

УТВЕРЖДАЮ



Директор Института гидродинамики
им. М.А.Лаврентьева СО РАН
д.ф.-м.н.

С.В. Головин

«19» октября 2018 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института гидродинамики им. М.А.Лаврентьева
Сибирского отделения Российской академии наук (ИГиЛ СО РАН)

г. Новосибирск, ИГиЛ СО РАН

15 октября 2018 г.

Диссертация на соискание степени доктора физико-математических наук «Моделирование взрывных и детонационных течений в многофазных средах с химическими реакциями» выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте гидродинамики им. М.А.Лаврентьева СО РАН.

В период подготовки диссертации соискатель Фомин Павел Аркадьевич работал в лаборатории газовой детонации ИГиЛ СО РАН. В 1981 г. он окончил Новосибирский государственный университет им. Ленинского комсомола (с 2011 года Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет») по специальности «физика». Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических П.А. Фомин защитил в 1987 году.

По итогам обсуждения принято следующее заключение.

В представляемой работе рассмотрены взаимосвязанные задачи, относящиеся к механике реагирующих газовых и гетерогенных сред и физике горения и взрыва: моделирование газофазных химических превращений, исследование взрывных и детонационно-волновых процессов в газожидкостных (газокапельных, газопленочных и пузырьковых) системах, анализ конденсационных процессов при ударно-волновом нагружении газов и пузырьковых смесей, моделирование подавления волны газовой детонации химически инертными частицами. Рассмотренные взрывные и детонационные

процессы имеют единую физическую природу – газодинамические течения сплошной среды при наличии газофазных химических реакций и межфазных взаимодействий. При моделировании быстропротекающих процессов использовался единый подход – учет сильного изменения физико-химических параметров сплошной среды, вызванных химическими превращениями и межфазным тепло- и массообменом.

Цель диссертационной работы состояла в решении двух взаимосвязанных проблем: (i) теоретическом моделировании широкого класса взрывных и детонационно-волновых процессов в газожидкостных (газокапельных, газопленочных, пузырьковых) и газопылевых системах с учетом сильного изменения физико-химических параметров сплошной среды, вызванных газофазными химическими реакциями и межфазным тепло- и массообменом, и (ii) создании комплекса обобщенных моделей химической детонационной кинетики и химического равновесия в указанных смесях.

Моделирование взрывных и детонационно-волновых процессов включало разработку физико-математических моделей, расчетное определение области существования взрыва и детонации, расчет параметров и структуры детонационных волн, решение вопросов взрывобезопасности, анализ возможности технического использования рассматриваемых процессов. Проведено сравнение полученных в работе теоретических результатов с имеющимися экспериментальными данными.

В представляемой Диссертации получены следующие *основные результаты*:

1. Разработаны обобщенные модели химического равновесия в газовых, газожидкостных и газопылевых смесях. Сделана оценка времени восстановления химического равновесия.

Предложены обобщенные модели химической кинетики детонационного сгорания одно- и многотопливных углеводородно-кислородных газовых смесей и водородно-кислородных газовых смесей с добавками монотоплива.

Разработанные модели химических превращений представляют собой эффективный физико-математический аппарат для простого и вместе с тем адекватного реальности описания химических превращений при моделировании взрыва и детонационных волн в газовых и гетерогенных системах, в том числе при наличии межфазных взаимодействий.

Предложенные модели равновесия и кинетики характеризуются простотой, соответствием второму началу термодинамики и принципу Ле Шателье, высокой точностью и пригодностью для численного моделирования параметров и структуры детонационных волн.

2. Для газокапельной среды построена модель стационарной детонационной волны, учитывающая сдвиг химического равновесия при наличии межфазного массообмена.

Показано, что внутри зоны реакции в около-стехиометрических водородно- и углеводородно-кислородных смесях удельный (на единицу массы) тепловой эффект перешедшей в газ жидкости и молярная масса газа существенно непостоянны. Результаты расчетов параметров волны находятся в хорошем соответствии с экспериментом.

