

УТВЕРЖДАЮ



Директор Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Федерального исследовательского Центра
химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук
д.х.н., профессор _____

В.А. Надточенко

5 февраля 2020 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертацию Фомина Павла Аркадьевича «Моделирование взрывных и детонационных течений в многофазных средах с химическими реакциями», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 «Механика жидкости, газа и плазмы»

Диссертация посвящена разработке физико-математических моделей взрывных и детонационных процессов в газовых, газожидкостных и газопылевых системах для изучения фундаментальных физико-химических механизмов сопутствующих явлений, а также параметров и структуры реагирующих течений, имеющих важнейшее прикладное значение для решения актуальных задач взрывобезопасности и технологического использования взрыва и детонации. Соискателем разработан комплекс обобщенных моделей химических превращений в газах и в газовой фазе рассматриваемых гетерогенных систем, в том числе при наличии межфазного массообмена.

Актуальность работы связана с необходимостью совершенствования и развития теории взрыва и детонации рассматриваемых систем для технологического использования управляемых взрывных и детонационных процессов и для решения проблем взрывобезопасности.

Оценка содержательной части диссертационной работы.

В Главе 1 сформулированы обобщенные модели химического равновесия и химической кинетики, приведены примеры их использования.

В качестве отправной точки при разработке обобщенных моделей детонационного сгорания газов выбран метан. Автор разделяет химическое превращение на две стадии: период индукции и период тепловыделения. Оригинальность подхода состоит в следующем:

- в периоде индукции сложные химические процессы заменены брутто-реакцией разложения метана, вид которой записан исходя из физически ясных упрощений; это позволяет рассчитывать молярную массу и внутреннюю энергию смеси в любой момент времени по простым алгебраическим формулам;

- по истечении периода индукции для расчета молярной массы и внутренней энергии газа используются обыкновенное дифференциальное кинетическое уравнение и явная алгебраическая формула соответственно.

Модель кинетики для метана расширена и адаптирована на углеводородное горючее произвольного состава C_nH_m .

Впервые разработаны обобщенные кинетические модели для смесей двух и более топливных компонентов, в качестве которых рассмотрены CH_4 , CO , H_2 , C_nH_m . Они являются развитием соответствующих моделей для отдельных компонентов.

Несомненная заслуга соискателя – разработка обобщенной кинетической модели для газовой водородно-кислородной смеси, содержащей в качестве второго топливного компонента пероксид водорода. Пероксид водорода – это монотопливо с положительным энерговыделением уже на стадии своего разложения. Поэтому монотоплива представляют интерес как вещества, позволяющие управлять законом энерговыделения во взрывных процессах.

Часть предложенных кинетических моделей уже доказала свою эффективность. Например, двумерный численный расчет ячеистой (в том числе нерегулярной) структуры детонационной волны (ДВ) в прямом канале в смесях окислителя с метаном и окислителя с бинарной смесью водорода с оксидом углерода (синтез-газ) воспроизводит все основные особенности структуры ДВ, наблюдаемые в эксперименте. Кроме того, использование модели кинетики для смесей с монотопливом позволило впервые в численных расчетах газовой детонации получить бифуркационную (двухразмерную) ячеистую структуру. Предложенная соискателем модель кинетики для тяжелого углеводорода уже успешно использована в расчетах двумерной структуры вращающейся ДВ для оценки тяги непрерывно-детонационного ракетного двигателя.

При создании обобщенной модели химического равновесия в газовых смесях соискатель опирается на известные явные алгебраические зависимости молярной массы и внутренней энергии водородно-кислородной смеси от давления и температуры. Эти зависимости адаптированы для углеводородно-кислородных смесей, что позволило рассчитывать молярную массу и внутреннюю энергию газов, состоящих из атомов O , C , H , N , Ar , без расчета детального химического состава смеси. Модель дополнена явными алгебраическими формулами для расчета скорости звука и теплоемкости смеси и одним обыкновенным дифференциальным уравнением для расчета адиабатической (изэнтропической) кривой.

Предложенные модели кинетики и равновесия физически обоснованы, просты и не содержат подгоночных параметров, что их выгодно отличает от имеющихся в литературе аналогов.

Разработанная модель химического равновесия в газовой смеси обобщена на газожидкостные смеси с химически равновесной газовой фазой и межфазным массообменом. Модель удобна для использования в многомерных численных расчетах взрывных и детонационных течений газожидкостных систем, позволяя вычислять термодинамические параметры газовой фазы и удельное тепловыделение химической реакции по явным алгебраическим формулам в зависимости от давления, температуры и суммарной массы испаренной жидкости. Модель химического равновесия для газовых смесей обобщена и на случай смеси газа с химически инертными микрочастицами. В этом случае модель включает дополнительные параметры: массовую долю и теплоемкость конденсированной фазы.

