

Отзыв
официального оппонента д.ф.-м.н. Якуша Сергея Евгеньевича
на диссертационную работу Стамова Любена Ивановича
«Математическое моделирование неравновесных процессов детонации и
горения, а также переходных режимов на многопроцессорных ЭВМ»,
представленную на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.02.05 – «Механика жидкости, газа и плазмы».

Актуальность работы. Газовая динамика процессов горения и детонации является важнейшей областью науки, находящейся в стыке нескольких областей знания – механики сплошных сред, химической кинетики, химической термодинамики, вычислительной математики. Течения реагирующих газов находят широкое применение в энергетике, аэрокосмической отрасли, двигателестроении. С другой стороны, неконтролируемое горение, взрывные явления могут представлять собой серьезную опасность, требуя создания средств оценки и предотвращения негативных последствий. На современном этапе развития науки особую важность приобретает создание эффективных вычислительных средств, позволяющих решать задачи о горении и детонации в условиях сложной геометрии и с использованием детальных кинетических схем. С этой точки зрения диссертационная работа Л. И. Стамова, в которой на основе разработанного программного пакета, использующего для ускорения моделирования различные архитектуры вычислительных систем, изучены процессы горения и детонации газовых смесей в условиях отражения и фокусировки ударных волн в химически реагирующих газовых смесях, является актуальной и представляет несомненный научный и практический интерес.

Содержание работы. Диссертационная работа Л. И. Стамова состоит из введения, четырех глав, заключения и списка используемых источников

Во введении обоснована актуальность темы исследования, сформулированы цели и задачи исследования, изложены научная новизна и практическая значимость работы. Здесь же описан применяемый метод исследования, приведен список положений, выносимых на защиту, охарактеризован личный вклад автора, достоверность результатов, данные о презентации результатов работы на профильных научных форумах и статистика публикационной активности автора.

В первой главе диссертации представлен достаточно подробный литературный обзор по теме исследования, включая горению и детонацию газовых смесей, переходы между этими режимами, проблемы моделирования турбулентности и решения задач химической кинетики. Список литературы

содержит 167 источников, достаточно полно отражающих как классические работы в теории горения, так и современное состояние исследований детонации и применяемых численных методов.

Вторая глава посвящена описанию математической модели реагирующих турбулентных течений сжимаемого газа, а также используемой при проведении исследований вычислительной моделей. Приведена основная система уравнений, содержащая законы сохранения для многокомпонентного газа реагирующего газа, рассмотрена ее численная дискретизация, позволяющая рассчитывать горение, детонацию и переходные процессы. Описана постановка граничных условий, в том числе учет логарифмического погранслоя на твердых поверхностях при турбулентном течении. Приведено описание алгоритмов, используемых при решении системы уравнений химической кинетики.

В третьей главе представлены результаты тестирования разработанного программного комплекса. В качестве тестовых задач использована задача Римана о распаде произвольного разрыва и задача распространения детонационной волны в трубе квадратного сечения при инициировании детонации путем подвода массы и энергии в малую область у одного из торцов. Приведено сравнение результатов моделирования с аналитическими решениями для нескольких численных схем, изучено влияние численной сетки на получаемый результат. Приведены данные по параллельной реализации программного комплекса на основе технологий CUDA и OpenMPI, рассмотрены данные по ускорению счета для различных сеток и вычислительных платформ.

В четвертой главе представлены результаты численного моделирования процессов, сопровождающих возникновение детонации в цилиндрической трубе, заполненной покоящейся стехиометрической водородно-воздушной смесью, при фокусировке падающей ударной волны на специальной вставке у одного из торцов трубы. Решенные задачи включают несколько случаев, отличающихся геометрией вставки и параметрами падающей волны. Получены численные решения, демонстрирующие возникновение детонации в клинообразной вставке, возникновение детонации в конусообразной вставке, отражение ударной волны от внутренней поверхности вставки в виде клина и переход горения в детонацию при отражении от внутренней поверхности клина. Проведено сравнение с данными физических экспериментов, полученных в ударной трубе, и с теоретической скоростью распространения детонации для случаев ее возникновения. Валидационные расчеты подтвердили, что созданное автором программное обеспечение позволяет с хорошей точностью описывать данный класс задач.

