

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Вэньчао Лю
«Влияние модели химической кинетики на результаты численного моделирования
турбулентных течений с горением», представленную на соискание ученой
степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.9. –
Механика жидкости, газа и плазмы

Математическое моделирование является важным инструментом исследования процессов воспламенения, смешения и горения, позволяющим получить детальное описание процессов в камере сгорания в широком диапазоне скоростей и параметров смеси. Одним из определяющих элементов численной модели процессов горения является выбор кинетической схемы. К настоящему времени разработано большое количество кинетических механизмов горения водорода и углеводородов в воздухе различной степени сложности, от детальных, включающих сотни реакций, до упрощенных брутто-механизмов, содержащих одну или несколько глобальных реакций. При расчете трехмерных турбулентных реагирующих течений используются усечённые кинетические механизмы, что позволяет существенно сократить время расчета. Однако вопросы, связанные с валидацией кинетических схем, необходимо исследовать дополнительно. Еще одной важной проблемой, требующей особого внимания при решении задач горения, является влияние турбулентности на скорости химических реакций и, в частности, анализ нелинейного взаимодействия кинетического механизма с моделью турбулентного горения.

В диссертации Вэньчао Лю поставлена цель изучить влияние модели химической кинетики на структуру и характеристики турбулентных течений с химическими реакциями в каналах в условиях двух классических экспериментов. В первом случае исследуется горение предварительно перемешанных («неподготовленных») смесей при высоких скоростях потока, а во втором - горение «подготовленных» смесей при низких скоростях. Диссертант успешно справился с решением указанных задач и достиг поставленной цели.

Диссертация объемом 154 страницы состоит из введения, 4 глав, заключения, списка литературы (161 источник) и двух приложений, содержит 80 иллюстраций и 14 таблиц.

Во введении обоснована актуальность темы исследований, описана степень ее разработанности, сформулированы цели и задачи диссертации, указана ее новизна и значимость, а также выполнен обзор кинетических моделей горения углеводородов и компьютерных программ для моделирования течений с горением. Описаны результаты предыдущих численных исследований высокоскоростных реагирующих течений, в которых модели кинетики оказывают большое влияние на результаты расчетов. На основании обзора сделаны выводы о важности выбора кинетической схемы, о неприменимости упрощенных глобальных механизмов при расчете сложных течений, а также отмечено влияние кинетического механизма на структуру сверхзвукового пламени.

Глава 1 содержит описание математической модели. Представлена полная система нестационарных уравнений Рейнольдса (URANS) для многокомпонентного реагирующего газа и замыкающие соотношения, которые включают модели химической кинетики, молекулярной диффузии, а также модели турбулентности, учитывающие шероховатость стенок. Приведены формулы для вычисления физических свойств газовых смесей и описаны модели взаимодействия турбулентности с горением.

В **Главе 2** решена одномерная задача о распространении ламинарного пламени, характеристики которого (время задержки воспламенения и скорость пламени) являются фундаментальными свойствами турбулентного горения смесей с предварительно перемешанными компонентами. Задача об одномерном ламинарном пламени входит в набор основных тестов для моделей кинетики, поэтому на ее основе исследованы кинетические механизмы, которые далее применяются для решения поставленных в диссертации задач. Диссертант предложил способ численного решения этой непростой задачи, в которой необходимо устранить влияние акустики и найти заранее неизвестную скорость волны горения относительно исходной смеси, который реализован в собственном

программной коде. Результаты проведенных расчетов показали, что упрощенный подход, основанный на использовании коэффициентов диффузии воздуха вместо коэффициентов многокомпонентной бинарной диффузии, может привести к завышению скорости ламинарного пламени метана в воздухе и к занижению скорости распространения ламинарного пламени водорода в воздухе. Показано, что все рассмотренные механизмы горения метана правильно предсказывают скорость ламинарного пламени в диапазоне коэффициентов избытка топлива 0.7 - 1.0, однако результаты, полученные с помощью разных схем, существенно отличаются в случае богатых смесей. Следует отметить важность проведенных в этой главе исследований для анализа данных, полученных в следующих главах диссертационной работы.

