всплывающего термика может приводить к формированию очагового режима распространения пламени.

Четвертая глава диссертации посвящена компьютерному моделированию детонации в дисперсных средах и использованию детонации для создания направленного потока частиц в задачах имплантации.

Для инициирования детонационного сгорания топлива в гипотетических двигателях внутреннего сгорания нового поколения ключевым вопросом является снижение затрат на инициирование детонационного процесса. Одним из возможных путей его решения может оказаться инициирование детонации путем лучистого нагрева локализованного слоя частиц.

Автор проводит анализ возможных режимов воспламенения горючей смеси с примесью мелкодисперсных инертных взвешенных частиц и выявлены механизмы, ведущих к формированию детонации. Расчеты проводились методом крупных частиц в рамках континуальной модели дисперсной фазы. Задача рассматривалась в одномерном приближении. Было показано, что существует диапазон значений начальной толщины облака частиц, при котором нагрев частиц от внешнего источника теплового излучения с заданными характеристиками ведет к формированию устойчивой детонации в газовой смеси.

Вторая прикладная задача, решенная в диссертации, связана с оптимизацией технологии имплантации частиц на поверхность детонационной волной. Основным преимуществом детонационной имплантации по сравнению с технологией газоплазменного напыления является разгон микрочастиц в потоке до скоростей порядка 1000 м/сек, что значительно усиливает прочность сцепления частиц с материалом подложки. В двумерных расчетах, описанных в диссертации, рассматривалось распространение детонационной волны в сегменте канала протяженностью 4 см и ее взаимодействие со слоем взвешенных частиц при выходе из сопла. Предполагалось, что изначально частицы были распределены равномерно в тонком слое толщиной 1 мм вблизи среза сопла. Была использована континуальная модель микрочастиц и система двухтемпературных, двухскоростных уравнений динамики гетерогенной среды.

В результате проведенных вычислительных экспериментов было обнаружено, что для микрочастиц размером 1.0-10.0 мкм профилирование поверхности подложки приводит к существенному повышению удельной концентрации осевших частиц вблизи выпуклых элементов подложки.

В *пятой главе диссертации* проводится сравнение на тестовых задачах двух вычислительных алгоритмов для решения задач горения и детонации - метода «крупных частиц» Белоцерковского – Давыдова и метода КАБАРЕ Головизнина – Самарского. Метод крупных частиц с модифицированными конвективными потоками можно отнести к классическим численным методам. Он используется около сорока лет, и прекрасно зарекомендовал себя при решении многих прикладных задач. Метод КАБАРЕ представляет схемы нового поколения, которые при том же порядке аппроксимации имеют улучшенные дисперсионные и диссипативные свойства. В частности, схема КАБАРЕ обладает свойством временной обратимости, что говорит о полном отсутствии у нее т.н. аппроксимационной вязкости, в той или иной степени присущей всем остальным схемам.

На решении ряда тестовых и модельных задач в диссертационной работе показано, что бездиссипативность схемы КАБАРЕ дает ей на задачах горения и детонации заметные преимущества перед методом крупных частиц.

Оценивая диссертационную работу в целом, следует отметить, что она представляет собой законченное исследование, выполненное на высоком научном уровне.

Все заключения и выводы, содержащиеся в работе, строго научно обоснованы и их совокупность можно рассматривать как крупный вклад в развитие вычислительной теплофизики.

Основные положения, выносимые на защиту, можно резюмировать следующим образом:

- На основе детального трехмерного моделирования подтверждена ламинарность газодинамического течения в процессе ускорения пламени и перехода в детонацию в химически высокоактивных газовых смесях.
- Трехмерными расчетами подтверждена справедливость качественной теории ускорения пламени и перехода к детонации, ранее базировавшаяся на результатах двумерных расчетов.
- На основе расчетов составлено детальное описание сценария развития горения в бедных водородно – воздушных смесях, близких по составу к концентрационному пределу воспламенения в замкнутом объеме.
- Методом вычислительного эксперимента обнаружен механизм инициирования детонации горючей смеси лучистым нагревом слоя взвешенных в газе химически нейтральных микрочастиц.
- Численными расчетами подтверждена концепция повышения эффективности детонационно индуцированной имплементации микрочастиц путем профилирования подложки или изменения ее ориентации по отношению к потоку.
- Установлено, что на результаты численного моделирования детонации существенно влияет качество численного алгоритма. Так при использовании бездиссипативной схемы КАБАРЕ энергия, необходимая для формирования устойчивого комплекса из зоны горения и ударной волны оказывается в несколько раз больше, чем при расчетах по методу крупных частиц. Дано физическое объяснение этому явлению.

Замечания

Диссертация хорошо структурирована и написана хорошим русским языком. На этом фоне бросается в глаза словечко «промоутировать», неоднократно используемое автором в процессе изложения. Следовало бы заменить его на эквивалентное по смыслу словосочетание русского языка.

На стр.102 диссертации, при описании этапов расчетного алгоритма для схемы КАБАРЕ написано: «Недостающие значения потоковых переменных на новом временном слое вычисляются из уравнения состояния». В опубликованных ранее материалах с описаниями схемы КАБАРЕ такого элемента в алгоритме не содержится. Следовало бы более подробно описать эту новацию.

При описании этапов реализации схемы КАБАРЕ пропущен наиболее важный из них – этап экстраполяции локальных римановых инвариантов. Именно он обеспечивает временную обратимость (бездиссипативность) схемы и отличает ее от других схем.

Указанные замечания носят скорее редакционный характер и ни в коей мере не влияют на безусловно отличную оценку всей работы.

Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертации.

Диссертация "Режимы распространения пламени в химически активных газах и газозвесах" представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая отвечает всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней №842 от 24.09.2013 г., а её автор Яковенко Иван Сергеевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 - Теплофизика и теоретическая теплотехника.

Отзыв составил официальный оппонент, заведующий отделом "Перспективных исследований и математического моделирования" ФГБУН Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук, д.ф.-м.н., профессор.

Головизнин Василий Михайлович

115191, г. Москва, ул. Большая Тульская, д.52
(495) 958-14-12, gol@ibrae.ac.ru

Подпись Головизнина В.М. удостоверяю
Ученый секретарь ИБРАЭ РАН, к.ф.-м.н.

115191, г. Москва, ул. Большая Тульская, д.52,
(495) 955-22-66, vek@ibrae.ac.ru



Калантаров В.Е.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук (ИБРАЭ РАН)
115191, г. Москва, ул. Большая Тульская, д.52, (495) 955-22-86, pbl@ibrae.ac.ru