

ОТЗЫВ

официального оппонента Сухинова Александра Ивановича 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

Диссертация посвящена построению численных моделей для задач лазерной термохимии газа в присутствии каталитических наночастиц и их применению для исследования пиролиза легких алканов и конверсии метана. Наиболее очевидным, но не единственным приложением предлагаемых в диссертации моделей является технология лазерной каталитической конверсии метана, представляющая собой новое направление развития газохимии и водородной энергетики. Технология заключается в воздействии лазерным излучением на поток природного газа и каталитических наночастиц, эффективность которого существенно зависит от большого набора технологических параметров, что определяет потребность в использовании аппарата математического моделирования.

Актуальность выбранной в диссертации темы подчеркивает необходимость развития отечественных технологий глубокой переработки природного газа как одного из стратегических видов полезных ископаемых, в том числе его рациональное использование.

Краткий анализ содержания работы

Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы и приложения.

Во введении представлена общая характеристика работы, обоснована актуальность исследований, сформулированы цели и задачи исследования, перечислены выносимые на защиту положения, их практическая и теоретическая значимость, приведен список публикаций по теме диссертации.

В первой главе представлена разработанная автором математическая модель для исследования двухфазных дозвуковых потоков газа и каталитических наночастиц в присутствии лазерного излучения.

Особенностями модели являются многокомпонентность и многотемпературность среды, наличие эндотермических эффектов радикально-цепных реакций. Представлены обоснования использования данной модели для решаемых задач и диапазоны параметров, для которых возможно применение разработанной модели.

Во второй главе предложен вычислительный алгоритм для построенной математической модели. Описан каждый из используемых численных методов, применяемых в алгоритме. Приведены описание разработанного программного комплекса с использованием технологии параллельных вычислений и анализ эффективности параллельного вычислительного алгоритма.

В третьей главе проведена верификация численного алгоритма путем сравнения с экспериментальными данными, аналитическими решениями и демонстрации сеточной сходимости. Показана возможность применения схемы локальных итераций к моделированию дозвуковых реагирующих течений с существенным сокращением расчетного времени.

В четвертой главе решены задачи пиролиза этана и газофазной конверсии метана под воздействием лазерного излучения. Показано, что ввод лазерного излучения интенсифицирует химические реакции посредством повышения температуры в среде.

В пятой главе приведены результаты вычислительных экспериментов по исследованию двухфазных газопылевых потоков в прямой осесимметричной трубе круглого сечения. Проведена серия расчетов для установления влияния на величину конверсии метана энергии активации метана на каталитических наночастицах, температуры стенок трубы, расхода газовой смеси, диаметра каталитических наночастиц, интенсивности лазерного излучения. Исследованы тепловые процессы по длине трубы, показано, что энергия на единицу массы превращенного метана в трубе с излучением расходуется эффективнее.

В шестой главе представлена разработанная на основе расчетов, полученных в пятой главе, цифровая модель реактора, предназначенного для лазерной каталитической конверсии метана. Значение конверсии составило 65% с преимущественным образованием ароматических соединений и водорода.

В заключении сформулированы результаты диссертационной работы

и практические рекомендации, полученные в ходе исследования, а также перспективы дальнейших исследований в тематике работы.

В приложении приведены схемы кинетических реакций и теплофизические характеристики газовых компонент смеси.

Научная новизна результатов и сделанных выводов

Основными положениями диссертации, обладающими научной новизной, являются следующие.

1. Представленная в первой главе диссертации математическая модель химически активного потока газа и каталитических наночастиц, способная учитывать существенно дозвуковой характер течения, многокомпонентность и многотемпературность среды, поглощение лазерного излучения компонентами газа и наночастицами.

2. Описанный во второй главе вычислительный алгоритм решения системы уравнений в рамках предложенной модели для плоских и осесимметричных задач. Сложность построения вычислительного алгоритма связана с наличием процессов с существенно отличающимися (на многие порядки) временами их протекания.

