

## Отзыв

официального оппонента д.ф.-м.н. Смирнова Николая Николаевича на диссертационную работу Песковой Елизаветы Евгеньевны «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2. – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

### **Актуальность темы диссертации**

Диссертационная работа Песковой Елизаветы Евгеньевны содержит описание разработки и программной реализации математического аппарата для решения задач лазерной термохимии. Лазерная термохимия является перспективным направлением современной науки, позволяющим многократно увеличить выход ценных углеводородов при переработке природного газа, что продемонстрировано на примере неокислительной конверсии метана под воздействием лазерного излучения. Это отвечает потребностям рационального природопользования, относящегося к основным направлениям стратегического развития России. Детальное и безопасное исследование столь сложных процессов возможно только с использованием средств математического моделирования. Математическая модель в своей основе имеет модификацию уравнений Навье-Стокса, дополненную источниковыми членами в соответствии с особенностями решаемых задач. Для модели построен вычислительный алгоритм с использованием современных численных методов, реализованный с применением параллельных технологий. Используемый в работе инструментарий позволяет эффективно применять современные компьютерные технологии для проведения многопараметрических расчетов близких к экспериментальным задач.

Таким образом, диссертационное исследование выполнено в русле реализации стратегических направлений развития России, что обуславливает актуальность темы.

### **Структура и содержание работы.**

Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, заключения и приложения, общий объем – 219 страниц.

*Во введении* пояснена актуальность работы, сформулированы цель исследования и задачи, решаемые на пути достижения цели. Здесь же выделены положения, выносимые на защиту, сформулирована научная новизна и значимость работы.

*Первая глава* посвящена разработке математических моделей лазерной термохимии газа в присутствии каталитических наночастиц. В основе модели лежит система уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха, хорошо

зарекомендовавшая себя при моделировании дозвуковых потоков. Модель обобщена на случай двухфазной среды – газопылевого химически активного течения, где каталитические наночастицы являются активными центрами химических реакций. Учет энергии лазерного излучения осуществлен за счет добавления обыкновенного дифференциального уравнения вдоль оси реактора, отвечающего интенсивности лазерного луча, а также за счет добавления источникового члена в уравнение энергии.

*Вторая глава* диссертации содержит описание вычислительного алгоритма для полной разработанной модели, а также обзор численных методов, используемых при построении алгоритма. Поскольку математическая модель, построенная в первой главе, является разномасштабной, в основе алгоритма лежит принцип расщепления по физическим процессам, который позволяет разбить полную систему уравнений на отдельные процессы с соизмеримыми характерными временами и интегрировать их последовательно, начиная с вложения от самого малого шага по времени. Область интегрирования разбита на равномерные прямоугольники, что обусловлено геометрией решаемых задач. Первым этапом интегрирования является решение задачи Коши для уравнения интенсивности лазерного излучения, затем решается уравнение для температуры каталитических наночастиц. Решение системы уравнений химической кинетики также выделено в отдельный шаг в силу ее жесткости. Далее интегрируются газодинамические уравнения без учета динамической составляющей давления. Динамическая составляющая давления находится из решения уравнения Пуассона и на ее основе проводится коррекция вектора скорости.

Построенный алгоритм реализован с использованием технологии MPI на основе принципов геометрического параллелизма. В главе приведен анализ эффективности алгоритма для различного числа пространственных ячеек и различного количества используемых процессоров.

*Третья глава* диссертационной работы посвящена верификации и валидации разработанной модели и построенного вычислительного алгоритма. Для этого проведен анализ быстродействия численных схем для разрешения отдельных частей полной исследуемой системы. Также проведено сравнение решений с имеющимися экспериментальными данными для процесса пиролиза легких алканов без лазерного излучения и с имеющимися аналитическими решениями для температуры и скорости потока.

*Четвертая глава* содержит результаты исследования химически активных газовых течений под воздействием лазерного излучения: пиролиз этана и конверсия метана. Проанализированы течения при различных условиях – различная мощность лазерного излучения, различные температуры стенок и т.д. Для каждого случая проанализированы особенности процессов.

*Пятая глава* включает исследование двухфазных газопылевых течений под воздействием лазерного излучения. Численно проиллюстрированы два режима для исследуемых течений – одно- и двухтемпературный. Приведены условия

возникновения и установления режимов. В главе приведен детальный анализ процессов теплообмена в трубах различного диаметра при различной мощности лазерного излучения. Получены рекомендации для процесса неокислительной конверсии метана в трубчатом реакторе при различных условиях проведения экспериментов, существенно повышающие конверсию.

*Шестая глава* посвящена разработке цифровой модели реактора лазерной конверсии метана, в основу которой положены созданные численные модели. Преимуществом представленного цифрового реактора является высокая степень конверсии метана (превышающая 65%), при этом ее первичными продуктами являются промышленно значимые ароматические соединения, водород и ценные углеводороды. Разработанная цифровая модель послужила основой для изготовления эскиза лабораторного реактора в Институте катализа им. Г.К. Борескова СО РАН (г. Новосибирск).

