

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию
Моисеевой Ксении Михайловны

«МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛО- МАССОПЕРЕНОСА ПРИ ГОРЕНИИ ГАЗОВОЙ СМЕСИ В ХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ С ИНЕРТНОЙ ВНУТРЕННЕЙ ВСТАВКОЙ»

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника

Работа посвящена развитию теоретических представлений о процессах горения реакционных газовых смесей в химическом реакторе. Несмотря на многочисленные теоретические и экспериментальные исследования, проблема горения газов в химических энергетических установках далека от своего решения. Отсутствие надежных прогностических математических моделей, позволяющих оценивать основные характеристики горения в химических реакторах, сдерживает внедрение реакторов с новыми конструктивными особенностями. В этом принципиальная новизна и практическая значимость диссертации Моисеевой К.М., посвященной изучению процессов тепло-массопереноса и режимам работы энергетических установок с инертной внутренней вставкой.

Диссертация К.М. Моисеевой, объемом 169 страниц, состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, включающего 98 наименований.

Во Введении показаны актуальность работы, ее новизна и практическая значимость, сформулированы цель проведенного исследования и выносимые на защиту положения, поставлены задачи исследования.

В первой главе «Горение реакционных смесей в химических реакторах на фоне процессов тепло-массопереноса» представлен обзор научной литературы.

В первой части обзора описаны различные типы реакторов, использующихся в качестве установок для химического превращения горючих газовых смесей. В нем, в частности, утверждается, что для теоретических исследований типы реакторов целесообразно классифицировать в порядке усложнения описывающих их работу математических моделей. На основании исследований других авторов делается вывод, что автоколебательные и колебательные режимы работы реакторов являются энергоэффективными, то есть наиболее оптимальными, обеспечивающими максимальную полноту химического превращения в них.

Вторая часть первой главы, в основном, посвящена обзору теоретических работ, рассматривающих задачи горения в различных типах реакторов и математические модели, их описывающие. Приведены

результаты исследований задач горения в объемном режиме (без учета пространственной координаты), а также в одномерной, двухмерной и трехмерной постановках, рассмотрены аналитические методы их решения. Показано, что теоретические исследования других авторов, направленные на изучение протекания физико-химических процессов в реакторах с инертной внутренней вставкой, ограничились рассмотрением реактора идеального смешения, для которого были определены области колебательного режима его работы.

В третьей (резюмирующей) части обзора, исходя из анализа приведенных в нем работ, формулируются выводы о современном состоянии данной области науки, и очерчивается круг задач, подлежащих рассмотрению в настоящем исследовании.

Во второй главе *«Режимы работы реактора идеального смешения с инертным внутренним телом»* для решения поставленной задачи использовалась математическая модель в приближении объемного реагирования горючей газовой смеси (без учета неравномерного распределения ее физико-химических и температурных параметров по пространственной координате реактора). Модель включает следующие уравнения: баланса тепла для реакционной смеси и инертного внутреннего тела, баланса массы горючей компоненты.

Проведено подробное аналитическое исследование стационарных состояний реагирующей системы, для которых построены фазовые плоскости в координатах «температура – полнота превращения» и параметрические диаграммы, отражающие различные сценарии протекания химического взаимодействия в реакторе идеального смешения. Определены шесть областей возможных режимов работы реактора: низкотемпературного устойчивого СС (стационарного состояния), высокотемпературного устойчивого СС, колебательного, а также три их суперпозиции.

С применением разностной схемы Эйлера проведены численные расчеты динамики температуры и глубины химического превращения в зависимости от определяющих процесс безразмерных параметров в точках, соответствующих различным режимам работы реактора. Показано, что наличие инертного тела повышает вероятность перевода работы реактора в колебательный режим. Установлено хорошее соответствие численных зависимостей данным аналитических оценок.

В третьей главе *«Режимы горения реакционной смеси в проточном реакторе с инертным внутренним телом»* рассматривается математическая модель, включающая уравнения баланса тепла для реакционной газовой смеси в реакторе и в инертном теле, уравнение неразрывности для горючей компоненты с соответствующими начальными и граничными условиями. При записи математической постановки задачи принимаются следующие допущения:

- учитывается неоднородность распределения температуры и концентрации только вдоль оси реактора;
- расход реакционной смеси по поперечному сечению реактора постоянен;

- давление в реакторе не меняется.

