

## ОТЗЫВ

официального оппонента Большой Татяна Анатольевны на диссертацию Ваньковой Ольги Сергеевны «Математическое моделирование воспламенения и стабилизации горения в предварительно не перемешанных водородно-воздушных потоках при сверхзвуковых скоростях», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.9 – Механика жидкости, газа и плазмы

Анализ многочисленных научных публикаций позволяет сделать вывод что, изучение горения турбулентных пламен предварительно не перемешанных смесей является важной задачей, как с фундаментальной, так и с практической точки зрения. Турбулентное горение встречается в большинстве практических систем сгорания, таких как ракеты, двигатели внутреннего сгорания, авиационные двигатели, промышленные горелки и печи. Сверхзвуковые турбулентные течения в каналах характеризуются сложной волновой структурой, наличием областей отрыва пограничного слоя, которые оказывают существенное влияние на процессы горения. Следует отметить, что сложность процессов не позволяет использовать теоретические методы для решения задач для реальных пространственных конфигураций и многовариантных комбинаций условий потока и состава реагирующей смеси. В наземных экспериментальных установках трудно реализовать параметры, соответствующие условиям реального полёта, что в совокупности с точностью доступных методов измерения и ограниченным временем эксперимента затрудняет исследования с помощью экспериментальных методов. Поэтому наряду с экспериментальными и теоретическими методами для исследования процессов горения в сверхзвуковых потоках широко используют математическое моделирование, которое позволяет предсказать параметры воспламенения при различных условиях, проанализировать устойчивость процесса горения и минимизировать образование загрязняющих выбросов.

На характеристики пламени оказывают влияние многочисленные факторы, такие как волновая структура течения, турбулентность, акустика, смешение, химическая кинетика, радиационный теплообмен, а также их взаимное влияние. Каждый из перечисленных факторов требует разработки специальных математических моделей, а успех численного моделирования процесса турбулентного горения в целом зависит от умелого сочетания различных моделей и методов, позволяющих в условиях ограниченных ресурсов решить поставленные задачи с достаточной точностью.

Водород ( $H_2$ ) является одним из наиболее перспективных видов топлив как для использования в современных типах двигателей внутреннего сгорания, так и для энергетики будущего. Это топливо эффективно удовлетворяет комплексу требований по энергетическим

показателям двигателя и экономическим требованиям обеспечения безотходной технологии. На основании вышеизложенного актуальность диссертации Ваньковой О.С. «Математическое моделирование воспламенения и стабилизации горения в предварительно не перемешанных водородно-воздушных потоках при сверхзвуковых скоростях» не вызывает сомнений.

**Общая характеристика работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 170 наименования; содержит 182 страницы текста, 86 рисунков, 15 таблиц и схем.

**Во введении** на основании анализа зарубежных и отечественных публикаций ведущих специалистов в теории горения обоснована актуальность выбранной темы, сформулирована цель исследования, перечислены задачи для ее реализации. Проанализированы экспериментальные данные по турбулентному горению в сверхзвуковом потоке. Особое внимание уделено работам, пригодным для валидации физических моделей, которые включают экспериментальные данные измерений температуры, давления, состава смесей. Кроме этого, соискателем указана научная новизна, перечислены защищаемые положения, обоснованы научная и практическая значимость диссертации и достоверность полученных результатов, указана полнота апробации результатов в научном сообществе, отмечена связь работы с научными программами и грантами.

**В первой главе** описаны используемые математические модели и методы расчета. Приведена система осредненных по Фавру/Рейнольдсу уравнений Навье - Стокса для многокомпонентного вязкого теплопроводного газа, дополненных  $k-\omega$  SST моделью турбулентности и блоком уравнений химической кинетики. В работе использованы 6 кинетических механизмов горения водорода, включающих две приведенные и 4 детальные кинетические схемы. Для моделирования взаимодействия турбулентности и химии использована модель диссипации вихря (EDM). Далее подробно описаны подходы и методы приближенного решения дифференциальных уравнений, используемые в работе программного комплекса Ansys Fluent.

**Вторая глава** посвящена верификации математической модели, расчетного алгоритма и кинетических механизмов. Представлены результаты тестирования нескольких кинетических схем горения водорода по времени задержки воспламенения. Расчеты проведены в одномерной невязкой постановке, которая описывает распространение ударной волны в канале с закрытым концом, заполненном подготовленной смесью водорода, кислорода и инертного газа (аргона/азота). Сравнение различных подходов в моделировании горения водородно-воздушных смесей показало, что лучшее согласие с экспериментом дает подход, основанный использовании детального кинетического механизма, состоящего из 37

элементарных реакций [Maas U., Warnatz J. Ignition Processes in Hydrogen-Oxygen Mixtures // Comb. and Flame. 1988. Vol. 74. P. 53-69.]. Учет нестационарности течения позволяет получить нестационарные вихревые структуры, формирующиеся на границе слоя горения, которые оказывают существенное влияние на процессы смешения топлива и окислителя, воспламенения и стабилизацию горения, а также толщину слоя горения. Поскольку во всех рассмотренных задачах горение осуществляется по смешанному диффузионно-кинетическому механизму, учет влияния взаимодействия турбулентности и химии с использованием EDM не приводит к улучшению предсказания параметров течения и концентраций компонентов смеси.