*Заключение* содержит описание результатов работы и перспективы дальнейшего развития направления математического моделирования задач лазерной термохимии.

*Приложение* включает в себя описание химических реакций, кинетических и термодинамических параметров.

### **Научная новизна результатов работы**

1. Новая математическая модель процесса лазерной термохимии – дозвукового двухфазного химически активного газопылевого течения в присутствии лазерного излучения, учитывающая гетерогенный характер реакций и неизотермичность среды.

2. Новый вычислительный алгоритм для разработанной модели на основе принципа расщепления по физическим процессам с использованием актуальных численных методов.

3. Комплекс программ, учитывающий многокомпонентный характер течения, а также изменения термодинамических характеристик среды и расширенную кинетическую схему процесса, содержащую более 30 стадий.

4. Многокритериальное исследование неокислительной конверсии метана на основе разработанного комплекса программ, выявившее необходимые условия повышения производительности процесса.

5. Цифровая модель реактора неокислительной конверсии метана.

### **Достоверность и обоснованность полученных результатов**

Результаты, выносимые на защиту, верифицированы путем сравнения расчетных данных с имеющимися частными аналитическими решениями и известными результатами других исследователей для задач без учета лазерного воздействия и каталитических частиц, а также валидированы путем сравнения с имеющимися экспериментальными данными. Результаты неоднократно апробированы на семинарах и научных конференциях, в том числе и в Институте катализа

им. Г.К. Борескова СО РАН (г. Новосибирск), на базе которого спроектирован реактор на основе полученной в работе цифровой модели.

### **Теоретическая значимость**

Теоретическая значимость полученных результатов заключается в

- 1) разработке теоретических основ моделирования задач лазерной термохимии,
- 2) возможности адаптации численного алгоритма под различные многостадийные реакции,
- 3) применении геометрического параллелизма для системы, сочетающей уравнения математической физики и обыкновенные дифференциальные уравнения.

### **Практическая значимость**

Практическая значимость работы заключается в

- 1) исследовании процесса пиролиза легких алканов в присутствии лазерного излучения,
- 2) многокритериальном исследовании сложного многофакторного процесса неокислительной конверсии метана под воздействием лазерного излучения в присутствии каталитических наночастиц,
- 3) результаты работы использованы как основа проектирования установки для лазерной термохимии углеводородов в Институте катализа им. Г.К. Борескова СО РАН.

### **Достоинства диссертационной работы**

- 1) В работе впервые заложены теоретические основы математического моделирования лазерной термохимии в приложении к переработке углеводородов.
- 2) Обширный иллюстративный материал по результатам исследований позволяет в полной мере оценить практическую значимость работы.
- 3) В силу высокой практической значимости разработанный программный комплекс может быть использован как программа-тренажер для студентов как инженерных специальностей, так и студентов естественных направлений.
- 4) Комплексность исследований и широкий охват пунктов паспорта научной специальности.

### **Замечания**

1) В уравнении энергии (1.4) отсутствует частная производная по времени от давления в правой части. При этом отсутствие этого члена специально не оговаривается – приводится ссылка на работу. Только в дальнейшем по ходу чтения и знакомства с основными допущениями становится ясно, что этим членом в уравнении действительно можно пренебречь.

2) Не следует применять один и тот же символ для обозначения различных величин в пределах одного документа. Это вызывает путаницу и даже стресс у

неподготовленного читателя. Так греческая буква «пи» на стр. 29-31 употребляется в смысле разницы давлений, на стр. 37-38 употребляется в смысле мировой константы 3.14.... А вот на стр. 34 употребляется в обоих этих смыслах: в третьей сверху формуле в смысле давления, а в четвертой формуле в смысле мировой константы 3.14.

Приведенные замечания не снижают высокого научного уровня работы, достаточной степени обоснованности, новизны и достоверности основных положений.

### **Заключение**

Диссертационная работа Песковой Е.Е. является законченной научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований внесен существенный вклад в направление математического моделирования процессов лазерной термохимии природного газа в присутствии каталитических наночастиц, которое имеет практическое значение.

Автореферат диссертации правильно отражает содержание, основные результаты и выводы диссертации.

Диссертация «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии» соответствует требованиям п.п. 9, 10 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (постановление Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842) в части, касающейся ученой степени доктора наук, а ее автор Пескова Елизавета Евгеньевна заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2. – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент  
Доктор физико-математических наук,  
Профессор, зам. зав. кафедрой  
Газовой и волновой динамики  
Зав. лабораторией волновых процессов

Н. Н. Смирнов

14.02.25

119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, ауд. 1217  
Тел: +7(495)9393754, e-mail: [gvd.msu@mail.ru](mailto:gvd.msu@mail.ru)

Сведения о Смирнове Николае Николаевиче подтверждаю  
Подпись Смирнова Николая Николаевича удостоверяю  
Декан механико-математического факультета  
«Московского государственного  
университета имени М.В. Ломоносова»  
член-корр. РАН



А.И. Шафаревич