3. Замкнутая алгебраическая модель стационарной детонации разработана и для газопленочных горючих систем. Показано, что в плоскости Чепмена-Жуге молярная масса газа меняется на порядок, уменьшаясь от оси к стенке трубы. В области размером порядка одной десятой радиуса трубы возле поверхности пленки расчеты предсказывают присутствие сажи. Результаты расчетов параметров и структуры волны согласуются с экспериментальными данными.
4. Предсказан физическими оценками и подтвержден экспериментально процесс инициирования взрыва химически активных пузырьков преломленными в них вторичными ударными волнами, порожденными взрывами соседних пузырьков. Необходимым условием такого инициирования является предварительное сжатие пузырьков в первичной ударной волне, не приводящее к взрыву части пузырьков.
5. Выполнены расчеты, на основании которых создано механическое устройство для генерации ударной волны, инициирующей взрывные процессы в химически активной пузырьковой смеси. Волна инициируется свободно падающим твердым телом при его ударе о поверхность раздела фаз или поверхность другого твердого тела, частично погруженного в пузырьковую среду.
6. В рамках моделирования ударно-волновой динамики и взрыва одиночных пузырьков и волны пузырьковой детонации предложен алгоритм учета сдвига химического равновесия и возможного наличия микрочастиц сажи в продуктах химической реакции. Предлагаемый подход позволяет существенно расширить диапазон рассматриваемых химических составов пузырьковых систем. Впервые выполнены расчеты взрывных и детонационных процессов в системах, в которых горючее и окислитель первоначально находятся в разных фазах, а также в гибридных системах и пузырьковых смесях на основе жидких монотоплив. Модель успешно верифицирована на расчетах взрывов одиночных пузырьков, структуры и пределов пузырьковой детонации и ее параметров.
7. Предсказана не известная ранее возможность распространения волны пузырьковой детонации со сверхзвуковой (относительно “замороженной” по физическим процессам скорости звука) скоростью при достаточно больших начальных давлениях в пузырьковой смеси. Предвестник в такой волне отсутствует, а давление на ее

переднем фронте испытывает скачок.

8. Проанализирована концепция акустического аналога лазерных систем (акустического “лазера”) на основе многократного прохождения детонационной волны по пузырьковой смеси на основе жидкого монотоплива.

9. Для газовой системы окислитель - пары тяжелого углеводородного горючего (циклогексана) показана принципиальная возможность конденсации паров за фронтом ударной волны. Конденсация паров приводит к изменению химического состава газа, уменьшая мольную долю горючего. В результате сильно переобогащенные (и потому изначально негорючие) смеси, могут, тем не менее, взрываться, если конденсация сдвинет химический состав смеси в область воспламенения.

Сделана оценка характерного времени конденсации. Показано, что конденсационный процесс будет иметь достаточно времени для того, чтобы существенно изменить химический состав газа, сделав его взрывоопасным в ударной волне соответствующей длительности.

Показано, что наличие химически инертных микрочастиц увеличивает степень переохлаждения и массу перешедших в жидкость паров горючего и уменьшает характерное время конденсации.

Предсказано, что принципиальная возможность конденсации рассматриваемых паров может иметь место и при адиабатическом сжатии одиночного пузырька за фронтом ударной волны, распространяющейся по жидкости. Конденсация, уменьшая мольную долю горючего, может сделать пузырьки, концентрация паров горючего в которых изначально превышает Верхний Концентрационный Предел Воспламенения, взрывоопасными.

Сделана оценка скорости конденсации. Она достаточно велика, чтобы существенно изменить химический состав газа за время первой пульсации пузырька.

Выполнен расчет взрывных пределов пузырька в зависимости от начального давления, температуры и амплитуды ударной волны. Показано, что конденсации паров приводит к расширению области взрывных пределов.

10. Проанализировано влияние физико-химических свойств конденсированной фазы на процесс гашения газовой детонации химически инертными микрочастицами. Ослабление и подавление детонационной волны более эффективно в случае частиц с высокой теплоемкостью, а при наличии плавления – с большей теплотой фазового перехода.

Научная новизна работы. Предложенный комплекс физически обоснованных

моделей химических превращений в газовых и гетерогенных смесях не имеет аналогов по совокупности своих свойств (простоте, высокой точности, соответствии второму началу термодинамики и принципу Ле Шателье, применимости в широком диапазоне начальных химических составов газовых и гетерогенных смесей, учету (при его наличии) межфазного массообмена).

Впервые разработаны приведенные модели химической кинетики для описания детонационного сгорания газообразного монотоплива и многотопливных смесей (что позволило рассчитать бифуркационную структуру газовой детонации и структуру детонации в смеси бинарного топлива с окислителем.).

Предложены модели стационарных детонационных волн в газокapельных и газопленочных смесях, впервые учитывающие сдвиг химического равновесия, в том числе при наличии межфазного массообмена.

Впервые выполнено оптическое наблюдение взаимодействия волны газовой детонации с поверхностью пузырьковой смеси и показано, что имеет место сильное механическое перемешивания фаз, способствующее интенсивному тепло- и массообмену между газообразными продуктами детонации и жидкой фазой, что может являться причиной вторичных взрывов. Разработано устройство для механической генерации ударных волн в пузырьковой смеси.

