

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МЕХАНИКИ
им. А.Ю. ИШЛИНСКОГО
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИПМех РАН)**

пр. Вернадского, д.101, к.1, г. Москва, 119526
Тел. (495) 434-00-17 Факс 8-499-739-95-31
ОКПО 02699323, ОГРН 1037739426735
ИНН/КПП 7729138338/772901001

06.02.2025 № 11504/01-2171.1-47

На № _____

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор ИПМех РАН
член-корр. РАН

С.Е. Якуш

« 06 » февраля 2025 г.



ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук 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

Актуальность темы исследования. Рациональное использование природных ресурсов, в частности, природного газа является приоритетным направлением научно-технологического развития Российской Федерации. В Институте катализа СО РАН на стенде лазерного катализа разрабатывается технология переработки метана в водород и ценные углеводороды в дозвуковом потоке газа и каталитических наночастиц в присутствии лазерного излучения. Математическое моделирование представляет собой необходимый этап в развитии данной химической технологии. Для воспроизведения в вычислительных экспериментах лазерной каталитической конверсии метана необходимо решить задачи создания, изучения и развития математических моделей, численных алгоритмов и эффективных методов их реализации. Использование результатов моделирования позволит достичь на практике требуемых выходов водорода, этилена и других ценных углеводородов. Поскольку процесс конверсии метана является энергетически затратным, необходимо изучить требование к лазерному

излучению в части соотношения поступающей энергии от стенок химического реактора и от лазерного излучения.

Диссертационная работа Песковой Е.Е. направлена на решение указанных задач. Разработанная автором математическая модель учитывает дозвуковой характер течения, многокомпонентность и многотемпературность среды, эндотермические эффекты радикально-цепных реакций, поглощение излучения каталитическими наночастицами и этиленом. Предложенные автором вычислительные алгоритмы позволяют использовать данную модель для проведения практических расчетов, что подтверждается результатами тестирования реализованного автором программного комплекса. Таким образом, полученные в работе результаты являются актуальными и несомненно создают задел в развитии рассматриваемой прикладной тематики.

Общая характеристика диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы и приложения. Общий объем диссертации составляет 219 страниц, включая 103 рисунка. Список литературы содержит 126 наименований.

Во *введении* обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируются цель, задачи, защищаемые положения, научная новизна, теоретическая и практическая значимость представляемой работы, приводятся данные о ее апробации и список публикаций по теме.

Первая глава посвящена построению и обоснованию математической модели дозвуковых вязких химически активных течений в поле лазерного излучения. Математическая модель создана на основе уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха. Диссертант расширила модель путем учета каталитических наночастиц, лазерного излучения, поглощаемого газовыми компонентами и пылью. Приведены основания, позволяющие считать изучаемую среду многотемпературной и односкоростной. Приведены размерные и безразмерные параметры модели, диапазоны значений газодинамических параметров, при которых может применяться разработанная модель.

Во *второй главе* представлен вычислительный алгоритм для решения полной системы уравнений. Задачи, решаемые в диссертации, рассматриваются в плоской или осесимметричной постановке. Алгоритм построен на основе схемы расщепления по физическим процессам и включает следующие блоки: расчет интенсивности лазерного излучения, расчет температуры наночастиц, решение системы уравнений химической кинетики, уравнений конвекции-диффузии, уравнения Пуассона для давления, коррекция вектора скорости. Приведено

описание всех численных схем, применяемых в работе, имеющих порядок аппроксимации выше первого. В конце главы обсуждается реализация алгоритма в виде параллельного программного комплекса, разработанного с использованием технологии MPI. Распараллеливание выполнено на основе принципа геометрического параллелизма. Показана высокая эффективность параллельного алгоритма.

В *третьей главе* проведено тестирование каждого из основных численных методов, использованных при разработке вычислительного алгоритма, к решению задач лазерной термохимии. Проведено сравнение численных и аналитических решений для температуры и скорости потока для задачи пиролиза этана в плоской трубе. Детально проанализировано влияние радикалов по длине трубы в химически активных потоках. Верификация всего вычислительного алгоритма проведена посредством сравнения экспериментальных и расчетных данных величин конверсии этана и пропана в проточном химическом реакторе, получено хорошее соответствие. Сходимость всех решаемых задач диссертации проверена с помощью расчетов на последовательности сгущающихся сеток. В ходе вычислительных экспериментов получен второй порядок аппроксимации по пространству разработанного алгоритма. Исследована роль геометрического фактора в случае решения задач в плоской и осесимметричной геометрии. Получено, что в случае высоких температур смеси (которые преобладают в решении задач диссертации) роль этого фактора снижается. Также протестирована возможность применения схемы локальных итераций для решения задач дозвуковых реагирующих течений с целью увеличения общего расчетного шага по времени. Проведено решение нескольких модельных задач, получено хорошее соответствие с аналитическими решениями (для температуры и скорости смеси в поперечном сечении трубы) и с результатами вычислительных экспериментов.

