

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.110.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ
НАУК, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 17.04.2019 протокол № 4

О присуждении Смыгалиной Анне Евгеньевне, гражданке Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Влияние состава горючих смесей на основе водорода на режимы воспламенения и горения» в виде рукописи по специальности 01.04.14 - Теплофизика и теоретическая теплотехника, принята к защите 11.02.2019г., (протокол заседания № 2), диссертационным советом Д 002.110.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр.2, jiht.ru, (495) 485-8345), утвержденного Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 11.04.2012г. № 105/нк.

Соискатель Смыгалина Анна Евгеньевна 1991 года рождения, в 2013 году окончила Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана.

В 2017 году окончила очную аспирантуру Московского государственного технического университета имени Н.Э. Баумана.

Диссертация выполнена в Лаборатории № 15.2 – вычислительной физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук и

на факультете «Фундаментальных наук» Московского государственного технического университета имени Н.Э. Баумана.

Работает младшим научным сотрудником Лаборатории № 15.2 – вычислительной физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук с 2013 года по настоящее время.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Киверин Алексей Дмитриевич Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук, Лаборатория № 15.2, заведующий лабораторией.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, Медведев Сергей Павлович, Институт химической физики имени Н.Н. Семенова Российской академии наук (ИХФ РАН), Лаборатория гетерогенного горения, заведующий лабораторией;

кандидат физико-математических наук, Титова Наталия Сергеевна, Центральный институт авиационного моторостроения имени П.И. Баранова (ЦИАМ им. П.И. Баранова), Отдел «Физика неравновесных процессов и физико-химическая кинетика», начальник отдела, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук (ИБРАЭ РАН, г. Москва), в своем положительном заключении, составленном заместителем заведующего отделением анализа безопасности ядерных энергетических установок, доктором физико-математических наук, Семеновым В.Н., заведующим отделом перспективных исследований и математического моделирования, доктором физико-математических наук, Головизниным В.М., заведующим отделением анализа безопасности ядерных энергетических установок, доктором технических наук, Киселевым А.Е. и утвержденном директором

ИБРАЭ РАН, доктором физико-математических наук, Матвеевым Л.В., указала, что к полученным результатам относятся оценка минимального давления, при котором еще происходит воспламенение водородной струи, вытекающей из сосуда под давлением; выделение и анализ двух различных типов очагов воспламенения; метод подавления детонационных режимов сгорания водорода в двигателе внутреннего сгорания. Все представленные в работе и решенные задачи имеют прямое отношение к безопасности обращения с водородом и к эффективности его использования как топлива для энергетических установок.

Результаты диссертационного исследования могут быть рекомендованы для использования в Объединенном институте высоких температур РАН (ОИВТ РАН), Институте химической физики им. Н.Н. Семенова РАН (ИХФ РАН), Институте химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН (ИХКиГ СО РАН), Московском государственном техническом университете им. Н.Э. Баумана (МГТУ им. Н.Э. Баумана) и во многих других научных учреждениях, связанных с проектированием объектов хранения водорода, а также устройств, использующих водород как топливо, в частности, двигателей внутреннего сгорания.

Соискатель имеет 4 статьи в реферируемых журналах из списка ВАК, 27 печатных работ в сборниках материалов и тезисов конференций:

Основные работы:

1. Об использовании водорода в качестве топлива для двигателей в энергетическом цикле удаленных производственных объектов / Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Смыгалина А.Е., Зайченко В.М. // ЖТФ. – 2018. – № 88(1). – С. 147-150.
2. Mechanism of self-ignition of pressurized hydrogen flowing into the channel through rupturing diaphragm / Ivanov M.F., Kiverin A.D., Smygalina A.E., Golub V.V., Golovastov S.V. // International Journal of Hydrogen Energy. – 2017. – Vol. 42(16). – P. 11902-11910.

3. Горение смесей на основе водорода в газопоршневом двигателе / Смыгалина А.Е., Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Зайченко В.М. // Известия РАН. Энергетика. – 2015. – № 2. – С. 120-130.

4. Воспламенение водородно-воздушной смеси вблизи нижнего концентрационного предела / Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Смыгалина А.Е. // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Естественные науки». – 2013. – № 1(48). – С. 89-108.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН (Заведующий Лабораторией №2 физико-математического моделирования процессов горения, д.ф.-м.н. Фурсенко Р.В., г. Новосибирск) – отзыв положительный, с замечанием:

- К достоинствам работы следует отнести сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными, имеющимися в литературе. Недостатком автореферата является отсутствие графиков демонстрирующих декларируемые результаты такого сопоставления.

2. Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН (Заведующий лабораторией «Волновых процессов в ультрадисперсных средах», к.ф.-м.н., Бедарев И.А., г. Новосибирск) – отзыв положительный, с замечаниями и вопросами:

1. Исследования в работе выполнены с помощью численного моделирования, а в автореферате подробности алгоритмов указаны весьма скудно. Во всех ли задачах использовались одинаковые схемы химической кинетики?

2. Вопрос по исследованиям, выполненным в третьей главе. Судя по автореферату, расчеты проведены для фиксированной геометрии каналов высокого и низкого давлений при различной динамике раскрытия диафрагмы. Не исследовался ли вопрос о том, как изменятся условия

самовоспламенения при уменьшении или увеличении объема камеры высокого давления?

3. Почему в расчетах в главе 4, которые выполнялись в условиях экспериментов, использованы только стехиометрические смеси? Представляется, что использование смесей с коэффициентом избытка воздуха, взятым из эксперимента, позволило бы проверить не только качественное, но и количественное согласование расчетных и экспериментальных данных.

3. Институт автоматизации проектирования РАН (Старший научный сотрудник Отдела вычислительных методов и турбулентности, к.ф.-м.н., доцент Уткин П.С., г. Москва) - отзыв положительный, с замечаниями:

- Некоторые недостатки изложения результатов работы в автореферате касаются недостаточно подробного освещения важных особенностей вычислительных экспериментов. А именно, в тексте нет ни одного упоминания о характерном размере ячеек расчетных сеток в рассмотренных задачах, хотя есть фраза о том, что сеточная сходимость исследовалась. Без этого трудно оценить степень разрешения зон протекания химических реакций. Автор пишет, что использует уравнения Навье – Стокса, однако не пишет о том, используется ли какая-либо модель турбулентности. Данные вопросы особенно важны в задаче об истечении водорода под давлением, где требуется моделировать процесс смешения топлива и окислителя. Также написано, что анализировались различные модели кинетики химических реакций, и для каждой из рассмотренных задач выбиралась наиболее подходящая модель. Было бы любопытно увидеть рекомендации автора, основанные на опыте подобной деятельности, по поводу выбора той или иной кинетической схемы.

4. Институт химической физики имени Н.Н. Семенова РАН (Старший научный сотрудник Лаборатории гетерогенного горения, к.ф.-м.н., Тереза А.М., г. Москва) – отзыв положительный, с замечаниями:

1. Не представлены критерии выбора моделей детальных кинетических механизмов (ДКМ), определяющих химию самовоспламенения изучаемых горючих смесей в индукционном периоде и начальных стадиях горения изучаемых горючих смесей, применительно к условиям больших диапазонов температуры и давления изучаемых процессов.

2. Не отражены проблемы, связанные со сложностью численного решения уравнений газодинамики Навье – Стокса для многокомпонентного сжимаемого газа с учетом процессов переноса: вязкости, теплопроводности, диффузии и химических превращений в рамках выбираемого ДКМ, когда разброс собственных значений Якобиана составляет десяток и более порядков, что требует значительных вычислительных затрат. Из автореферата не ясно, проводилось ли диссертантом редуцирование ДКМ с целью понижения ранга матрицы Якоби и, если проводилось, то на основании каких критериев. В тоже время сам факт использования ДКМ с участием метана значительно повышает ценность представленной к защите диссертации и полученных в ней результатов.

5. Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси (Старший научный сотрудник Лаборатории физико-химической гидродинамики, к.ф.-м.н. Лещевич В.В., г. Минск, Беларусь) - отзыв положительный, с замечаниями:

- В качестве замечания следует обратить внимание на отсутствие в автореферате сравнительного анализа результатов расчетов с экспериментальными данными, на основании которого выбирались соответствующие модели и механизмы химической кинетики для диссертационного исследования. Это крайне важный момент, так как от данного выбора зависит достоверность воспроизводимых в работе процессов и как следствие ее результаты и выводы.

- Второе замечание касается некоторой ограниченности практического применения полученных в диссертации результатов. Например, оценка

нижнего предела воспламенения водорода проводилась только для атмосферного давления, и автор не указывает возможности применения предложенного метода для других условий. Особенности самовоспламенения водорода при истечении в канал, заполненный воздухом, выявлены для конкретной геометрии канала, а рассмотренная концепция подавления детонационных режимов горения в ДВС за счет использования малых добавок низкоактивных компонент к водороду не проверена для различных режимов работы двигателя, например, связанных с изменением нагрузки, т.е. с увеличением объемного наполнения цилиндров горючей смесью.