Предложенные модели химического равновесия охватывают широкий диапазон газовых и гетерогенных смесей. Они успешно использованы соискателем для моделирования детонации в расслоенных системах «газ – пленка», в дисперсных системах «газ – капли» и в пузырьковых жидкостях, а также в задаче о подавлении газовой детонации химически инертными частицами. Рассматриваемые модели используются другими исследователями для решения научных и прикладных задач.

В Главе 2 представлены результаты исследований взрывных и детонационных процессов в химически активных пузырьковых средах.

Зарегистрирован эффект инициирования взрыва предварительно сжатых в первичной ударной волне пузырьков преломленными в них ударными волнами, порожденными взрывами соседних пузырьков. Он может быть полезен для понимания механизма распространения волны пузырьковой детонации.

Соискателем предложены модель взрыва одиночных пузырьков и модель «пузырьковой» детонации. Принципиальное новшество состоит в учете совместного влияния химической реакции, динамики сплошной среды и межфазного тепло- и массообмена на термодинамические параметры газовой фазы и тепловыделение (на основе моделей химического равновесия для газовых и газожидкостных систем, предложенных в Главе 1). Как следствие, впервые появилась возможность рассчитывать параметры взрыва и детонации пузырьковых систем, в которых горючее и окислитель находятся в разных фазах, а также гибридных пузырьковых систем и пузырьковых систем на основе жидких монотоплив. При учете межфазного тепло- и массообмена в пузырьках впервые учтено механическое перемешивание газа и жидкости. Результаты расчета ударно-

волновой динамики и взрыва одиночных пузырьков, параметров, структуры и области существования ДВ хорошо соответствуют эксперименту.

Представляется интересной предложенная соискателем концепция акустического аналога лазерных систем (акустического “лазера”), основанного на пузырьковой детонации. Новизна концепции состоит в использовании жидкого монотоплива, что обеспечивает многократное прохождение детонации по пузырьковой среде. Разработка данной концепции может рассматриваться в качестве перспективного направления исследований взрыва и детонации пузырьковых систем с целью создания источника периодических ударных волн в жидких средах.

Впервые рассчитаны параметры пузырьковой детонации при повышенных начальных давлениях. Показано, что рост начального давления приводит к увеличению скорости волны, что соответствует эксперименту. В рамках модели взаимопроникающих континуумов, использованной для описания динамики пузырьковой среды, предсказано существование неизвестного ранее режима распространения пузырьковой детонации, существующего при достаточно больших начальных давлениях, при котором ДВ распространяются со сверхзвуковой скоростью относительно замороженной по физическим процессам скорости звука. Структура таких волн характеризуется скачкообразным ростом давления и отсутствием предвестника.

В Главах 3 и 4 предсказана принципиальная возможность конденсации паров тяжелого углеводородного горючего (циклогексана) за фронтом ударной волны, распространяющейся по газовой смеси и при адиабатическом сжатии и нагреве пузырьков в ударной волне, распространяющейся по жидкости, соответственно. Рассматриваемые эффекты нетривиальны, поскольку для широко распространенных в природе и промышленности газовых и газожидкостных системах конденсация паров происходит при охлаждении (зачастую вызываемом расширением) газовой фазы.

Рассматриваемые конденсационные эффекты имеют принципиальное значение для взрывобезопасности химически активных газовых и пузырьковых смесей, к числу которых относятся, например, реакторы для газофазного окисления жидких углеводородов. Сильно переобогащенные парами и потому изначально негорючие системы могут, тем не менее, взрываться, если конденсация паров сместит состав газа в область воспламенения. Это обстоятельство необходимо учитывать при оценке взрывобезопасности соответствующих систем.

Сделаны оценки скорости конденсации в газах и пузырьках. Показано, что конденсация успевает пройти до того момента времени, когда падение давления в

системе ее прекратит, что служит дополнительным подтверждением достоверности существования рассматриваемых конденсационных процессов.

Глава 5 посвящена вопросам ослабления и подавления волн газовой детонации облаком химически инертных частиц (одному из способов предотвращения катастрофических последствий взрывов в угольных шахтах). Предложен алгоритм оценки минимальной концентрации микрочастиц, обеспечивающей подавление и гашение ДВ. При его разработке использована модель химического равновесия в газопылевой смеси, предложенная в Главе 1. Впервые определено влияние теплоемкости твердой фазы на эффективность ослабления и подавления детонации.

Достоверность полученных в диссертации результатов. При разработке физико-математических моделей соискатель опирается на известные данные эксперимента, а также анализирует физические допущения моделей на предмет их обоснованности. При численном моделировании взрыва и детонации проводится вариация шага расчетной сетки. Результаты расчетов параметров и структуры взрывных и детонационных течений в газожидкостных смесях и подавления детонации частицами соответствуют эксперименту. Достоверность предложенного описания химических превращений и разработанных моделей взрывных и детонационных явлений подтверждается успешной практикой их применения при решении целого ряда научных и прикладных задач.

Основные результаты, изложенные в диссертации, **опубликованы** в российских и международных рецензируемых научных журналах, входящих в список ВАК и SCOPUS/WoS, монографиях, представлены на большом числе научных мероприятий в России и за рубежом, получили несколько научных наград и включены в учебный процесс в ряде университетов.