Глава 3 содержит результаты трехмерного численного моделирования высокоскоростного турбулентного горения поперечной струи водорода в сверхзвуковом потоке воздуха в расширяющемся канале. Расчеты выполнены для условий экспериментов, проведенных в исследовательском центре ONERA (Франция), результаты которых использованы для валидации численных моделей. В работе рассматривается только один случай из большой экспериментальной серии, который ранее был изучен другими авторами с использованием других программных средств. Для расчетов этой задачи автор использует коммерческий программный комплекс Ansys Fluent. Изучено влияние модели молекулярной диффузии, параметра шероховатости и кинетической схемы на результаты численного моделирования. Показано, что в отличие от случая ламинарного пламени, выбор модели молекулярной диффузии мало влияет на структуру течения. С помощью подбора условной высоты шероховатости стенки получено хорошее совпадение с экспериментом по распределению давления на стенке. Выполнено сравнение распределений концентраций радикалов, полученных при использовании трех кинетических схем горения водорода, и оценено их влияние на процессы горения в канале. На основе анализа результатов расчетов высокоскоростных реагирующих течений в канале, в которых существенную роль играет самовоспламенение, сделан вывод о том, что влияние модели химической

кинетики на распределение давления на стенках канала несущественно. Однако выбор кинетической схемы оказывает значительное влияние на трехмерную структуру течения, распределение тепловых потоков по стенкам канала и на полноту сгорания топлива.

В Главе 4 представлены результаты численного моделирования низкоскоростного турбулентного течения с горением предварительно перемешанной метано-воздушной смеси, которое диссертант провел в пакете Fluent в условиях экспериментов ONERA. Исследуемая модель представляет собой плоский канал с обратным уступом, который часто используется для стабилизации горения как при малых, так и при высоких скоростях потока. Изучены факторы, определяющие структуру отрывного течения за уступом и сопоставлены результаты, полученные с использованием различных моделей турбулентности. Показано, что $k-\omega$ SST модель турбулентности занижает турбулентную вязкость на фронте пламени. Лучшие результаты по описанию скорости волны горения получены при использовании $k-\omega$ BSL модели турбулентности. Для учета взаимодействия турбулентности с горением автор применяет предложенную Хомяком и Карлссоном модель реактора частичного перемешивания (PaSR), с помощью которой другие авторы ранее получили хорошие результаты для аналогичной конфигурации с использованием других программных средств. Указанная модель TCI отсутствует в стандартном наборе моделей горения пакета Fluent, поэтому автор пришлось применить возможности пользовательского программирования пакета Fluent, а также выполнить настройку коэффициентов модели. При сравнении результатов расчетов с разными кинетическими схемами получено, что более точный и универсальный скелетный механизм дает худшие результаты, чем глобальные модели. Диссертант объясняет этот факт тем, что неучет диффузии в модели PaSR приводит к выбору неправильного пути реакции. На основании этого сделано заключение о том, что в рамках моделей TCI, не учитывающих диффузию и другие пространственные процессы (например, PaSR), следует вместо многостадийных кинетических механизмов использовать квазиглобальные модели, которые дают хорошую оценку интеграла

тепловыделения. Детальные и скелетные кинетические механизмы позволяют получить хорошие результаты в рамках моделей турбулентного горения, учитывающих пространственный перенос (к таким относится, например, модель EPaSR).

