

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Фомина Павла Аркадьевича

**«Моделирование взрывных и детонационных течений в многофазных средах
с химическими реакциями»,**

представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы

Актуальность темы исследования определена критической необходимостью исследования детонационных процессов в сложных реакционно-способных системах, способных к детонации - газообразных и жидких горючих, газожидкостных и газопылевых системах, пузырьковых реагирующих средах. Необходимость изучения обусловлена вопросами взрывобезопасности технологических процессов (получение высокоэнергетических материалов, промышленное производство, сопровождающееся выделением взрывоопасных веществ) и устройств, использующих высокоэнергетические вещества (авиационные, ракетные двигатели, в том числе детонационные). А также использование энергии взрыва для получения новых материалов, покрытий, лигатур для получения новых сплавов, использование направленного взрыва и др.

Актуальность диссертационной работы П. А. Фомина подтверждается тем, что она входит в перечень критических технологий Российской Федерации (п.1 Базовые и критические военные и промышленные технологии для создания перспективных видов вооружения, военной и специальной техники, п.21 Технологии предупреждения и ликвидации чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера.), а также в перечень приоритетных направлений развития науки, технологий и техники Российской Федерации (п.5 Перспективные виды вооружения, военной и специальной техники). Также подтверждается тем, что она выполнялась при поддержке гранта РФФИ 14-03-00838 "Моделирование кинетики детонационных процессов в газовых смесях углеводородов с воздухом", гранта РФФИ 17-03-01351 "Приведенная детонационная кинетика и структура детонационной волны в многотопливных газовых смесях". Исследования выполнялись также в рамках промышленно ориентированных проектов по взрывобезопасности криогенных газочапельных систем, совместных проектов с исследовательскими организациями Германии, Тайваня.

Общая характеристика диссертации

Целью диссертации является решение двух взаимосвязанных проблем:

- создании комплекса обобщенных моделей химической кинетики и химического равновесия для описания химических превращений в газовых смесях, а также газофазных реакций в газожидкостных и газопылевых смесях при взрывных и детонационных процессах, в том числе при наличии межфазного тепло- и массообмена и
- теоретическом моделировании широкого диапазона взрывных и детонационных процессов в указанных смесях с учетом адекватного реальности описания межфазных взаимодействий и химических превращений по предложенным моделям химической кинетики и химического равновесия.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы, изложена на 291 странице. Список литературы включает 373 ссылки.

Во **введении** диссертации обосновывается актуальность темы, формулируется цель и задачи исследований, научная новизна, отмечается теоретическая и практическая значимость, формулируются положения, выносимые на защиту, и излагается краткое содержание диссертации.

В **первой главе** представлены обобщенные модели химической кинетики и химического равновесия для описания химических превращений в газовых смесях и газофазных химических реакций в газожидкостных и газопылевых смесях. Приведены материалы верификации предложенных моделей на конкретных прикладных задачах. Модели химической кинетики применимы при детонационных давлениях и температурах. Модели обладают тем, что учитывают равновесный состав продуктов реакций при высоких температурах, фазовые переходы. Приведена формула для оценки характерного времени восстановления химического равновесия в газовой смеси при изменении температуры и давления. Приведены примеры использования предложенных моделей химического равновесия и химической кинетики при расчете параметров детонационной волны Чепмена-Жуге в газовых смесях. Предложенные модели детонационных волн в газочапельных и газопленочных смесях имеют и самостоятельное научное и практическое значение. Приведены примеры использования предложенных моделей химической кинетики и химического равновесия для решения широкого круга научных и прикладных задач из работ.

Во **второй главе** представлены результаты теоретического и экспериментального исследования взрывных и детонационных процессов в химически реагирующих пузырьковых средах.

Разработаны модели взрыва одиночных пузырьков при высокоскоростном сжатии, проведено моделирование детонационных волн в пузырьковых смесях с равномерно распределенными пузырьками. Химические реакции в пузырьках описывались по моделям химического равновесия, разработанным автором диссертации. Решены задачи о взрыве в пузырьковых системах, в которых горючее и окислитель находятся в одной или разных фазах, в гибридных пузырьковых системах и пузырьковых системах жидких монотоплив. Предложена и обоснована концепция многократного прохождения детонационной волны по пузырьковой смеси с монотопливом в качестве жидкой фазы. Проведено сравнение результатов расчетов с экспериментальными результатами.

В **третьей главе** проведено моделирование конденсации паров горючего в ударной волне, которая приводит к изменению парциальных давлений компонентов в сторону достижения стехиометрического их соотношения. На примере смеси паров циклогексана с кислородом и азотом показана возможность возникновения детонации в такой переобогащенной парами горючего смеси. Проведена оценка характерного времени конденсации. Показано, что наличие в газе взвеси твердых частиц увеличивает скорость конденсации и массу перешедших в жидкость паров.