**В третьей главе** представлены параметрические исследования влияния внешних параметров на смешение, воспламенения и горения предварительно не перемешанных водородно-воздушных смесей. Представлены параметрические исследования влияния массовой концентрации паров воды в струе воздуха на воспламенение и стабилизацию горения. Выполнена оценка средних и пульсационных составляющих основных физических величин и концентраций компонентов, которая показала сильное влияние концентраций водяных паров на процесс воспламенения и стабилизации пламени. Проведенные исследования показали, что процессом воспламенения смеси и стабилизацией пламени можно управлять, изменяя концентрации содержания паров воды во внешней воздушной струе.

**В четвертой главе** содержит результаты численного исследования процессов смешения, воспламенения и стабилизации горения для условий экспериментов, проведенных в импульсной трубе ИТ-302М ИТПМ СО РАН в режиме присоединённого трубопровода. Представлены результаты расчетов «холодных» течений для условий установки ИТ-302М, особенностью которой является то, что в ходе эксперимента давление и температура основного потока снижаются, а число Маха остаётся постоянным. Разработан алгоритм задания нестационарных условий на входе в канал, который реализован в двумерной и трехмерной постановках и верифицирован на экспериментальных данных. Полученные результаты позволили проанализировать структуру трехмерных течений в канале с инъекцией водородных струй и определить зоны, в которых может произойти воспламенение. Моделирование воспроизводит наблюдаемые в эксперименте стадии горения: локальное воспламенение, распространение пламени и интенсивное горение. Результаты расчета показали, полнота сгорания быстро растет в конце секции постоянного сечения канала и увеличивается со временем по мере распространения пламени вверх и вниз по потоку. Несмотря на то, что  $\phi < 1$ , водород полностью не сгорает. Это означает, что скорость реакций ограничивается смешением воздуха и водорода. При достижении

стационарного режима горения величина коэффициента полноты сгорания составляет 0,72 – 0,76, что является достаточно хорошим результатом для высокоскоростного потока.

**В заключении** приведены основные результаты и выводы диссертационного исследования.

Анализ полученных соискателем результатов диссертационной работы позволяет соотнести их с паспортом специальности 01.01.9 – Механика жидкости, газа и плазмы. Диссертация обоснованно представлена по указанной выше специальности.

**Научная новизна.** Пакет Ansys Fluent применен для решения нестационарных задач горения в предварительно не перемешанных высокоскоростных водородно-воздушных потоках. В широком диапазоне параметров потока и состава смесей показана эффективность выбранных моделей и численных алгоритмов. Проведена верификация кинетических схем на экспериментальных данных различных авторов, получено хорошее качественное и количественное согласование расчетных и экспериментальных данных по широкому набору параметров. В частности, впервые выполнены детальные сравнения расчета и эксперимента Cohen – Guile, в условиях которого дополнительно исследовано влияние внешних параметров и состава воздушной струи на горение спутной струи водорода.

Выполнены расчетные исследования и проведено сопоставление с экспериментальными данными, полученными в высокоэнтальпийной импульсной аэродинамической установке ИТ-302М ИТПМ СО РАН. Полученная в расчете подробная информация о параметрах потока позволила детально изучить процессы смешения, самовоспламенения смеси и стабилизации пламени при сверхзвуковых скоростях потока. Впервые в расчете получены все наблюдающиеся в эксперименте стадии нестационарного горения, а также режим с выходом волны горения в зону инъекции («тепловое запираание канала»).

**Достоверность** полученных результатов подтверждается верификацией физико-математических моделей на экспериментальных данных в широком диапазоне изменений начальных параметров и геометрии канала, соответствием результатов расчетов и экспериментальных данных, тестированием сеточной сходимости расчетов.

Стоит особо отметить результаты численных исследований в рамках эксперимента M. Burrows, A. Kurkov (1971) о воспламенении и горении плоской пристенной струи холодного водорода в потоке инертного газа / горячего влажного воздуха. В диссертации подробно описан подход к моделированию канала, который может быть использован другими исследователями. На первом этапе получены профили газодинамических и турбулентных величин, затем проведен расчет смешения водородной струи и инертного газа. И только затем проведен расчет реагирующего течения, для чего в расчетную модель



подключался блок химических реакций и модель взаимодействия турбулентности и химии.