В *четвертой главе* анализируется влияние лазерного излучения, поглощаемого этиленом, на газофазные процессы пиролиза этана и конверсии метана. В вычислительных экспериментах показано, что лазерное излучение, поглощаемое этиленом, может интенсифицировать химический процесс на более коротких длинах труб с пониженными температурами стенок. В главе показано, что на процесс газофазной лазерной конверсии метана оказывают влияние следующие параметры: температура стенок трубы, мощность лазерного излучения, размеры труб, состав исходной смеси.

В *пятой главе* исследуются двухфазные газопылевые потоки при различных условиях протекания вычислительного эксперимента с параметрами, близкими к параметрам в лабораторных реакторах. С помощью разработанного программного

комплекса показано существование одно- и двухтемпературного режимов в исследуемых средах. В прямой трубе круглого сечения исследовано влияние температуры стенок, энергии активации метана на наночастицах, размера и концентрации наночастиц, расхода смеси и диаметра трубы на конверсию метана и образование продуктов реакции. Изучен теплообмен ламинарной реакционной среды со стенкой при увеличении скорости потока, показано, что при наличии эндотермических химических реакций и увеличении скорости потока растет теплоотдача от стенок в двухфазную среду. Исследовано влияние лазерного излучения разной мощности в трубах разного диаметра. Получено, что лазерное излучение может увеличить конверсию метана до 75%. Рассчитана энергия на единицу массы превращенного метана в трубах с излучением и без, найдено, что энергия в трубах с излучением расходуется эффективнее. Представлена возможность исследования сред с наличием в них наночастиц разного диаметра.

В *шестой главе* представлена цифровая модель лабораторного реактора неокислительной конверсии метана. Приведены результаты вычислительных экспериментов, найдены условия, при которых конверсия метана составляет 69%. При таких условиях образуются ароматические соединения и водород. На основе результатов диссертационного исследования представлен эскизный проект лабораторного реактора, разработанный в Институте катализа СО РАН.

В *заключении* формулируются основные результаты диссертационной работы, даются практические рекомендации для решения прикладных задач неокислительной конверсии метана и обсуждаются направления дальнейшего развития темы.

В *приложении* приведены схемы химических реакций, используемых в работе, и различные характеристики газовых компонент смеси.

Оценка содержания диссертации. Диссертационная работа Песковой Елизаветы Евгеньевны выполнена на высоком научном уровне и содержит решение сложной и актуальной проблемы, связанной с разработкой математических моделей и программных кодов для задач лазерной термохимии газа в присутствии каталитических наночастиц. Диссертационная работа содержит результаты численного исследования комплекса газодинамических, тепловых, химических процессов, происходящих при конверсии метана.

Научная новизна. Результаты диссертации, выносимые на защиту, являются новыми. Развита математическая модель вязкой газопылевой двухфазной среды при малых числах Маха, которая одновременно учитывает поглощение лазерного излучения этиленом и каталитическими наночастицами, возможность существования многотемпературного режима, эндотермические

реакции в газовой и твердой фазе. Модель включает в себя процессы с существенно различными характерными временами. Разработан вычислительный алгоритм для решения уравнений в рамках развитой модели. Создан комплекс программ для исследования химически активных двухфазных сред в присутствии лазерного излучения открытой архитектуры с возможностью включения в него дополнительных физико-химических процессов. С использованием программного комплекса получены новые данные о процессе лазерной конверсии метана в присутствии каталитических наночастиц в проточных трубах. Найдены режимы, при которых возможно достичь конверсии метана выше 60%. Детально исследованы тепловые режимы, возникающие во внутренних двухфазных газопылевых потоках с эндотермическими химическими реакциями и лазерным излучением. Разработана цифровая модель реактора неокислительной конверсии метана выше 65%, положенная в основу эскизного проекта лабораторного реактора в Институте катализа СО РАН.