В **четвертой главе** проведен анализ конденсации паров горючего в пузырьке при его адиабатическом сжатии и нагреве пузырька в ударной волне, и его влияние на взрывобезопасность пузырьковых систем. Конденсация меняет массовое содержание компонентов газа в пузырьке, увеличивая концентрацию окислителя, что расширяет взрывные пределы пузырька по начальному давлению, температуре и амплитуде ударной волны.

Проведен расчет взрывных пределов пузырька в зависимости от начальных давлений и температуры и величины давления в ударной волне.

В **пятой главе** излагаются результаты автора об ослаблении и подавлении волны газовой детонации химически инертными микрочастицами. Проведены расчеты параметров волны Чепмена-Жуге и отражения детонационной волны от жесткой стенки в рассматриваемой двухфазной смеси. Проанализировано несколько критериев подавления детонационной волны. Изучено влияние

теплофизических свойств материалов, из которых изготовлены микрочастицы, на процесс ослабления и гашения детонации. Химические превращения в рассматриваемой смеси описывались по модели химического равновесия в смеси реагирующего газа с химически инертными твердыми микрочастицами, разработанной автором диссертации.

В **Заключении** приводятся основные результаты и выводы.

Новизна результатов проведённых исследований.

В диссертационной работе Фомина П. А. получены следующие новые результаты:

Автором разработаны обобщенные модели химического равновесия и химической кинетики в газовых, газожидкостных и газопылевых смесях.

Разработана модель химического равновесия в газовой фазе газожидкостной двухфазной смеси с учетом межфазного массообмена. Разработанный подход позволяет без использования всей кинетической схемы сложных (цепных) реакций определить конечное равновесное состояние реагирующих смесей, соответствующее второму началу термодинамики, принципу Ле Шателье, применимый в широком диапазоне начальных химических составов газовых и гетерогенных смесей.

Получена аналитическая формула для времени восстановления химического равновесия в углеводородо-кислородных газовых смесях при его нарушении вследствие изменений давления и температуры.

Разработаны обобщенные модели химической кинетики для описания детонационного сгорания газообразного монотоплива.

Предложена модель стационарной детонации в газокapельной смеси, построенная без привлечения дополнительных предположений о характере потока в плоскости Чепмена-Жуге и учитывающая сильное непостоянство молярной массы газа и теплового эффекта химической реакции.

Впервые в рамках замкнутой модели стационарной детонации в переобогащенной горючим системе пленка углеводородного горючего – газообразный окислитель учтено образование сажи в продуктах реакции.

Впервые проведено оптическое наблюдение взаимодействия детонационной волны, с поверхностью пузырьковой смеси.

Показана возможность инициирования взрыва предварительно сжатых пузырьков преломленными ударными волнами.

Предложена модель ударно-волновой динамики и взрыва пузырьков с

учетом межфазного тепло- и массообмена. Рассчитана динамика и взрыв пузырьков, в которых горючее и окислитель первоначально находятся в разных фазах.

Предсказано существование детонационных волн, распространяющихся в химически активных пузырьковых смесях, со сверхзвуковой скоростью, и в которых имеет место скачкообразный рост давления на переднем ударном фронте волны.

Выполнен расчет параметров детонационной волны в пузырьковой смеси на основе жидкого монотоплива.

Выполнен расчет области существования волны пузырьковой детонации в зависимости от химического состава газовой фазы и объемной доли пузырьков в двухфазной смеси.

Предложена концепция источника мощных периодических акустических сигналов в жидкости при многократном прохождении детонационной волны по пузырьковой смеси на основе жидкого монотоплива.

Предсказана принципиальная возможность конденсации паров тяжелого углеводородного горючего в ударной волне, и показано ее влияние на химический состав газа и его взрывобезопасность. Предсказана возможность конденсации паров тяжелого углеводородного горючего при адиабатическом сжатии и нагреве газа в пузырьке за фронтом ударной волны, распространяющейся по жидкости.

Проанализировано влияние теплофизических параметров материала химически инертных микрочастиц на ослабление и подавление волны газовой детонации. Предложен новый критерий подавления газовой детонации химически инертными микрочастицами, основанный на соотношении между размером детонационной ячейки и диаметром канала.

