

ОТЗЫВ

официального оппонента д.ф.-м.н. Сергея Григорьевича Черного на диссертационную работу ПЕСКОВОЙ Елизаветы Евгеньевны «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2. – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертация Песковой Елизаветы Евгеньевны «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии» соответствует специальности 1.2.2. – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, является завершенным научным исследованием, имеет научную ценность и практическую значимость.

Актуальность и новизна выполненных исследований. Исследование особенностей конверсии метана и пиролиза этана в водород и ценные углеводороды, а также изучение способов и подходов осуществления этих процессов несомненно является актуальной теоретической и прикладной задачей современной энергетики и природопользования. На сегодня неокислительная конверсия метана становится одной из самых востребованных. Она не производит побочных продуктов окисления углеводородов – монооксида и диоксида углерода. Общей проблемой для всех неокислительных способов ведения процесса это образование и утилизация кокса. Для метана возможно осуществление конверсии либо при температуре выше 1200°C , либо – при пониженных температурах, но при использовании катализатора с дополнительным вводом энергии. Среди процессов без участия кислорода лазерная каталитическая конверсия является самой перспективной в силу сниженных энергетических затрат и улучшенной экологии. Но и у лазерной конверсии имеются проблемы, решение которых предстоит найти. В теоретическом плане актуально создание достоверных математических моделей процесса лазерной каталитической конверсии, позволяющих развить фундаментальные физико-химические основы этого процесса. В связи с этим, изучаемая в диссертации современными методами нелинейная динамика двухфазной среды в широком диапазоне режимных и геометрических параметров и впервые полученные функциональные зависимости будут играть важную роль в понимании физико-химических процессов, лежащих в основе лазерной конверсии метана. Ранее обобщение и систематизация полученных при математическом моделировании результатов для лазерной термохимии в мире не проводились.

Прикладная значимость исследований обусловлена необходимостью выявления в проектируемых установках диапазона рабочих параметров и, как следствие, увеличение их производительности по выходу продуктов, срока эксплуатации и достижения максимальной эффективности по потреблению тепло- и электроэнергии.

Таким образом, можно заключить, что диссертационная работа Песковой Е.Е. является чрезвычайно актуальной как с фундаментальной точки зрения, так и с прикладной, поскольку посвящена систематизации полученных при математическом моделировании результатов для лазерной термохимии в широком диапазоне параметров, исследованию процесса неокислительной каталитической конверсии метана в присутствии лазерного излучения, установлению корректных характеристик для проведения экспериментов в лабораторных реакторах. Использование этих знаний позволит значительно сократить сроки проектирования перспективных технологий и добиться высокой эффективности использования энергии.

Научные результаты и их новизна. В диссертационной работе Песковой Е.Е. можно выделить следующие научные результаты.

1. Математическая модель потока газопылевой среды для лазерной каталитической конверсии метана. Впервые позволяет одновременно учитывать: двухфазную газопылевую среду; многокомпонентность и многотемпературность среды; ОДУ для температуры каталитических наночастиц; ОДУ химической кинетики; эндотермические эффекты радикально-цепных реакций; диффузию легких метильных радикалов CH_3 и атомов водорода H , которые инициируют конверсию метана; поглощение лазерного излучения этиленом и частицами.

2. Вычислительный алгоритм для описания нестационарных процессов лазерной термохимии реагирующего газа и каталитических наночастиц с использованием метода расщепления по физическим процессам, прошедший валидацию и верификацию средствами вычислительной математики, сравнением с экспериментальными и аналитическими решениями.
3. Программный комплекс с применением технологии параллельных вычислений для решения задач течения многокомпонентных газопылевых химически активных сред с лазерным излучением.
4. Результаты моделирования газозной конверсии метана в поле лазерного излучения, в которых установлено: для получения конверсии метана около 50% температура стенок должна быть не ниже 1370 К; дополнительный ввод энергии посредством лазерного излучения мощности 32-64 Вт позволяет увеличить конверсию в 1.5-2 раза; при наличии в исходной смеси этилена 2-2.5%, поглощающего лазерное излучение, можно получить конверсию метана 30-45% при температуре стенок 1100-1200 К.
5. Результаты моделирования конверсии метана в присутствии каталитических наночастиц, в которых определено: конверсия метана может осуществляться при энергии активации метана на наночастицах ниже 170 кДж/моль, характерном диаметре частиц около 10 нм, их концентрации порядка 10^{19} м^{-3} , температуре стенок не ниже 1073 К; при увеличении скорости газопылевого потока с эндотермическими реакциями в трубе круглого сечения энергопотребление от стенок трубы растёт.
6. Результаты моделирования лазерной конверсии метана в присутствии каталитических наночастиц в трубе круглого сечения, в которых установлено: воздействие CO₂ лазерного излучения может увеличить каталитическую конверсию метана в 1.5 раза; при мощности CO₂ лазерного излучения выше 30 Вт конверсия метана в трубе диаметра 20 мм составляет более 65% с преимущественным образованием этилена 30%, а также водорода 9%, ароматических соединений 13% и ацетилена 3%.
7. Разработана цифровая модель экспериментального лабораторного реактора с конверсией метана выше 65%, ориентированная на получение ароматических соединений, водорода, ацетилена, а также небольшие выходы этилена.

