

ОТЗЫВ

официального оппонента Савенковой Надежды Петровны
на диссертационную работу Песковой Елизаветы Евгеньевны
«Моделирование химически реагирующих потоков с использованием
вычислительных алгоритмов высокого порядка точности»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 05.13.18 – Математическое
моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертационная работа Песковой Елизаветы Евгеньевны посвящена построению вычислительного алгоритма повышенного порядка точности для исследования течения многокомпонентного реагирующего газа с учетом процессов вязкости, диффузии, теплопроводности и химических реакций. Вследствие того, что положения, выносимые на защиту, имеют практическое применение в нефтехимической промышленности, а именно, при конструировании технологических установок и исследовании химических процессов, актуальность диссертационной работы не вызывает сомнений. В исследовании проведено сравнение полученных результатов численного моделирования с экспериментальными данными, что подтверждает достоверность разработанного алгоритма и программного комплекса.

Структура и содержание работы.

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка использованных источников, изложенных на 95 страницах. Список литературы содержит 118 наименований.

Во введении обоснована актуальность выбранной темы исследования, сформулированы цели и задачи, представлены научная новизна, практическая значимость, дана общая характеристика диссертационной работы.

В первой главе приведено подробное описание математической модели течения многокомпонентного реагирующего газа. Математическая модель представляет собой уравнения Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха. Приведен численный алгоритм повышенного порядка точности для представленной математической модели, описаны используемые схемы для расчета конвективных, диффузионных членов, а

также уравнений химической кинетики. Проведены численные расчеты для задачи о течении газа в замкнутом химическом реакторе на примере пиролиза этана. Представлены и проанализированы результаты вычислительного эксперимента.

Во второй главе приведено описание комплекса программ, реализующего предложенный численный алгоритм и предназначенного для моделирования течения многокомпонентного реагирующего газа на прямоугольной сетке. Приводится описание параллельного вычислительного алгоритма на основе принципов геометрического параллелизма, описаны схемы межпроцессорного взаимодействия. Рассказано об основных модулях программного комплекса. Показана взаимосвязь программного комплекса с пакетом ParaView для визуализации полученных численных данных. Проведен анализ эффективности построенного параллельного алгоритма на примере разработанного программного комплекса для моделирования течения газа в проточном химическом реакторе.

В третьей главе решена практическая задача о течении газа в проточном химическом реакторе, предназначенном для термического пиролиза углеводородов за счет постоянного внешнего обогрева стенок. Представлены результаты численного моделирования: распределение массовой доли основных компонент смеси, температура, плотность смеси, направления вектора скорости в продольном сечении химического реактора, давление в области. Проанализирована динамика процесса. Проведено сравнение по конверсии этана результатов численного эксперимента и экспериментальных данных, получено хорошее соответствие.

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы.

Научная новизна проведенных исследований и полученных результатов заключается в разработке алгоритма повышенного порядка точности и пакета программ для проведения математического моделирования динамики многокомпонентного реагирующего газа с учетом процессов вязкости, диффузии, теплопроводности и химических реакций.

Автором построен алгоритм повышенного порядка точности для

решения уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха, на основе которого разработан параллельный вычислительный алгоритм для ускорения расчетов, создан программный продукт для нахождения газодинамических параметров и массовых долей компонент реагирующей смеси на многопроцессорной вычислительной технике.

Проведено исследование течения многокомпонентного реагирующего газа в проточном химическом реакторе с внешним обогревом реакционной зоны на примере термического разложения этана. Проанализирована динамика процесса, проведено сравнение экспериментальных данных и данных, полученных в ходе вычислительного эксперимента. Сделан вывод о высокой достоверности результатов моделирования.

Практическая значимость результатов исследования определяется созданием пакета программ для проведения исследования динамики многокомпонентного газа с учетом химических реакций. Представленный программный продукт может быть применен для решения широкого класса задач химической промышленности, в которых исследуются течения дозвукового газового потока. А именно, возможно изучение влияния начальных и граничных условий на протекание химических процессов, а, следовательно, получение рекомендаций для разработки химико-технологических установок.

Достоверность основных научных положений обеспечена строгостью используемого математического аппарата и подтверждается сравнением результатов численного моделирования с известными экспериментальными данными.

Соответствие диссертации и автореферата паспорту научной специальности. Диссертация и автореферат соответствуют паспорту научной специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» по следующим пунктам:

п. 4. «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента».

п. 5. «Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента».

п. 8. «Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования».

Основные результаты диссертации представлены в 14 публикациях, 4 из них входят в список, рекомендованный ВАК РФ, получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Работа прошла апробацию на научных конференциях различного уровня.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

Диссертационная работа содержит ряд недостатков. К ним можно отнести следующие:

1. Во введении диссертационного исследования указано, что «чтобы понять эффективность введения лазерного излучения, стоит задача проанализировать процесс пиролиза этана, протекающий только за счет внешнего нагрева реакционной зоны». Исследование бы представляло больший интерес, если бы при проведении математического моделирования было возможно учитывать эффекты лазерного излучения. Отсюда, как мне кажется, в заключении следовало отметить не только результаты работы, но и нерешенные задачи, связанные с введением лазерного излучения, как перспективного направления в технологии переработки углеводородов.
2. В работе не указано проводится ли итерационная процедура внутри шага по времени для согласования решений, получаемых из решения уравнений химической кинетики (1.25) и уравнений переноса (1.26).
3. В главе 3 описана решаемая практическая задача с определенными граничными условиями, аппроксимация которых не обсуждается. Поэтому возникает неясность относительно суммарной аппроксимации схемы. Опущены такие интересные детали проведения численного эксперимента, как число расчетных узлов по каждому направлению, физическое время расчета, характеристики ЭВМ, на которой проводилось численное моделирование.

Общее заключение.

Отмеченные недостатки не снижают значимости полученных результатов. Диссертация Песковой Елизаветы Евгеньевны является законченной научно-исследовательской работой. Полученные результаты достоверны, являются новыми, выводы и заключения обоснованы.

Диссертационная работа отвечает требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 29.09.2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Пескова Елизавета Евгеньевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент:

ведущий научный сотрудник лаборатории ММФ
факультета ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова
доктор физ.-мат. наук

Савенкова Н.П.

Шифр специальности, по которой защищена докторская диссертация Савенковой Н.П. – 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

119991 ГСП-1, г. Москва, Ленинские горы,
МГУ имени М.В. Ломоносова, 2-й учебный корпус,
факультет ВМК
Телефон: 84959395255, e-mail: nsavenkova@cs.msu.su

Подпись Н.П. Савенковой заверяю

Зам. декана факультета ВМК МГУ по научной работе,
профессор Ложкин С.А.