В задаче предполагалось, что инертное тело расположено внутри реактора вдоль его оси. Система уравнений решалась численным интегрированием с помощью неявной разностной схемы методом прогонки.

Главу условно можно поделить на две части. В первой (большей по объему) рассматривался проточный реактор, имеющий форму трубы. Исследовались режимы горения метановоздушной смеси с 4 и 6% содержания метана, соответственно, а также смеси пропана с кислородом.

Здесь для вышеперечисленных реакционных смесей теоретические исследования процессов горения в проточном реакторе качественно соответствовали результатам расчетов, проведенных для реактора идеального смешения; в зависимости от определяющих процесс параметров количественно менялся только размер областей, соответствующих тому или иному режиму его работы. В то же время было показано, что в отличие от реактора идеального смешения, в проточном реакторе инертное внутреннее тело стабилизирует процесс горения и приводит к исчезновению на параметрических диаграммах колебательных областей. Также делается вывод, что при наличии горячего внутреннего инертного тела в проточном реакторе возможно инициирование горения бедных метановоздушных смесей, которые в нормальных условиях не зажигаются.

Горение смеси данного типа, только уже в U-образной трубке, подробно исследуется во второй части главы. Для модельных расчетов горелочное устройство представлялось в виде сложенной пополам трубки прямоугольного сечения. Внутренние стенки трубки при их идеальном контакте являлись аналогом инертного тела. Горение реакционной смеси инициировалось предварительно разогретой внутренней стенкой.

Результаты численного расчета позволяют сделать тот же, что и в предыдущем случае, вывод о возможности зажигания горячим инертным внутренним телом бедной метановоздушной смеси (до 2% содержания CH_4). Выявлено, что в зависимости от определяющих параметров, возможна реализация различных режимов горения смесей данного типа в трубке: низкотемпературного, высокотемпературного и колебательного. Показано, что учет теплового расширения уменьшает максимальную температуру реакционной смеси и период колебаний ее температуры и фронта пламени.

В четвертой главе *«Моделирование горения реакционноспособной смеси в химическом реакторе в двухмерной осесимметричной постановке задачи»* рассматривается проточный реактор, имеющий форму цилиндрической трубки, инертное тело расположено вдоль его оси. Учитывается неоднородность распределения параметров по радиусу поперечного сечения и оси реактора. В математической модели сделаны следующие допущения:

- изменения температуры и концентрации газовой смеси по сечению реактора происходят только за счет диффузии;
- расход массы через реактор и давление в нем постоянны;
- режим горения ламинарный, не учитывается пограничный слой вблизи

боковой поверхности реактора.

Математическая модель включает следующие уравнения: теплопроводности для горючей смеси и инертного тела, неразрывности для горючей смеси с соответствующими граничными и начальными условиями. Задача решалась численно с использованием метода переменных направлений.

В первой части главы проведены численные расчеты, которые показали, что имеется оптимальный диапазон значений радиуса поперечного сечения реактора, в котором возможно установление высокотемпературного стационарного режима его работы. Причем, верхнее значение радиуса существует только в случае зажигания реакционной смеси инертным внутренним телом.

Во второй части главы рассмотрена задача о диффузионном горении метана в потоке окислителя при отдельной подаче газов в реакционную трубку. Полагалось, что коэффициенты диффузии горючего и окислителя равны между собой. Численно определен диапазон значений параметра скорости потока, при которых возможна реализация колебательного режима работы реактора.

В заключении сформулированы основные выводы.