В **заключении** сформулированы выводы по результатам проведенного исследования. Кроме того, каждая глава диссертации завершается выводами по соответствующему разделу, более детально описывающими соответствующие результаты

Представленные в рассматриваемой работе задачи обладают **научной новизной**. При проведении оригинального численного исследования процессов горения и детонации газовых смесей, возникающих при отражении и фокусировке ударных волн в химически реагирующей газовой смеси, были выделены различные сценарии происходящих процессов: при слабой падающей волне отражение и фокусировка не приводят к зажиганию горючей смеси, при сильной падающей волне ее отражение и фокусировка приводят к возникновению детонационной волны в вершине, а при падающей волне промежуточной интенсивности за отраженной ударной волной возможно возникновение волны горения, которая при определенных условиях ускоряется и приводит к переходу горения в детонацию. Проведенная в ходе работ валидация разработанной вычислительной модели подтвердила надежность созданного программного пакета и возможность его применения для исследования процессов горения и детонации, а также перехода от горения к детонации в водородно-воздушных смесях.

Достоверность результатов и выводов данной работы подтверждена в ходе публикаций материалов работы в 12 журналах, рекомендуемых ВАК и индексируемых в международных системах цитирования. Результаты прошли апробацию на международных и российских конференциях и семинарах. Результаты численных расчетов были протестированы путем сравнения с экспериментальными данными. В основу работы созданного программного комплекса легли общепринятые в научной среде фундаментальные законы.

Соответствие паспорту специальности. Содержание и результаты работы полностью соответствуют паспорту научной специальности 01.02.05 – «Механика жидкости, газа и плазмы». Структура и оформление диссертации и автореферата соответствуют требованиям ГОСТ Р 7.0.11-2011. Автореферат соответствует основному содержанию диссертации.

По работе можно высказать следующие замечания.

1. В названии диссертационной работы термин «неравновесные процессы детонации и горения» не слишком удачен: процессы физической неравновесности (например, по колебательным и поступательным степеням свободы) не рассматривались, тогда как химическая неравновесность (в смысле отсутствие равновесия между прямыми и обратными реакциями) при горении и детонации всегда имеет место.

2. Детальные кинетические механизмы, публикуемые в литературе, как правило отличаются составом учитываемых элементарных реакций и значениями их кинетических констант. При этом валидация кинетического механизма осуществляется на некотором наборе экспериментов, что подтверждает возможность использования данного набора констант совместно. Применяемый автором подход (см. Таблицу 3, стр. 41), состоящий в замене констант некоторых реакций, а также добавлении новых реакций (например, реакции 20), возможен, однако должен рассматриваться только как первый шаг, за которым должна следовать валидация полученного механизма в соответствующих кинетических расчетах. Такие расчеты в диссертации отсутствуют.

3. Модель турбулентности используется автором только для расчета эффективной вязкости и теплопроводности, однако для расчета скорости реакций используется квазиламинарный подход (т.е. скорости реакций вычисляются при осредненной по Рейнольдсу температуре, что не учитывает влияния пульсаций). Следовало привести аргументы в пользу справедливости такого подхода, в особенности в задаче о переходе турбулентного горения в детонацию.

4. Расчеты проводились в трехмерной постановке, однако все представленные результаты по сути являются двумерными (близкими к плоской или осесимметричной геометрии). Было бы интересно проанализировать возникновение и характеристики истинно трехмерных решений, наличие поперечных волн и т.п.

Приведенные замечания не влияют на основные результаты работы и не снижают ее высокой научной и практической значимости. Работа носит завершенный характер. Полученные в ней результаты и созданное программное обеспечение представляют практический интерес с точки зрения возможности моделирования как технических устройств, так и неконтролируемых режимов горения для более широкого класса горючих газов. Вошедшие в диссертацию результаты опубликованы в ведущих отечественных и международных изданиях, неоднократно докладывались на профильных конференциях по механике, горению и взрыву.

Диссертационная работа «Математическое моделирование неравновесных процессов детонации и горения, а также переходных режимов на многопроцессорных ЭВМ» является научно-квалификационной работой, в которой на основе созданного оригинального программного обеспечения решены задачи газовой динамики реагирующих течений, имеющие несомненное фундаментальное и прикладное значение. Считаю, что диссертационная работа соответствует требованиям утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 Положения

о присуждении ученых степеней, предъявляемых к кандидатским диссертациям, а ее автор, Стамов Любен Иванович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы.

Официальный оппонент
д.ф.-м.н., директор
Института проблем механики
им. А.Ю. Ишлинского
Российской академии наук

С.Е. Якуш

«19» апреля 2021 г.

Подпись д.ф.-м.н. С.Е. Якуша удостоверяю.

Ученый секретарь ЦПМех РАН



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского
Российской академии наук (ИПМех РАН)
119526, Москва, пр-т Вернадского, д. 101, корп. 1.
Тел. +7(495)434-34-83
E-mail: yakush@ipmnet.ru