По результатам рассмотрения диссертации Вэньчао Лю можно сделать следующие замечания:

1. Текст диссертации содержит орфографические и синтаксические ошибки (например, на стр. 17, 20, 23, 41, 50, 51, 66, 73, 74, 101, 102 и др.), ссылки на несуществующие формулы, например, на (1.44) на стр. 51, 116 и 117 или на (1.61) на стр. 64. Некоторые иностранные термины не переведены на русский язык.
2. Отсутствует описание постановки одномерной задачи в **Главе 2**.
3. Большинство величин представлено диссертантом в размерном виде, что не позволяет провести сравнение полученных данных с результатами других авторов и обобщить их на другие геометрические размеры и входные параметры течений.
4. В расчете подогревателя и сопла Лавалья (стр. 78) принятая в расчетах величина температуры стенки ($T_w = 1490$ K) представляется завышенной.
5. Как показали расчеты **Главы 3**, содержащей основные результаты диссертации, конфигурация канала модели ONERA LAPCAT II и условия экспериментов, используемых для валидации расчетной модели, не позволяют получить высокий уровень полноты сгорания и максимальное тепловыделение. Кроме этого, отсутствуют данные о температуре стенок и тепловых потоках, позволяющие провести детальное сравнение с результатами расчетов, в которых эти параметры играют важную роль. Поэтому для валидации используемых моделей и их совершенствования, по-видимому, необходимо использовать данные, полученные на специально спроектированных экспериментальных моделях, оснащенных датчиками

тепловых потоков, позволяющих производить оптические измерения, а также изменять геометрию проточной части.

6. В **Главе 3** сделан ожидаемый вывод о незначительном влиянии выбора модели молекулярной диффузии на результаты расчетов высокоскоростного течения с горением струи водорода, поскольку в данной задаче преобладает турбулентная диффузия. При этом в работе использовались стандартные значения турбулентных чисел Прандтля $Pr_t=0.9$ и Шмидта $Sc_t=1$. Было бы интересным исследовать влияние турбулентных чисел Прандтля и Шмидта на результаты моделирования, так как для некоторых течений значения Sc_t могут существенно отличаться от единицы.
7. Непонятно, почему в **Главе 4** для расчета низкоскоростного течения использован решатель, основанный на плотности (“density-based”). Для таких задач лучше подходит решатель, основанный на давлении (“pressure-based”), в который, кроме того, включено большее количество физических моделей.
8. В **Главе 4** при описании методики расчета не указано, какие величины использовались для контроля сеточной сходимости, хотя в эксперименте проведены измерения средних и пульсационных характеристик течений, и было бы полезным использовать эти экспериментальные данные для исследования сходимости по сетке.
9. Даже для «холодного» случая (без химических реакций) не приведены значения характерной безразмерной высоты пристенной ячейки y^+ .

Указанные недостатки не снижают научную ценность диссертации Вэньчао Лю. Данная работа является существенным вкладом в развитие методов вычислительной газодинамики течений с горением. Особо подчеркну, что во всех рассмотренных случаях автор пытается найти физические причины, объясняющие полученные в рамках той или другой модели результаты, что очень важно с точки зрения разработки расчетно-теоретических моделей горения. Полученный опыт полезен также с практической точки зрения, поскольку он может быть использован для повышения качества расчетов различных энергетических устройств.

Таким образом, диссертация Вэньчао Лю является законченным научным исследованием, которое по актуальности и новизне изложенных результатов, а также по объему проделанной работы соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 г. Содержание диссертации адекватно отражено в автореферате. Считаю, что Вэньчао Лю заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.9. – Механика жидкости, газа и плазмы.

Отзыв составил:

Ведущий научный сотрудник ИТПМ СО РАН,
доктор физико-математических наук по
специальности 01.02.05 – Механика жидкости,
газа и плазмы), профессор,
г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1,
тел. +7 383 3308538,
e-mail nfed@itam.nsc.ru

Федорова Наталья Николаевна

7.08.2023

Подпись Федоровой Н.Н. удостоверяю

Ученый секретарь ИТПМ СО РАН,
кандидат физико-математических наук
г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1
тел. +7 383 3304279
e-mail sci_itam@itam.nsc.ru

Юратова



Юратова Юлия Владимировна

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук (ИТПМ СО РАН), г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1, тел. +7383 3304268 e-mail admin@itam.nsc.ru