Впервые на основе оптического наблюдения и численных оценок показана возможность инициирования взрыва предварительно сжатых пузырьков преломленными ударными волнами.

Впервые предложены и численно реализованы модели взрывных и детонационных процессов в пузырьковых системах, в которых горючее и окислитель изначально находятся в разных фазах, гибридных пузырьковых системах и пузырьковых смесях на основе жидкого монотоплива. Тем самым, существенно расширен диапазон пузырьковых смесей, в которых взрывные и детонационные процессы отныне доступны для теоретического моделирования.

Впервые теоретически предсказано существование детонационных волн, распространяющихся в химически активных пузырьковых смесях со сверхзвуковой (относительно замороженной по физическим процессам скорости звука) скоростью, и в которых имеет место скачкообразный рост давления на переднем фронте волны.

Впервые проанализирована концепция “акустического лазера” на основе многократного прохождения детонационной волны по пузырьковой смеси на основе жидкого монотоплива. Принципиально новым (по сравнению с предыдущими аналогами, основанными на детонации химически активных пузырьковых систем) является

периодическая “накачка” “лазера” (“впрыск” монотоплива в пузырек) и периодическое излучение акустических сигналов.

Предсказана принципиальная возможность конденсации паров тяжелого углеводородного горючего при (i) их адиабатическом сжатии и нагреве в ударной волне, распространяющейся по реальной газовой смеси, и (ii) при ударно-волновом адиабатическом сжатии и нагреве пузырьков. Показано влияние данного эффекта на химический состав газовой фазы и взрывобезопасность. Установлено, что смеси, начальная концентрация паров горючего в которых превышает верхний концентрационный предел воспламенения (т.е. изначально негорючие смеси), могут, тем не менее, взрываться.

Проанализировано влияние термодинамических параметров материала химически инертных микрочастиц на ослабление и подавление волны газовой детонации.

Апробация работы. Результаты работы многократно докладывались на отечественных и международных конференциях и симпозиумах. Основные результаты полностью раскрыты в научных публикациях, включенных в диссертацию (список включает 53 статьи в рецензируемых научных журналах и сборниках научных статей, из которых 36 индексируются в SCOPUS и Web of Science, 3 монографии, 1 патент, 45 полномасштабных трудов научных конференций), среди которых можно выделить следующие:

1. Ю.А. Николаев, П.А. Фомин. О расчете равновесных течений химически реагирующих газов. Физика горения и взрыва, 1982, 18, 1, с. 66-72.
2. Ю.А. Николаев, П.А. Фомин. Модель стационарной гетерогенной детонации в газокапельной среде. Физика горения и взрыва, 1984, 20, 4, с. 97-105.
3. П.А. Фомин. Модель стационарной гетерогенной детонации в системе газ-пленка для переобогащенных горючим смесей. Механика быстропротекающих процессов (Динамика сплошной среды, вып. 73). Новосибирск, 1985, с. 122-136.
4. В.К. Кедринский, П.А. Фомин, С.П. Таратута. Динамика одиночного пузырька в жидкости при наличии химических реакций и межфазного тепло-и массообмена. Прикладная механика и техническая физика. 1999, 40, 2, с. 119-127.
5. П.А. Фомин, С.П. Таратута. Расчет области существования самоподдерживающейся волны пузырьковой детонации. Физика горения и взрыва, 1999, 35, 5, с. 104-106.
6. P.A. Fomin, A.A. Vasil'ev. Detonation wave modeling in typical bubble systems. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2001, 14, N 6, pp. 521-526.