Теоретическая значимость

Предложенные модели химического равновесия и химической кинетики представляют собой научно обоснованный инструмент, позволяющий просто и адекватно описывать химические превращения при физико-математическом моделировании широкого диапазона детонационных процессов в газовых, газожидкостных и газопылевых системах, при наличии межфазного тепло- и массообмена. Теоретически предсказаны режимы пузырьковой детонации, в том числе и многократной, возможность конденсации паров горючего за фронтом ударной

волны, распространяющейся по реальной газовой смеси, и предсказать их способность к детонации.

Предложены модели взрывных и детонационных процессов в пузырьковых системах, в которых горючее и окислитель находятся в разных фазах, а также когда жидкая фаза является монотопливом.

Практическая значимость

Результаты диссертации могут быть использованы для решения вопросов обеспечения пожаро-, взрыво- и детонационной безопасности газовых и газожидкостных систем, взрывобезопасности химических реакторов, использующих жидкофазное окисление углеводородов, для оценки использования химически инертных пылевых завес для подавления газовой детонации (например, для обеспечения взрывобезопасности угольных шахт).

Достоверность и обоснованность результатов диссертации обосновывается проведенным анализом справедливости использованных при разработке математических моделей предположений; подтверждается хорошим соответствием расчетов термодинамических параметров газовых смесей, параметров газовой детонации Чепмена-Жуге и параметров ее отражения от твердой стенки, адиабатической температуры пламени, с соответствующими расчетами, выполненными с учетом полных систем уравнений химического равновесия.

Достоверность предложенных моделей химической кинетики детонационного сгорания смесей горючих с воздухом подтверждается хорошим соответствием результатов расчетов параметров двумерной ячеистой структуры детонационных волн с экспериментом.

Достоверность моделей химического равновесия в газовых смесях подтверждена успешной практикой их использования при расчетах технических устройств.

Достоверность предложенных моделей взрывных процессов в химически активных пузырьковых средах подтверждается хорошим соответствием результатов расчетов эксперименту.

Достоверность и обоснованность результатов по конденсации паров горючего при адиабатическом сжатии пузырька в ударной волне и ее влияния на взрывные пределы пузырька базируется на использовании апробированных физических подходов для описания динамики сплошной

среды и конденсации, и выполненного сравнения характерного времени конденсации с характерным временем сжатия пузырька в ударной волне.

Достоверность выполненного моделирования ослабления и подавления волн газовой детонации химически инертными микрочастицами обоснована хорошим соответствием результатов расчетов эксперименту.

Рекомендации по использованию полученных результатов.

Полученные в диссертации фундаментальные физико-математические модели, результаты могут быть использованы при разработке технических устройств, использующих взрывные и детонационные процессы: технологии детонационно-газового нанесения порошковых покрытий, термогазодетонационной обработки поверхностей, моделировании работы ракетных двигателей, использующих детонационное сгорание топлива, для измерения взрывных характеристик газовых смесей. При анализе взрывоопасности и опасности детонации газовых, газокапельных, пузырьковых сред в зависимости от их компонентного состава.

Содержание **автореферата** соответствует содержанию диссертации.

Результаты изложенные в диссертации достаточно полно опубликованы в научной печати. По теме диссертации опубликовано 104 работы, в том числе в 36 работ, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК для опубликования основных научных результатов диссертаций, 1 патент, 3 монографии, 64 работы в других изданиях.

Соответствие паспорту специальности

Диссертация и автореферат по своему содержания соответствуют паспорту специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы в п. 8 Физико-химическая гидромеханика (течения с химическими реакциями, горением, детонацией, фазовыми переходами, при наличии излучения и др.).

Основные замечания к работе.

1. В работе представлены экспериментальные результаты о взрыве пузырьков, содержащих смесь кислорода и насыщенных паров циклогексана, с размерами от 7.2 до 3.6 мм (стр. 133-134 диссертации). Результаты расчетов представлены в относительных переменных через отношения радиуса пузыря к его первоначальному значению. В диссертации не представлена оценка предела применимости подхода автора по размерам пузырька. Каков минимальный размер пузырька, при котором исследованное автором возникновение детонации возможно?

2. При моделировании процессов в пузырьке автор учитывает конденсацию, массообмен (инжекцию жидкости в внутренней поверхности пузырька). Однако в диссертации не представлена оценка влияния теплообмена газа с пузырьком и массообмена компонентов газа (не паров жидкости) за счет растворения газа в окружающей жидкости. Насколько важны эти процессы, для каких размеров пузырька эти процессы могут стать существенными?

3. Автор проводит расчет адиабатического сжатия в нестационарной «ноль-мерной» постановке. При моделировании процессов после сжатия газа в ударной волне Автор оценивает период индукции взрыва, и принимает, что взрыв после периода индукции происходит мгновенно. Насколько справедливо это предположение? Период теплового взрыва можно рассчитать на основе нестационарной теории теплового взрыва также в «ноль-мерной» постановке. Проводились ли Автором диссертации такие расчеты?