Теоретическая и практическая значимость. Значимость диссертационной работы состоит в создании математической модели процесса лазерной термохимии метана в присутствии каталитических наночастиц. Проведенное многокритериальное исследование процесса неокислительной конверсии метана в присутствии каталитических наночастиц позволит получать теоретические оценки условий проведения эксперимента, при которых осуществляется конверсия метана выше 60% с образованием ценных углеводородов, ароматических соединений и водорода. Разработанный автором комплекс программ может применяться при создании новых технологий неокислительной каталитической конверсии метана в присутствии лазерного излучения. В настоящее время результаты, полученные в ходе диссертационного исследования, используются в экспериментальных работах по лазерной конверсии метана в Институте катализа СО РАН.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и заключений. В работе применялись обоснованные и достоверные математические методы, апробированные численные схемы. Разработанный программный комплекс прошел проверку путем тестирования и сравнения полученных решений с известными решениями модельных задач, аналитическими решениями, экспериментальными данными, результатами расчетов других исследователей.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на семнадцати международных и российских конференциях и семинарах. По теме диссертации опубликовано 16 работ, из

которых 13 в изданиях, рекомендованных ВАК. Результаты диссертации полно представлены в опубликованных работах.

Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации.

Вопросы и замечания.

1. В диссертационной работе не учитывается сила тяжести, что видно из базовых уравнений (1.1)-(1.4). Однако рассматриваются медленные течения со скоростью, которая много меньше скорости звука, и в среде имеется большая разность температур. В таких условиях в поле силы тяжести может развиваться естественная тепловая конвекция, искажающая температурное и динамическое поля и влияющая тем самым на процесс конверсии метана. Пренебрежение силой тяжести не обосновано.
2. Исследовался комплекс газодинамических, тепловых, химических процессов, происходящих на разных временных масштабах. На основе каких критериев выбирался шаг интегрирования по времени? Чему равно число Куранта?
3. На рис. 3.11 и 3.17 представлены результаты сравнения численных решений автора с известными аналитическими решениями, показаны распределения температуры. Утверждается, что расхождение составляет 1-2 % на рис. 3.11 и 2-3 % на рис. 3.17. Такое заключение спорно, поскольку расхождение по температуре стоит сравнивать с характерной разностью температур в задаче, а не с абсолютным значением в К (которое меняется, если перейти, например, к температурной шкале в °С). На рис. 3.11 характерная разность температур составляет 50 К, максимальное расхождение около 13 К и, следовательно, отклонение численного решения от аналитического – 26 %. Оценивая аналогичным образом результаты на рис. 3.17, получаем расхождение в 28 %.
4. На рис. 5.26, 5.28, 5.30 показан взрывной рост числа Нуссельта при некоторых значениях координаты x . Однако из этих графиков вряд ли можно сделать вывод о взрывном росте потока тепла от стенок, такую особенность трудно объяснить из физических соображений. Взрывное усиление теплоотдачи от стенки могло бы произойти при резком локальном падении температуры в пограничном слое, но этого не наблюдается. Пики на рис. 5.26, 5.28, 5.30 получаются при расчете числа Нуссельта по формуле (5.1) из-за того, что средняя температура $\langle T \rangle$ при некоторых x оказывается близкой к температуре стенки T_w (об этом сообщается в диссертации). Стремление знаменателя к нулю в (5.1) и дает резкий рост числа Нуссельта. Можно посоветовать автору в дальнейших исследованиях вычислять не число Нуссельта, а непосредственно тепловой поток на стенке, что представляется более информативным.

Указанные вопросы и замечания не снижают общей высокой оценки диссертационной работы.

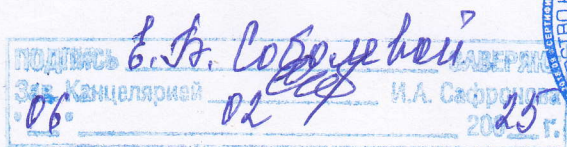
Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней. Диссертация «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии» является законченным научным исследованием и полностью соответствует паспорту научной специальности 1.2.2. – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ – и требованиям п.п. 9, 10 Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 «О порядке присуждения ученых степеней», 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.

Доклад Е.Е. Песковой по материалам подготовленной диссертации был заслушан и получил одобрение на совместном заседании семинара «Механика реагирующих систем» (рук.: д.ф.-м.н. А.Д. Полянин, член-корр. РАН С.Е. Якуш) и семинара «Прикладная механика сплошных сред» (рук.: д.ф.-м.н. А.Н. Рожков) 3.10.2024 г. Отзыв обсужден и одобрен на заседании лаборатории механики сложных жидкостей ИПМех РАН, протокол №1 от 23.01.2025 г.

Отзыв подготовила:

Елена Борисовна Соболева,
ведущий научный сотрудник
лаборатории механики сложных жидкостей
ИПМех РАН,
доктор физ.-мат. наук

Соболева Е.Б.



Полное наименование организации: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук

Адрес: 119526, Москва, пр-т Вернадского, д. 101, корп. 1

Телефон: 8-495-434-00-17

Web-сайт: <https://ipmnet.ru>

Электронная почта: ipm@ipmnet.ru