Новизна выполненного исследования заключается в математическом описании процессов горения газовой смеси в реакторе с инертной внутренней вставкой. Новые результаты представляют:

- построена математическая модель горения газовой смеси в химическом реакторе с инертной внутренней вставкой. Определены области режимов работы реактора в зависимости от определяющих процесс параметров. Выявлено, что наличие инертной вставки в реакторе идеального смешения способствует возникновению колебательных режимов его работы, а в проточном реакторе, наоборот, приводит к стабилизации горения газовой смеси;
- показана возможность инициирования горения бедной метано-воздушной смеси в U-образной трубке с предварительно разогретой инертной внутренней стенкой. В данном типе реакторов в зависимости от определяющих параметров существует вероятность возникновения высоко-, низкотемпературного либо колебательного режимов его работы;
- в двухмерной осесимметричной постановке решена задача горения реакционной газовой смеси в цилиндрическом реакторе с инертной внутренней вставкой. С помощью проведенных расчетов установлен диапазон значений радиуса горелочного устройства, в котором существует наибольшая вероятность установления высокотемпературного стационарного режима горения. Показано, что в случае диффузионного горения метана в воздухе существует возможность организации колебательных режимов работы цилиндрического реактора.

Обоснованность и достоверность полученных результатов подтверждаются:

- корректностью постановок задач;
- исследованием достоверности и точности численного интегрирования задач;
- хорошими результатами тестирования расчетных программ.

Основные результаты работы обсуждались на различных конференциях и представлены в 11 печатных работах, 3 из которых входят в Перечень ВАК.

Значимость диссертационного исследования для науки и практики заключается в разработанных математических моделях и пакетах программ, которые могут быть использованы для решения задач горения в химических реакторах, а также при проектировании реакторов.

Подтверждением **практической значимости** диссертации является ее выполнение в соответствии с проектами в рамках 1 гранта РФФИ и 3 НИР.

Автореферат соответствует основному содержанию диссертации.

По рассматриваемой диссертационной работе имеются **замечания и пожелания**.

1. В оригинальной части диссертации не говорится о том, как зависела энергоэффективность исследуемых в ней химических процессов от режима работы реакторов.
2. В диссертации нет обоснования того, почему в качестве объекта исследования выбрана метановоздушная смесь.
3. Часть обзора, посвященная фильтрационному горению, плохо связана с основной темой диссертации.
4. Неясно, почему автор при исследовании горения газов в реакторе идеального смешения (2 глава) ограничился аналитическим анализом только стационарных состояний процесса, а не попытался, с соответствующими приближениями, аналитически описать его динамику. Это было бы полезно в практических целях, например, для оценки с использованием экспериментальных результатов кинетических констант.
5. В гл.3 на стр. 66 в постановке задачи сделано допущение, что радиус инертного металлического стержня, расположенного внутри цилиндрического реактора, намного меньше радиуса сечения последнего. В таком приближении следует ожидать, что инертное тело практически не будет оказывать влияние на ход процесса из-за малости величины параметра теплообмена между реакционной смесью и стержнем.
6. Хотелось бы в работе увидеть более полное обсуждение и сопоставление с экспериментом полученных теоретических зависимостей.

Заключение

Высказанные замечания не влияют на общую высокую оценку работы диссертанта, выполнившего актуальное и интересное исследование. Диссертационная работа Моисеевой К. М. является законченным научным исследованием, актуальным для современной теплофизики и теоретической

теплотехники.

Характеризуя в целом исследование, проведенное в диссертации Моисеевой Ксении Михайловны, следует констатировать, что выполнен завершённый цикл работ по математическому моделированию процессов горения газов в химическом реакторе с инертной внутренней вставкой. Оригинальность методических приемов, разработка и реализация программ расчета и всесторонний анализ результатов определяют высокий научный уровень работы, а выбор конкретных объектов для исследования – ее практическую ценность. Изложение работы понятное. По каждой главе диссертации написаны четкие выводы, итог работы подведен в заключении.

Диссертационная работа отвечает всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям ВАК России, а ее автор Моисеева Ксения Михайловна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Официальный оппонент

Доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник отдела
структурной макрокинетики федерального
государственного учреждения науки
Томский научный центр СО РАН
634021, г. Томск, пр. Академический, 10/3.
(3822) 492-782
ovlap@mail.ru

Лапшин Олег Валентинович

15.09.2014

Подпись официального оппонента
заверяю

руководитель ОСМ ТНЦ СО РАН



Максимов Ю. М.