7. P.A. Fomin, K.S. Mitropetros, H. Hieronymus. Modeling of detonation processes in chemically active bubble systems at normal and elevated initial pressures. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2003, Vol. 16, N 4, pp. 323-331.
8. P.A. Fomin, A.V. Trotsyuk, A.A. Vasil'ev, K. Mitropetros, H. Hieronymus, D. Roekaerts. Model of chemical reaction kinetics for calculating detonation processes in gas and heterogeneous mixtures containing hydrogen peroxide. *Combustion Science and Technology*, 2006, Vol. 178, N 5, pp. 895-919.
9. P.A. Fomin, J.-R. Chen. Shock induced condensation in a fuel-rich oxygen containing bubble in a flammable liquid. *Chemical Engineering Science*, 2008, 63, 3, pp. 696-710.
10. Pavel A. Fomin, Jenq-Renn Chen. Explosion safety aspects of shock wave-induced condensation in fuel-rich gaseous mixtures. *Combustion Science and Technology*, 180: 1317-1333, 2008.
11. П. А. Фомин, Дж.-Р. Чен. Влияние химически инертных частиц на параметры и подавление детонации в газах. *Физика горения и взрыва*, 2009, т. 45, № 3, с. 77-88.
12. П.А. Фомин. Моделирование ударно-волнового инициирования взрыва одиночных пузырьков, находящихся в жидких углеводородных горючих. *Физика горения и взрыва*, 2014, т. 50, № 6, с. 75-91.
13. P.A. Fomin, A.V. Trotsyuk, A.A. Vasil'ev. Approximate model of chemical reaction kinetics for detonation processes in mixture of CH_4 with air. *Combustion Science and Technology*, 2014, Vol. 186, № 10-11, pp. 1716-1735.
14. P.A. Fomin. Shock Wave Induced Condensation in Fuel-Rich Gaseous and Gas-Particles Mixtures. *AIP (Publishing) Conference Proceedings*, 1939, 020011 (2018).
15. P.A. Fomin. Reduced Chemical Kinetic Model of Detonation Combustion of One- and Multi-Fuel Gaseous Mixtures with Air. *AIP (Publishing) Conference Proceedings*, 1939, 020012 (2018).

Личный вклад автора. Модели химического равновесия в газовых и газожидкостных смесях и модель газокапельной детонации разработаны совместно с Ю.А. Николаевым (постановка Ю.А. Николаева, вывод конкретных формул и расчеты - П.А. Фомина). Приведенные в диссертации расчеты параметров пузырьковой детонации сделаны П.А. Фоминым по компьютерной программе, написанной им совместно с С.П. Таратутой (П.А. Фомину принадлежит алгоритм описания химических превращений). Остальные результаты, представленные в диссертации, получены автором лично.

Научная и практическая ценность работы. Предложенные модели химических превращений представляют собой эффективный научный инструмент, позволяющий просто и вместе с тем адекватно реальности описывать химические превращения при

физико-математическом моделировании широкого класса взрывных и детонационных процессов в газовых, газожидкостных и газопылевых системах, в том числе при наличии межфазного тепло- и массообмена. Они применялись как автором, так и другими исследователями при моделировании взрыва и детонации газовых и гетерогенных смесей.

Результаты Диссертации (например, расчет взрывных пределов пузырьковых смесей и параметров газочапельной детонации, расчеты ослабления газовой детонации частицами) могут применяться (и уже частично использованы) для решения вопросов обеспечения взрыво- и детонационной безопасности соответствующих систем.

Полученные в диссертации результаты по моделированию химических превращений, взрыва и детонации могут быть использованы (и уже использованы) при разработке технических устройств, использующих взрывные и детонационные процессы. Например, ракетных двигателей, использующих детонационное сгорание топлив.

Научная ценность проведенного моделирования взрывных и детонационных процессов состоит, прежде всего, в том, что оно впервые выполнено с учетом корректного описания сильного влияния химических превращений на физико-химические параметры среды.

Достоверность полученных результатов всесторонне обоснована проведенным анализом справедливости использованных в работе физических предположений, сравнении полученных результатов расчетов с экспериментом и успешной широкой практикой применения результатов работы для решения научных и практических задач.

Решение о рекомендации работы к защите. Материалы диссертации соответствуют специальности 01.02.05 – “Механика жидкостей, газа и плазмы” по областям исследования: “Течения сжимаемых сред и ударные волны. Течения многофазных сред (газожидкостные потоки, пузырьковые среды, газовзвеси). Физико-химическая гидромеханика (течения с химическими реакциями, горением, детонацией, фазовыми переходами).” Отрасль науки - физико-математические науки.

Материалы диссертации также соответствуют специальности 01.04.17 – “Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества” по областям исследования: “Закономерности и механизмы распространения, структура, параметры ... волн горения, детонации, взрывных и ударных волн; ..., термодинамика, термохимия и макрокинетика процессов горения и взрывчатого превращения. Вопросы пожаро- и взрывобезопасности веществ, материалов, процессов.” Отрасль науки - физико-математические науки.

Диссертация “Моделирование взрывных и детонационных течений в многофазных средах с химическими реакциями” Фомина Павла Аркадьевича рекомендуется к защите на

соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 – механика жидкостей, газа и плазмы.

Заключение принято на заседании объединенного семинара по физике и механике высокоэнергетических процессов Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН. Всего присутствовало 23 человека, из них 1 академик РАН, 11 докторов наук, 10 кандидатов наук.

Руководитель семинара
академик РАН



В.М. Титов

Секретарь семинара
к.ф.-м.н.



А.В. Пластинин