

“УТВЕРЖДАЮ”

И.О. Директора ФИЦ ХФ РАН -

д.ф.-м.н.

/ А.В. Чертович /

“ 03 ” августа 2023 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

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

Диссертация Вэньчао Лю посвящена исследованию взаимодействия модели кинетики с другими математическими моделями (турбулентности и турбулентного горения) в расчетах численного моделирования турбулентных течений с горением. Детальное описание процессов воспламенения, смешения и горения в камере сгорания с помощью численного моделирования имеет большое практическое значение. В связи с большими вычислительными затратами при расчете трехмерных (и, вообще говоря, нестационарных) турбулентных течений с горением приходится использовать усеченные модели химической кинетики – скелетные, редуцированные или глобальные кинетические механизмы. Вопрос о возможном влиянии модели химической кинетики на результаты численного моделирования турбулентных течений с горением рассмотрен в научной

литературе недостаточно. В частности, анализ возможного взаимодействия кинетического механизма с моделью турбулентного горения в литературе практически отсутствует, в связи с чем эта работа является **актуальной**.

Целью диссертационной работы Вэньчао Лю является анализ влияния модели химической кинетики на структуру и характеристики течения, получаемые в расчете, на примере моделирования двух классических экспериментов по высокоскоростному перемешанному и низкоскоростному перемешанному турбулентному горению в каналах.

В диссертации 154 страницы текста, 80 рисунков и 14 таблиц. Помимо Введения, 4 Глав и Заключения, диссертация содержит 2 приложения и список литературы (161 источник). **Введение** включает **обзор** существующих кинетических моделей, программ для расчетов горения и предшествующих исследований, в которых так или иначе демонстрировалось влияние кинетики на результаты расчетов.

Глава 1 содержит описание математической постановки задачи. Выписана система нестационарных уравнений Рейнольдса (URANS) для многокомпонентного реагирующего газа, обсуждаются замыкающие модели турбулентности, горения и взаимодействия турбулентности с горением, модели молекулярной диффузии и граничное условие на шероховатых стенках.

В **Главе 2** описано решение задачи о распространении ламинарного пламени в предварительно перемешанной смеси, выполненное автором с применением собственной программы, и исследованы кинетические механизмы, которые использованы далее для решения основных задач диссертации.

В **Главе 3** проанализированы факторы, определяющие структуру течения с высокоскоростным перемешанным турбулентным горением водорода в экспериментальной модели ONERA LAPCAT II. Обеспечено согласование с экспериментальными данными по распределениям давления. После этого сравнены и проанализированы результаты расчетов с различными моделями химической кинетики.

В Главе 4 исследованы факторы, определяющие структуру течения с дозвуковым предварительно перемешанным турбулентным горением в экспериментальной модели ONERA с обратным уступом. Обеспечено согласование с экспериментальными данными по профилям температуры и продольной скорости. После этого выполнено сопоставление результатов расчетов с различными моделями химической кинетики и дано объяснение неожиданного результата, когда более точная модель кинетики (скелетный механизм Smooke25) дал неправильное решение, тогда как глобальные модели кинетики позволили получить решение, согласующееся с экспериментом.

В диссертации на базе результатов расчетов с использованием разных моделей химической кинетики для двух классических экспериментов сделаны следующие основные выводы:

- 1) при моделировании высокоскоростного горения в канале с существенной ролью самовоспламенения, модель химической кинетики мало влияет на распределение давления по стенкам канала, но оказывает значительное влияние на трехмерную структуру течения. Это приводит к различиям в предсказании распределения и величины тепловых потоков, а также полноты сгорания топлива;
- 2) При использовании моделей TCI, не учитывающих диффузию и другие пространственные процессы (например, PaSR), рекомендуется использовать не многостадийные кинетические механизмы, а квазиглобальные модели, которые дают хорошую оценку интеграла тепловыделения. Детальные и скелетные кинетические механизмы можно использовать вместе с моделями TCI, учитывающими пространственный перенос (например, EPaSR).

По работе можно высказать следующие замечания:

1. При низких температурах в окислении водорода основную роль играют реакции с участием пероксидов. Поэтому применение механизма Jachimowski7, в котором нет пероксидов, некорректно.

2. В Главе 4 для сравнения с экспериментом автор осредняет полученные результаты по времени. Такой подход допустим, но его корректность требует проверки. Кроме того, в работе не исследовано влияние длины канала и граничных условий на выходе из канала на получаемое решение. Автору следовало бы рассмотреть возможность применения неотражающих граничных условий в выходном сечении канала.
3. “Детальная теория” молекулярной диффузии, использованная автором, на самом деле является приближенной эмпирической корреляцией, основанной на гипотезе о независимости коэффициентов бинарной диффузии от других веществ, присутствующих в смеси. В случае горения неперемешанных водородных смесей молекулярная диффузия существенно влияет на структуру течения. Поэтому вывод о слабом влиянии диффузии в Главе 3 следовало бы проверить путем сопоставления с точной теорией.

Перечисленные недостатки не снижают научную ценность диссертации Вэньчао Лю. В диссертации решена задача, имеющая важное значение для развития численного моделирования горения в камерах сгорания воздушно-реактивных двигателей и газотурбинных установок – задача о влиянии кинетической модели на результаты расчета двух важных классов турбулентных течений в каналах. Представленное исследование выполнено, в целом, на высоком научном уровне, а его результаты опубликованы в научных журналах, рекомендованных ВАК («Горение и взрыв», «Труды МФТИ», «Теплофизика и аэромеханика») и изложены на авторитетных профессиональных конференциях.

Диссертация Вэньчао Лю была рассмотрена на семинаре в Отделе горения и взрыва ФИЦ ХФ РАН 20 июля 2023 года, протокол № 6. Доклад В. Лю получил положительную оценку. Был высказан ряд рекомендаций, направленный на повышение качества дальнейших исследований.

Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертации.

Из всего вышеизложенного можно сделать вывод о том, что 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 присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор Вэньчао Лю заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.9. – Механика жидкости, газа и плазмы.

Отзыв составил заместитель руководителя
Отдела горения и взрыва ФИЦ ХФ РАН,
заведующий Лаборатории горения, г.н.с.,
д.ф.-м.н.

119991, Москва, ул. Косыгина, 4,
+7(495)939-73-07
krupkin49@mail.ru

Крупкин Владимир Герцович



03 августа 2023 года

Подпись Крупкина В.Г. удостоверяю
И.О. Ученого секретаря ФИЦ ХФ РАН
к.х.н.

119991, Москва, ул. Косыгина, 4,
+7(495)939-72-09
ionova63is@yandex.ru

Ионова Ирина Сергеевна




Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук» (ФИЦ ХФ РАН)

119991, Москва, ул. Косыгина, 4,
+7 (495) 939-72-03, icp@chph.ras.ru