

«УТВЕРЖДАЮ»

Заместитель директора Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»



д.х.н., профессор РАН

 Н.Ю. Адонин

«03» 02 2025 г.

ОТЗЫВ

Отдела гетерогенного катализа Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»

на диссертацию Песковой Елизаветы Евгеньевны «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии» представленную на соискание степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2. - Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертация «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии» на соискание степени доктора физико-математических наук подготовлена Песковой Елизаветой Евгеньевной на кафедре прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики Мордовского государственного университета им. Н. П. Огарёва и при работе по совместительству в Отделе гетерогенного катализа Института катализа СО РАН, выполняя грант РФФИ № 21-19-00429 (руководитель – ведущий научный сотрудник Снытников В.Н.) с 2021 по 2023 годы.

Семинар Отдела гетерогенного катализа ИК СО РАН рассмотрел диссертацию Песковой Е.Е. с участием научного руководителя ИК СО РАН академика Пармона В.Н., 9-и докторов наук, 8-и кандидатов наук, включая соавторов статей соискателя. По итогам обсуждения диссертации «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии», представленной на соискание степени доктора физико-математических наук

по специальности 1.2.2. - Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, принят следующий отзыв.

Актуальность темы исследования.

Основным содержанием диссертации является математическое моделирование неравновесных физико-химических процессов во внутренних течениях метана при воздействии ИК-лазерного излучения. Диссертация направлена на получение фундаментальных знаний о нестационарных дозвуковых потоках газа с радикально-цепными реакциями. Совокупность этих знаний необходима для создания ресурсосберегающих и экологически чистых технологий получения ценных продуктов из природного газа. В диссертации изучается лазерная каталитическая конверсия метана в двухфазном газопылевом потоке с каталитически активными наночастицами. Данное направление представляется одним из самых перспективных подходов к решению проблемы квалифицированной переработки метана в ценные продукты. Рациональное использование природного газа являются приоритетным направлением научно-технологического развития газохимии и водородных технологий в Российской Федерации. Тем самым, диссертация Песковой Е.Е. является актуальным научным исследованием.

Целью диссертационного исследования являлись: 1. разработка двухфазных численных моделей для задач лазерной термохимии газа, описывающих дозвуковые газопылевые потоки с поглощением энергии от стенок области и лазерного излучения; 2. создание экономичных, надежных численных методов для реализации этих моделей, позволяющих повысить точность решения задач и снизить требования к вычислительным ресурсам; 3. изучение на основе построенных численных моделей пиролиза легких алканов и лазерной конверсии метана.

Достоверность результатов, вошедших в диссертацию Песковой Е.Е., обеспечивается методами вычислительной математики, хорошим согласованием данных вычислительных экспериментов с аналитическими решениями для частных задач, с экспериментальными данными и расчетами других исследователей для течений без лазерного излучения и каталитических наночастиц.

Научная новизна результатов. Впервые разработана математическая модель, в которой дополнительно учитывается многотемпературность двухфазной среды из газа и наночастиц различного диаметра, гетерогенно-гомогенные реакции, теплообмен со стенками, поглощение лазерного излучения, неравновесные содержания радикалов и атомов водорода по объёму. Создан комплекс программ открытой архитектуры для моделирования дозвуковых газопылевых химически активных сред с лазерным излучением и с

возможностью включения больших жестких схем химических радикальных реакций цепного типа. Впервые проведено многопараметрическое изучение неокислительной конверсии метана под воздействием лазерного излучения в присутствии каталитических наночастиц. Найдены условия конверсии метана выше 60 % с образованием водорода и ценных углеводородов. Впервые исследован теплообмен стенки круглой трубы со внутренним газопылевым потоком при наличии эндотермического химического процесса и лазерного излучения. Теоретически показана перспективность использования CO_2 - лазерного излучения для управления радикальными цепными реакциями на примере конверсии метана. Разработана цифровая модель проектируемого лабораторного реактора для неокислительной лазерной конверсии метана в водород, этилен, ацетилен и ароматические соединения при умеренных температурах среды. Расчетная степень конверсии метана в определенной области параметров превышает 65 %.

Практическая значимость результатов диссертации состоит в их направленности на решение крупной научно-прикладной задачи — неокислительной конверсии метана и пиролиза легких алканов. Результаты, полученные в ходе диссертационного исследования, используются для создания лабораторной экспериментальной установки и планирования экспериментов лазерной конверсии метана в Институте катализа СО РАН.

Положения, выносимые на защиту, опубликованы в 16 статьях в рецензируемых научных изданиях. Они обсуждались на семинарах ИК СО РАН и научных конференциях и не вызвали возражений у участников семинара.

Личный вклад соискателя

Диссертация Песковой Е.Е. является итогом ее успешной работы в Мордовском государственном университете им. Н. П. Огарёва, взаимодействия с Институтом прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН и 9-ти летнего сотрудничества соискателя с сотрудниками Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН. Результаты, составляющие основное содержание диссертации и выносимые на защиту, получены Песковой Е.Е. Соавторы совместных публикаций в.н.с, к.ф.-м.н Снытников В.Н., н.с., к.ф.-м.н Лашина Е.А., с.н.с, к.ф.-м.н Стояновская О.П. в своих выступлениях на семинаре Отдела гетерогенного катализа высказали свое согласие с личным вкладом соискателя в статьи и диссертацию.

Участники семинара обратили внимание, в частности, на изучаемую неравновесность среды с несколькими температурами у твердой фазы (академик Пармон В.Н.), возможность расчетов течений в использованной модели не только в лабораторных установках, но и в укрупненных опытно-демонстрационных реакторах. Участники семинара обсуждали вопрос о возможном влиянии азимутальной симметрии в математической и численной модели

диссертанта на значения конверсии метана и другие выходные параметры вычислительных экспериментов.

По итогам обсуждения на семинаре было сделано заключение, что результаты, полученные в диссертации Песковой Е.Е., вносят существенный вклад в решение проблемы математического моделирования процессов лазерной термохимии применительно к разработке новых технологий переработки природного газа в водород и ценные углеводороды. Было отмечено, что проведенные соискателем исследования обладают возможностью дальнейшего расширения на другие области лазерной термохимии, в том числе на иные химические соединения, процессы и технологии.

Семинар Отдела гетерогенного катализа ИК СО РАН пришел к выводу, что представленная диссертационная работа является законченным исследованием по численному решению нестационарных задач дозвуковых течений двухфазной среды с химическими реакциями и излучением в приложении к каталитической газохимии метана. Выполненная работа удовлетворяет квалификационным требованиям, предъявляемым ВАК РФ к докторским диссертациям, в том числе соответствует требованиям п.9 "Положения о присуждении ученых степеней", а ее автор Пескова Е.Е. заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

На семинаре присутствовало 26 человек.

Результаты голосования: «за» – 26 человек, «против» – нет, «воздержалось» – нет, протокол № 8/1 от 21 августа 2024 г.

Отзыв на диссертацию Песковой Е.Е. содержит 4 страницы.

Заведующий Отделом
гетерогенного катализа
ИК СО РАН, д.х.н.

Снытников Павел Валерьевич

Секретарь семинара
Отдела гетерогенного
катализа ИК СО РАН

Попова Татьяна Константиновна