Важным фактом является использование при моделировании детальных кинетических механизмов, потому что совместный анализ газодинамической картины течения и горения и их взаимного влияния можно сделать только на основе детальных расчетов. Получено хорошее качественное и количественно согласование расчётных и экспериментальных данных, как по ширине слоя горения, так и по профилям мольной концентрации воды, кислорода и водорода на выходе из канала. К сожалению, отсутствуют данные по концентрациям радикалов как на выходе из канала, так и по длине струи. Дополнительный анализ профилей скоростей реакций позволил бы определить ведущие реакции в горении и оценить влияние на них паров воды. Можно порекомендовать продолжить исследование в этом направлении, так как влияние водяных паров на горение в предварительно не перемешанных высокоскоростных водородно-воздушных потоках до конца не изучено и остается актуальной задачей.

Стоит отметить, что диссертация написана грамотным научно-техническим языком. Информация и результаты воспринимаются однозначно. Стиль изложения доказательный. Содержание автореферата в полном объеме соответствует материалам, изложенным в рукописи диссертации.

По материалам, изложенным в диссертации и автореферате, имеются **вопросы и замечания:**

1. Для моделирования горения водородно-воздушных смесей были использованы 4 детальные кинетические механизма и только три из них подробно описаны в гл. 2 и протестированы по времени задержки воспламенения.
2. На рис. 2.1 представлены графики времени задержки воспламенения для трех кинетических схем, определенные по различным критериям воспламенения. Из текста диссертации и подписи к рисункам не ясен состав смесей, для которых приведены данные.
3. На стр. 11 при обсуждении кинетических механизмов употребляется термин «константы скорости, входящие в закон Аррениуса», следует говорить о константах скоростей реакций.
4. При обсуждении экспериментальных данных и сравнении их с результатами моделирования следует приводить точность экспериментов, для более убедительных выводов в пользу той или иной кинетической модели (например стр. 43).
5. Были ли проблемы с иницированием горения при решении задач в двухмерной и

трехмерной постановке? Использование при моделировании детальных кинетических механизмов, в которых отсутствуют реакции топлива и окислителя, а кинетическая схема включает их взаимодействие через радикальный пул, приводит к тому, что необходимо инициация воспламенения. Какие методы для иницирования применялись?

Перечисленные замечания носят дискуссионный и рекомендательный характер и не снижают высокой оценки научной и практической значимости результатов, полученных соискателем. Считаю, что диссертация Ваньковой Ольги Сергеевны «Математическое моделирование воспламенения и стабилизации горения в предварительно не перемешанных водородно-воздушных потоках при сверхзвуковых скоростях» является законченной научно-квалификационной работой по актуальности, научной значимости, практической ценности и другим показателям соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.9 – Механика жидкости, газа и плазмы.

Даю согласие на обработку персональных данных.

Официальный оппонент

кандидат физико-математических наук,

старший научный сотрудник

лаборатории кинетики процессов горения ИХКГ СО РАН

Большова Татьяна Анатольевна

22 декабря 2022 г.

Подпись Большовой

Заместитель директо

АН

Валиулин Сергей Владимирович

Большова Татьяна Аг

Кандидат физико-ма

взрыв, физика экстремальных состояний вещества)

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук

630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Институтская, д. 3

Тел.: +7 (383) 333-33-46

E-mail: [bolshova@kinetics.nsc.ru](mailto:bolshova@kinetics.nsc.ru)

01.04.17 – Химическая физика, горение и

Председателю диссертационного совета Д 003035.02  
академику В.М. Фомину

### ЛИЧНОЕ СОГЛАСИЕ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

Я, Большова Татьяна Анатольевна, даю свое согласие выступить в качестве официального оппонента по диссертации Ваньковой Ольги Сергеевны на тему: «Математическое моделирование воспламенения и стабилизации горения в предварительно не перемешанных водородно-воздушных потоках при сверхзвуковых скоростях» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.9 – механика жидкости, газа и плазмы.

О себе сообщаю:

Ученая степень, отрасли науки	кандидат физико-математических наук
Научные специальности, по которым защищена диссертация	01.04.17 - "Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества"
Ученое звание	
Академическое звание	
Тел:	+7-913-941-
E-mail:	<a href="mailto:bolshova@kinetics.nsc.ru">bolshova@kinetics.nsc.ru</a>
Должность	Старший научный сотрудник
Подразделение организации	лаборатория Кинетики процессов горения
Полное наименование организации, являющейся основным местом работы	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения РАН
Ведомственная принадлежность орг.	Министерство науки и высшего образования РФ
Адрес служебный: Почтовый индекс, город, улица, дом	630090, Российская Федерация, Новосибирск, Институтская ул., 3
Web-сайт организации.	<a href="http://www.kinetics.nsc.ru/index.php/ru/">http://www.kinetics.nsc.ru/index.php/ru/</a>
Телефон организации.	+7 (383) 330-78-79
E-mail организации.	<a href="mailto:admin@kinetics.nsc.ru">admin@kinetics.nsc.ru</a>