Степень обоснованности и достоверности каждого научного положения, выводов и заключений соискателя, сформулированных в диссертации. Обоснованность перечисленных выше научных результатов не вызывает сомнений. Достоверность и обоснованность научных положений и теоретических выводов работы обеспечиваются использованием в работе, прошедшей верификацию, валидацию и тщательную адаптацию, настройку и калибровку на множестве тестовых задач, показавшие количественное и качественное соответствие результатов моделирования общеизвестным данным. Выводы, сформулированные в Заключении диссертации, базируются на полученных соискателем результатах исследований и в основном обоснованы. Высокая научная квалификация Песковой Е.Е. позволила создать инструментарий, способный детально исследовать внутренние течения газопылевых сред, аналогов которого в мире не существует.

Значимость для науки и практики выводов и рекомендаций диссертанта. Результаты исследований могут использоваться для решения задач и при проектировании перспективных установок. Часть представленных в диссертационной работе научных исследований и полученных при их проведении результатов численного моделирования были обнародованы Песковой Е.Е. в научных публикациях, как следствие работы по совместительству в Отделе гетерогенного катализа Института катализа СО РАН при выполнении с 2021 по 2023 годы гранта РФФИ № 21-19-00429 под руководством ведущего научного сотрудника к.ф.-м.н. Снытникова В.Н.

Соответствие автореферата содержанию диссертации. Автореферат диссертации соответствует её содержанию.

Подтверждение опубликования основных результатов диссертации в научной печати. Основные результаты диссертации доложены на российских и зарубежных конференциях и опубликованы в 16 печатных работах, которые соответствуют теме диссертации и с

достаточной полнотой отражают содержание, выводы и заключение диссертации. Наиболее важные журнальные статьи из перечня ВАК, в которых опубликованы результаты, представленные в диссертации

- Пескова Е.Е. Математическое моделирование нестационарных задач лазерной термохимии метана в присутствии каталитических наночастиц // Доклады Российской академии наук. Математика, информатика, процессы управления. 2024. Т. 517, № 1. С. 79–84.
- Peskova E.E., Snytnikov V.N. The influence of laser radiation on the laminar flow of a chemically active gas-dust medium in a narrow round tube // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2024.
- Пескова Е.Е., Язовцева О.С. Исследование применения явно-итерационной схемы к моделированию дозвуковых реагирующих газовых потоков // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2024. Т. 64, № 2. С. 350–363.
- Пескова Е.Е., Снытников В.Н., Жалнин Р.В. Вычислительный алгоритм для изучения внутренних ламинарных потоков многокомпонентного газа с разномасштабными химическими процессами // Компьютерные исследования и моделирование. 2023. Т.15, №5. С. 1169–1187.
- Снытников В.Н., Пескова Е.Е., Стояновская О.П. Модель двухтемпературной среды газ-твердые наночастицы с лазерным пиролизом метана // Математическое моделирование. 2023. Т. 35, № 4. С. 24–50.
- Жалнин Р.В, Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф. Моделирование течения многокомпонентного реагирующего газа с использованием алгоритмов высокого порядка точности // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2017. Т. 27, № 4. С. 608–617.

Недостатки по содержанию и оформлению диссертации. По содержанию диссертации имеются следующие замечания.