4. При расчете параметров смеси за ударной волной Автор использует модель химического равновесия в смеси химически реагирующего газа. Равновесие вычисляется из определения молярной массы продуктов сгорания в точке равновесия после реагирования. Известно, что состояние термодинамического равновесия в реагирующих смесях можно определить, используя, например, программу «ASTRA» или ее аналог «TERRA». Имеются ли у Автора диссертации сравнения равновесного значения удельной теплоемкости, и показателя адиабаты, вычисленного по модели Автора, и другими методами?

5. Известно, что при изменении давления НКПВ и ВКПВ сильно изменяются. Например, по данным [Б. Льюис, Г. Эльбе. Горение, пламя и взрывы в газах. Изд-во Мир, М: 1968.] смесь природного газа (состоит из метана на 96-99%) с воздухом имеет концентрационные пределы горения: нижний 4.5 об.%, верхний 14.2 об.% при атмосферном давлении. При повышении давления область горения расширяется, и, например, при давлении 204 атм составляет: нижний 3.15 об.%, верхний 60 об.%. По данным из этой книги другие углеводороды обладают теми же свойствами. Как учитывается эффект расширения пределов горения при повышении давления в модели Автора диссертации, в части где учитывается конденсация паров углеводородов в волне сжатия.

6. По расчетам Автора метано-воздушная смесь детонирует в интервале от

5 об.% до 15 об.% (рисунки 5.7 и 5.8). Однако вопрос существования детонационной волны в метано-воздушной смеси в таком широком диапазоне концентраций метана под вопросом. Существует ли детонация или происходит горение? Модель автора на этот вопрос не отвечает. Скорее всего, в модели заложена «аксиома», факт, что детонация есть, и тогда, применяя разработанный подход, можно получить все параметры детонационной волны (даже если она в природе не существует ...). В связи с этим возникает вопрос о применимости результатов главы 5 в угольных шахтах. В соответствии со схемой проветривания, в рабочей зоне шахты концентрация метана переменная, допустимая величина 1 % в рабочей зоне и 2% в изолированных выработках. Поэтому области существования стехиометрической смеси могут локализоваться в застойных зонах, либо в обрушенных пространствах. Поэтому больших зон, где может реализоваться непрерывная детонация в шахте нет. Поэтому все взрывозащитные сооружения рассчитываются не на гашение детонации, а на гашение вспышки метана, и гашение ударных волн.

Сделанные замечания не снижают научную и практическую значимость и общую положительную оценку диссертационной работы П. А. Фомина. Исследования проведены на высоком научном уровне. Положения, выносимые на защиту, выводы и рекомендации обоснованы.

Заключение

Тема диссертационного исследования соответствует паспорту специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы по физико-математическим наукам. Диссертация представляет собой специально подготовленную рукопись, содержит совокупность новых научных результатов, имеет внутреннее единство.

Автореферат в полной мере отражает содержание диссертации и позволяет составить достаточно полное представление о ней.

На основе изучения диссертационной работы и публикаций по теме диссертации можно сделать обоснованное заключение о том, что диссертационная работа П. А. Фомина «Моделирование взрывных и детонационных течений в многофазных средах с химическими реакциями» является научно - квалификационной работой, в которой разработаны фундаментальные физико-математические модели для описания процессов

детонации сложных многокомпонентных, многофазных высокоэнергетических реагирующих средах, имеющие как теоретическое, так и практическое значение для развития приоритетных направлений развития науки, технологий и техники Российской Федерации. Автором диссертации разработаны научно обоснованные решения, которые вносят существенный вклад в развитие промышленности России и способствуют ускорению научно-технического прогресса.

На основании изложенного считаю, что диссертация П. А. Фомина «Моделирование взрывных и детонационных течений в многофазных средах с химическими реакциями» является законченным научным исследованием, и соответствует требованиям пункта 9 «Положения о присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842 (в ред. от 01.10.2018 г.).

Автор диссертации Фомин Павел Аркадьевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы.

Официальный оппонент:

Заведующий кафедрой математической физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», доктор физико-математических наук (01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника), профессор.


«15» февраля 2020 г.

Крайнов Алексей Юрьевич

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет»

Служебный адрес: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36

e-mail: akrainov@ftf.tsu.ru, Служебный телефон: +7 (3822) 529-845

Сайт организации: www.tsu.ru/, Эл. адрес организации: rector@tsu.ru,

Телефон организации: +7 (3822) 529 585

Подпись А.Ю. Крайнова заверяю:

Ученый секретарь:



Сазонтова Наталья Анатольевна