6. Закрытое акционерное общество «Научно-производственное объединение специальных материалов» (ЗАО «НПО СМ») (Старший научный сотрудник НИИ СМ к.т.н. Гук И.В., отзыв утвержден Генеральным директором – Генеральным конструктором ЗАО «НПО СМ» членом-корреспондентом РАН, академиком РАН, д.т.н., профессором, Сильниковым М.В., г. Санкт-Петербург) – отзыв положительный, с указанием неточностей и недостатков:

- В тексте автореферата не сказано, какой конкретно лагранжево-эйлеров метод использовался для решения систем дифференциальных уравнений, явный или неявный, сеточный или безсеточный (стр. 8).

- Не указаны точные границы исследуемого диапазона времен раскрытия диафрагмы (стр. 11).

- Не указано, на какую величину снижается значение КПД двигателя при увеличении угла поворота коленчатого вала (стр. 14).

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что:

- д.ф.-м.н. Медведев С.П. является ведущим ученым в области горения и взрыва, в частности, в области горения водорода, кинетики химического превращения при горении, а также процессов детонации;

1. Воспламенение водорода высокого давления при его истечении в объем с препятствиями / Медведев С.П., Хомик С.В., Максимова О.Г., Михалкин

В.Н., Петухов В.А., Долгобородов А.Ю. // Технологии техносферной безопасности. – 2015. – № 6(64). – С. 38-45.

2. Распространение детонации по топливовоздушным смесям в плоских каналах / Хомик С.В., Медведев С.П., Борисов А.А., Михалкин В.Н., Максимова О.Г., Петухов В.А., Долгобородов А.Ю. // Химическая физика. – 2016. – Т. 35. – № 4. – С. 48-56.

3. Low-temperature ignition delay for hydrogen-air mixtures in light of a reaction mechanism with quantum correction / Medvedev S.P., Agafonov G.L., Khomik S.V. // Acta Astronautica. – 2016. – Vol. 126. – P. 150-153.

- к.ф.-м.н. Титова Н.С. является признанным специалистом в области кинетики химического превращения при горении, математического моделирования процессов горения.

1. Kinetic analysis of n-decane-hydrogen blend combustion in premixed and non-premixed supersonic flows / Starik A.M., Bezgin L.V., Korpchenov V.I., Titova N.S., Torokhov S.A. // Combustion Theory and Modelling. – 2016. – Vol. 20(1). – P. 99-130.

2. Modeling study of combustion and pollutant formation in HCCI engine operating on hydrogen rich fuel blends / Kozlov V.E., Chechet I.V., Matveev S.G., Titova N.S., Starik A.M. // International Journal of Hydrogen Energy. – 2016. – Vol. 41(5). – P. 3689-3700.

3. Combustion improvement in HCCI engine operating on synthesis gas via addition of ozone or excited oxygen molecules to the charge: modeling study / Starik A.M., Korobov A.N., Titova N.S. // International Journal of Hydrogen Energy. – 2017. – Vol. 42(15). – P. 10475-10484.

Выбор Института проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук (ИБРАЭ РАН) в качестве ведущей организации обусловлен тем, что в ИБРАЭ РАН проводятся исследования, в том числе методами вычислительной гидродинамики, по определению критических условий для воспламенения водорода, что чрезвычайно важно для

обеспечения штатного функционирования объектов атомной энергетики и что близко к тематике диссертационной работы соискателя.

1. Разработка и верификация модели рекомбинаторов РВК-500, -1000 для моделирования защитной оболочки АЭС с ВВЭР методами вычислительной гидродинамики / Тарасов О.В., Киселев А.Е., Филиппов А.С., Юдина Т.А., Григорук Д.Г., Кошманов Д.Е., Келлер В.Д., Христенко Е.Б. // Атомная энергия. – 2016. – Т. 121. – № 3. – С. 131-136.

2. Возможный механизм выхода газовых продуктов деления из натриевого теплоносителя / Киселев А.Е., Сегаль М.Д., Семенов В.Н., Филиппов М.Б., Цаун С.В. // Проблемы безопасности и чрезвычайных ситуаций. – 2016. – № 3. – С. 23-31.