1. На стр. 9 диссертации утверждается, что «имеющиеся модели дозвуковых реагирующих течений не позволяют наиболее полно описывать особенности протекающих при ЛКМ процессов, и требуются новые более совершенные подходы». Поэтому «актуальными являются построение, обоснование и валидация новых математических моделей, более полно описывающих дозвуковые газопылевые потоки» (стр. 8 диссертации). А на стр. 51 без какого-либо обоснования существенно ограничивается полнота используемой в диссертации модели рассмотрением «физически содержательных задач в пространственно двумерных и трехмерных осесимметричных областях». Потому, что «значительная экономия вычислительных ресурсов может быть получена при отказе от пространственно трехмерной расчетной области [41]». Ссылка на источник [41] не обосновывает данное допущение. То есть, в диссертации ставятся и решаются только двумерные задачи. Либо плоские, как в [41], либо осесимметричные. Но для обоснования такого упрощения требуется показать, что учет трехмерности задачи не влияет на результат моделирования.
2. Автор на многих страницах диссертации (20, 61, 79, 80, 81) характеризует численные методы, как «численные методы повышенного порядка точности». Но при численном решении уравнений в частных производных не существует абстрактного понятия «повышенный порядок точности». По крайней мере следует различать порядки точности (а более правильно говорить «погрешность аппроксимации» или «порядок сходимости») по времени и по пространственным переменным.
3. В диссертации вычислительный алгоритм строится на основе метода расщепления по физическим процессам (раздел 2.2). Но известно, что при использовании метода расщепления получается решение исходных уравнений с внесенными в них погрешностями расщепления. Поэтому необходим анализ уравнений, решение которых фактически находится методом расщепления. В диссертации такое исследование отсутствует. В связи с этим на стр. 66 теоретически не обосновано утверждение «такой

принцип построения алгоритма (расщепление на конвективный и диссипативный дробные шаги) позволяет вести расчет с общим шагом по времени, превышающим диффузионные ограничения».

4. На стр. 22 диссертации в разделе «Практическая значимость» утверждается что результаты диссертационной работы (модели, алгоритмы и программы) будут применены к разработке новых перспективных технологий переработки природного газа в водород и ценные углеводороды с получением высокой добавочной стоимости. Однако, добавочную стоимость, обусловленную высокой стоимостью получаемых ценных углеводородов по отношению к стоимости метана, уменьшат затраты на ЛКМ. А величина затрат на ЛКМ в диссертации не обсуждается. Поэтому практическая значимость построенной математической модели, сформулированная на стр. 22, не обоснована.
5. В оформлении диссертации наблюдается некоторая небрежность:
 - отсутствуют выводы по главам, что при значительном объеме второстепенной технической информации затрудняет восприятие общей направленности повествования;
 - плохое качество представления многих рисунков, в частности, из-за слабо различимых на них шкал осей: 2.3, 2.4, 3.1, 3.2, 3.25, 3.26, 3.3.

Соответствие работы требованиям, предъявляемым к диссертациям. Указанные замечания не умаляют достоинств выполненного Е.Е. Песковой исследования, имеющего существенное значение для фундаментальных физико-химических основ процесса лазерной каталитической конверсии и области создания достоверных математических моделей и численных методов их исследования. Особенно впечатляет системность, проявленная Е.Е. Песковой при формулировке задач, решения которых были необходимы для достижения поставленной цели. Проанализированы и продуманы все детали постановок и взаимосвязь между ними. Представленная диссертация является законченным научным исследованием, и удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (ред. от 26.09.2022). Считаю, что диссертация Песковой Елизаветы Евгеньевны отвечает требованиям, предъявляемым ВАК России к докторским диссертациям, а сам автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Отзыв обсужден на заседании семинара лаборатории суперкомпьютерных вычислений и искусственного интеллекта в энергетических технологиях ИТ им. С.С. Кутателадзе СО РАН.

Главный научный сотрудник
Института теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН,
доктор физико-математических наук,
профессор

Черный Сергей Григорьевич

630090 Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 1,
ФГБУН Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе
Сибирского отделения Российской академии наук,
Тел. +7 (383) 330-70-50
E-mail: director@itp.nsc.ru
http://www.itp.nsc.ru

Подпись главного научного сотрудника
ИТ им. С.С. Кутателадзе СО РАН Черного С.А. удостоверяю
Ученый секретарь ИТ им. С.С. Кутателадзе СО РАН
к.ф.-м.н.



М.С. Макаров
10.02.2025 г.