По теме рассматриваемой диссертации имею 53 научных работ, в том числе в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 работ):

№	Авторы	Название	Издательство, журнал, год, №, страницы	Вид, год
1	Князьков Д.А., Большова Т.А., Дмитриев А.М., Шмаков А.Г., Коробейничев О.П.	Экспериментальное и численное исследование кинетики химических реакций в пламени синтез-газа $H_2/CO$ при давлении $1 \div 10$ атм,	Физика горения и взрыва. Т. 53. № 4. С. 23-33.	Статья, 2017

2	Knyazkov D.A., Dmitriev A.M., Bolshova T.A., Shvartsberg V.M., Shmakov A.G., Korobeinichev O.P.	Structure of premixed H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /Ar flames at 1-5 atm studied by molecular beam mass spectrometry and numerical simulation	Proceedings of the Combustion Institute. T. 36. N 1. C. 1233-1240.	Статья, 2017
3	Шварцберг В.М., Большова Т.А., Шмаков А.Г., Коробейничев О.П.	Механизм самовоспламенения смеси диметилового эфира с воздухом в присутствии атомарного железа	Физика горения и взрыва. Т. 53. № 3. С. 27-32.	Статья, 2017
4	Shvartsberg V.M., Bunев V.A., Bolshova T.A., Babkin V.S.	Role of hydroxyl production and heat release in the two-zone fuel-rich adiabatic dimethyl ether/air flames at atmospheric pressure	Combustion Theory and Modelling. T. 21. № 6. C. 1176-1188.	Статья, 2017
5	Knyazkov D.A., Bolshova T.A., Dmitriev A.M., Shmakov A.G., Korobeinichev O.P.	The effect of methyl pentanoate addition on the structure of a non-premixed counterflow n-heptane/O <sub>2</sub> flame	Energy and Fuels. T. 32. № 2. C. 2397-2406.	Статья, 2018
6	Osipova K.N., Bolshova T.A., Korobeinichev O.P., Kuibida L.V., Shmakov A.G.	Effect of addition of methyl hexanoate and ethyl pentanoate on the structure of premixed n-heptane/toluene/O <sub>2</sub> /Ar flame	Energy and Fuels. T. 33. № 5. C. 4585-4597.	Статья, 2019
7	Dmitriev A.M., Osipova K.N., Shmakov A.G., Bolshova T.A., Knyazkov D.A., Glaude P.A.	Laminar flame structure of ethyl pentanoate at low and atmospheric-pressure: experimental and kinetic modeling study	Energy. T. 215. C. 119115.	Статья, 2021
8	Bolshova T.A., Shvartsberg V.M., Shmakov A.G.	Synergism of trimethylphosphate and carbon dioxide in extinguishing premixed flames	Fire Safety Journal. T. 125. C. 103406.	Статья, 2021
9	Большова Т.А., Чернов А.А., Шмаков А.Г.	Сокращенный химико-кинетический механизм окисления метилметакрилата в пламенах при атмосферном давлении	Физика горения и взрыва. Т. 57. № 2. С. 34-47.	Статья, 2021
10	Коробейничев О.П., Шмаков А.Г., Шварцберг В.М., Большова Т.А., Князьков Д.А., Трубачев С.А.	Механизм реакций химически активных ингибиторов горения в пламенах	Химическая физика. Т. 40. № 5. С. 22-35.	Статья, 2021
11	Knyazkov D.A., Bolshova T.A., Shvartsberg V.M., Chernov A.A., Korobeinichev O.P.	Inhibition of premixed flames of methyl methacrylate by trimethylphosphate	Proceedings of the Combustion Institute. T. 38. № 3. C. 4625-4633.	Статья, 2021
12	Knyazkov D.A., Gerasimov I. E., Bolshova T.A., Kiselev V.G., Shmakov A.G., Paletsky A.A.	Cationic structure of premixed near-stoichiometric CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub> /Ar flames at atmospheric pressure: New insights from mass spectrometry, quantum chemistry, and kinetic modeling	Combustion and Flame. № 241. C. 112106.	Статья, 2022



Не являюсь членом экспертного совета ВАК

Согласен на включение моих персональных данных в аттестационное дело соискателя и их дальнейшую обработку.

Дата 29.09.2022

Большова Т.А / Подпись

Подпись Большова Т.А. удостоверяю

секретарь  
СО РАН  
).-М.Н.  
ева А.П.