3. Особенности пожаротушения в замкнутом объеме тонкораспыленной водой / Душкин А.Л., Ловчинский С.Е., Рязанцев Н.Н., Сегаль М.Д. // Пожаровзрывобезопасность. – 2017. – Т. 26. – № 3. – С. 60-69.

Диссертационный совет отмечает, что **на основании выполненных соискателем исследований:**

- определен нижний концентрационный предел устойчивого воспламенения водородно-воздушной смеси как минимальная концентрация водорода, ниже которой невозможно поддержание развития экзотермических реакций горения. Представлен новый метод определения нижнего концентрационного предела воспламенения на основе концепции Я.Б. Зельдовича о спонтанной волне горения;

- получено описание механизмов возникновения очагов воспламенения водорода при его истечении под высоким (60 атм) давлением в канал, заполненный воздухом. Выделены два различных типа очагов самовоспламенения, впервые подтверждающие недавние экспериментальные результаты из литературы. Получена оценка нижней величины давления, не приводящей к самовоспламенению водорода;

- определены минимальные добавки метана, водяного пара, избытка воздуха, обеспечивающие отсутствие детонационных режимов сгорания водорода в двигателе с искровым зажиганием. Определены концентрации низкоактивных добавок к водороду, обеспечивающие оптимальные параметры работы двигателя.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- предложенный метод определения нижнего концентрационного предела устойчивого воспламенения может быть использован для оценки такого предела в смесях различных составов;
- исследованные механизмы образования очагов самовоспламенения водорода при его истечении под высоким давлением в канал представляют особую важность для составления критериев безопасного использования водорода.

Значение полученных соискателем результатов **исследования для практики подтверждается** тем, что:

- обнаруженные механизмы формирования очагов самовоспламенения водорода при его истечении в канал, а также оценка предела давления, ниже которого самовоспламенение не происходит, для конкретной частной геометрии канала представляют необходимый материал для проектирования компонент водородной энергетики;
- найденные значения добавок низкоактивных компонент к водороду, обеспечивающие отсутствие детонации в двигателе с искровым зажиганием, и составы, обеспечивающие оптимальные значения параметров работы двигателя, важны для разработки условий функционирования двигателей с искровым зажиганием, работающих на смесях с высоким содержанием водорода.

Результаты диссертационного исследования могут быть рекомендованы для использования в Объединенном институте высоких температур РАН (ОИВТ РАН), Институте химической физики им. Н.Н.

Семенова РАН (ИХФ РАН), Институте химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН (ИХКиГ СО РАН), Московском государственном техническом университете им. Н.Э. Баумана (МГТУ им. Н.Э. Баумана) и во многих других научных учреждениях, связанных с проектированием объектов хранения водорода, а также устройств, использующих водород как топливо, в частности, двигателей внутреннего сгорания.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

- результаты получены методами вычислительной газовой динамики. Перед непосредственным решением задач диссертации осуществлялось проведение тестов на сходимость решения по расчетной сетке, а также расчеты по выбору механизма химической кинетики, оптимального для исследуемых условий по давлению, температуре и составу;
- результаты моделирования были сопоставлены с экспериментальными данными, описанными в литературе, в том числе (для задач из глав 3, 4) с данными, полученными в ОИВТ РАН;
- основные результаты были представлены на 19 международных и всероссийских конференциях.

Личный вклад соискателя является одним из основных. Автором выполнены все необходимые модификации компьютерных кодов для решения поставленных задач диссертации, проведена валидация кодов, уточнение используемых моделей для расчета транспортных коэффициентов, адаптация кода для проведения моделирования с использованием детальных механизмов химической кинетики, проведены тесты на сходимость для разбираемых задач. Автором выполнено компьютерное моделирование поставленных задач, проведен анализ полученных результатов и их сопоставление с литературными и экспериментальными данными. Автор принимала активное участие в обсуждении и интерпретации результатов, формулировке и обосновании выводов, вошедших в диссертацию.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, соответствует критериям пункта 9, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г.

На заседании от 17.04.2019г. диссертационный совет принял решение присудить Смыгалиной А.Е. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 22 человек, из них 11 докторов наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы и 11 докторов наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, участвовавших в заседании, из 31 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 22, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Зам. председателя диссертационного совета Д 002.110.02

д.ф.-м.н., профессор

Андреев Н.Е.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.110.02

д.ф.-м.н.

Васильев М.М.



М.П.

17.04.2019г.