3. Полученное в третьей главе в замкнутом виде (аналитическое) решение уравнения для температуры смеси с многокомпонентным коэффициентом теплопроводности и функцией поглощения энергии в эндотермической реакции. Численное моделирование показало удовлетворительное совпадение расчетных и аналитических решений. Выполнено обоснование применимости построенного алгоритма для решения практических задач пиролиза этана и пропана.

4. Новый программный комплекс для моделирования дозвуковых потоков химически активных сред в задачах лазерной термохимии. В программном комплексе предусмотрена возможность включения различных кинетических схем химических реакций и учет тех или иных процессов (распространение лазерного излучения, каталитических наночастиц и др.).

5. Результаты исследования влияния лазерного излучения на газофазные процессы пиролиза этана и конверсии метана. Показано существенное увеличение выхода ценных углеводородов и водорода на коротких длинах реакторов.

6. Сформулированные автором на основе результатов численного

моделирования условия высокой конверсии метана в присутствии каталитических наночастиц и лазерного излучения. Представленные обоснования эффективности ввода лазерного излучения по сравнению с проведением конверсии посредством обогрева лишь стенок трубы.

7. Предложенная на основе результатов численного моделирования цифровая модель лабораторного реактора обеспечивает конверсию метана в водород и ароматические соединения с показателем не менее 65%.

Теоретическая значимость результатов диссертации

Теоретическая значимость результатов диссертации заключается в разработке и развитии математических моделей и численных алгоритмов для решения задач лазерной термохимии газа в присутствии каталитических наночастиц. Полученные в ходе вычислительных экспериментов результаты теоретические позволяют получать теоретические знания о химически активных средах в условиях значительного энергопоглощения.

Практическая значимость результатов диссертации

Полученные результаты в виде программного комплекса имеют практическое приложение в области газохимии, в частности, могут быть применены для анализа процессов пиролиза легких алканов и конверсии метана и повышению эффективности этих процессов. Результаты диссертационной работы используются для создания лабораторной экспериментальной установки и планирования экспериментов лазерной конверсии метана.

Достоверность и обоснованность полученных результатов

Достоверность результатов исследования обеспечивается получением их на основе современного математического аппарата и обоснованных способов построения математических моделей. Достоверность численных моделей проверялась путем сравнения полученных с их использованием результатов с аналитическими решениями частных задач, имеющимися экспериментальными данными и расчетами других авторов течений без лазерного излучения и в отсутствие каталитических наночастиц.

Замечания по диссертационной работе

1. В главе 1 приведена основная решаемая система уравнений в

приближении малых чисел Маха, записанная относительно динамической составляющей давления $\pi \ll p_0$. Однако в тексте диссертации нет указания о границах значений динамического давления в решаемой задаче, когда данная модель еще может применяться.

2. В главе 2 для вычисления конвективных потоков используется численная модель, известная как поток Русанова. Проводились ли автором исследования применения других схем для расчета конвективных потоков?

3. В диссертации не обсуждаются требования, которым должны удовлетворяться начальные и граничные условия, чтобы постановка задачи была корректной. Могут ли начальные условия быть разрывными функциями?

4. Автор выносит на защиту вычислительный алгоритм для моделирования нестационарных процессов лазерной термохимии. Однако, в главах 4, 5, 6 проведено решение задач с выходом на стационарные значения газодинамических параметров и концентраций веществ. Решались ли задачи моделирования нестационарных течений?

Заключительные выводы

Диссертационная работа и автореферат Песковой Е.Е. по содержанию и представленным результатам соответствуют паспорту специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Текст диссертации и автореферата логически выстроен и написан грамотным научным языком. Автореферат в полной мере отражает содержание диссертации. Анализ полученных теоретических и практических результатов позволяет считать, что диссертация Песковой Е.Е. является законченной научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований, внесен существенный вклад в решение задачи математического моделирования процессов лазерной термохимии. Приведенные в диссертации результаты достаточно полно отражены в 16 публикациях соискателя.

Считаю, что диссертационная работа «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии» удовлетворяет требованиям п.п. 9, 10 «Положения о порядке 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