Результаты диссертации могут быть использованы в научных и прикладных организациях, занимающихся вопросами реагирующих гомогенных и гетерогенных газодинамических течений (горение и взрыв, пожаро- и взрывобезопасность, технические приложения взрывных и детонационных процессов), например, в Федеральном исследовательском центре химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Объединенном институте высоких температур РАН, НИИ Механики МГУ им. М.В. Ломоносова (г. Москва), Институте проблем химической физики РАН (г. Черноголовка), Всероссийском научно-исследовательском институте противопожарной обороны МЧС России (г. Балашиха), ИГиЛ им. М.А. Лаврентьева СО РАН, ИТПМ им. С.А. Христиановича СО РАН (г. Новосибирск) и др.

Представленные в диссертации результаты исследований могут использоваться в учебном процессе профильных кафедр, связанных с подготовкой

исследователей и инженеров по гидро-аэромеханике, теплофизике и физике быстропротекающих процессов, в частности, в МГУ им. М.В. Ломоносова, НИЯУ МИФИ, Национальном исследовательском ядерном университете, МГТУ им. Н.Э. Баумана, МФТИ, Новосибирском государственном университете.

Диссертация представляет собой завершенное научное исследование, все части которого логически связаны между собой. Текст работы написан ясным языком. Автореферат диссертации полностью отражает ее содержание.

Совокупность следующих взаимосвязанных научных результатов, полученных в диссертации, может рассматриваться как **научное достижение** в понимании физических механизмов явлений и процессов, совершенствования их модельного физико-математического описания, научной и практической значимости:

1. Предложен комплекс обобщенных моделей химической кинетики и химического равновесия, представляющий собой оригинальный, физически обоснованный и эффективный научный инструмент для описания химических превращений при взрыве и детонации широкого класса газовых и газожидкостных систем.
2. Предложен набор моделей взрывных и детонационных течений в газожидкостных смесях (газикапельных, газопленочных, пузырьковых), разработанных в рамках единого подхода – учете сильного изменения физико-химических параметров сплошной среды, вызванных динамикой сплошной среды, химическими реакциями и межфазным тепло- и массообменом. Результаты расчетов параметров, структуры и области существования взрывных и детонационных течений для рассмотренных в диссертации систем не могли быть получены в рамках предшествующего моделирования рассматриваемых явлений.
3. В научный оборот введены новые физические явления и эффекты: инициирование взрыва пузырьков преломленными вторичными ударными волнами; существование сверхзвуковых (относительно “замороженной” по физическим процессам скорости звука) волн пузырьковой детонации; концепция акустического “лазера” на основе пузырьковой смеси с жидким монотопливом; эффекты конденсации паров тяжелого углеводородного горючего в газовой смеси при ее адиабатическом сжатии и нагреве в ударной волне и при адиабатическом сжатии и нагреве газа в пузырьке за фронтом ударной волны, распространяющейся по жидкости; влияние рассмотренных конденсационных эффектов на взрывобезопасность газовых и пузырьковых систем.

По содержанию и оформлению диссертации имеются следующие вопросы и замечания.

1. Непонятно, на основе каких физических соображений выбирается размер микрокапель, образующихся при пробивании пузырька кумулятивной струей.
2. Концепция акустического “лазера” не подкреплена количественными оценками.
3. В предложенном алгоритме расчета подавления ДВ не учитывается инициирование химической реакции в присоединенных к частицам ударных волнах.
4. Фраза “Это не позволяет использовать детальные кинетические схемы в численных расчетах многофронтной структуры детонационных волн ...”, приведенная на стр. 3 автореферата, не корректна. Двумерные расчеты структуры ДВ с использованием детальной кинетики существуют.
5. Структура диссертации стала бы более упорядоченной, если переместить описание моделей газочапельной и газопленочной детонации из Главы 1, целиком посвятив ее моделированию химических превращений.

Приведенные замечания несколько не умаляют общую положительную оценку диссертационной работы, ее научную и практическую значимость.

Диссертационная работа Фомина П.А. «Моделирование взрывных и детонационных течений в многофазных средах с химическими реакциями» соответствует всем требованиям п. 9 “Положения о присуждении ученых степеней”, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. Автор работы Фомин Павел Аркадьевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 - Механика жидкости, газа и плазмы.

Отзыв обсужден на семинаре Отдела горения и взрыва Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук 22 февраля 2019 г.

Заместитель заведующего отделом
горения и взрыва ФИЦ ХФ РАН,
д.ф.-м.н.

 В.Г. Крупкин

Федеральный исследовательский центр химической физики
им. Н.Н. Семенова Российской академии наук. Почтовый адрес: 119991 г. Москва, ул.
Косыгина, 4
Телефон: +7 499 137-29-51; Эл. почта: icp@chph.ras.ru; Сайт: <https://www.chph.ras.ru/>