

## «УТВЕРЖДАЮ»

Ректор федерального государственного  
бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Национальный исследовательский  
Мордовский государственный  
университет им. Н. П. Огарёва», к.п.н.



Д. Е. Глушко

октябрь 2024 г.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного бюджетного образовательного учреждения  
высшего образования «Национальный исследовательский  
Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва»

**Диссертация** «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии» выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации на кафедре прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики.

В период подготовки диссертации соискатель Пескова Елизавета Евгеньевна работала в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва» на кафедре прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики в должности доцента.

Пескова Е.Е. в 2008 году с отличием окончила бакалавриат ГОУ ВПО «Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва» по направлению «Прикладная математика и информатика». В 2010 году с отличием окончила магистратуру ГОУ ВПО «Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва» по направлению «Прикладная математика и информатика».

Учёная степень кандидата физико-математических наук присуждена решением диссертационного совета Д 002.024.03 по защите диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук, созданного на базе Федерального исследовательского центра Института прикладной математики имени М.В. Келдыша РАН, от 11 октября 2018 г. № 20 и выдан диплом Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации КНД № 084628 (приказ № 79/нк-11 от 4 февраля 2019 года).

Научный консультант – Тишкин Владимир Федорович, член-корреспондент Российской академии наук, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий отделом № 15 федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук».

По итогам обсуждения диссертации «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии» принято следующее **заключение**.

#### **Актуальность темы исследования.**

Рациональное использование природного газа, совершенствование ресурсосберегающих и экологически чистых технологий получения из него ценных продуктов с высокой добавленной стоимостью являются приоритетными направлениями научно-технологического развития Российской Федерации. Сложность переработки природного газа определяется свойствами химически малоактивного метана, который является его основной компонентой. Неокислительная конверсия метана в ценные углеводороды и водород представляет собой востребованное направление развития газохимии и водородной энергетики [Science, 2014; Nature Communications, 2022]. Перспективным подходом к развитию этого важного

направления является лазерная каталитическая конверсия метана в газопылевом потоке. Неотъемлемой частью реализации данного подхода выступает математическое моделирование, которое сопровождает научные исследования и разработку технологий от изучения физико-химических основ процесса до создания технических устройств и аппаратов химической промышленности. С точки зрения математического моделирования актуальными являются построение, обоснование и валидация новых математических моделей, более полно описывающих дозвуковые газопылевые потоки с поглощением энергии от стенок области и лазерного излучения, и создание экономичных, надежных численных методов для реализации этих моделей, позволяющих повысить точность решения задач и снизить требования к вычислительным ресурсам.

Этим обосновывается актуальность приведенных в диссертационной работе исследований, посвященных построению математических моделей и вычислительных алгоритмов для детального исследования процессов лазерной термохимии (в частности, лазерной каталитической конверсии метана), а также их обоснование на основе экспериментальных данных, средств вычислительной математики и аналитических решений.

### **Цели работы**

Основными целями диссертационной работы являются следующие

1. Разработка численных моделей для задач лазерной термохимии газа в присутствии каталитических наночастиц.
2. Исследование на основе построенных численных моделей процессов пиролиза легких алканов и лазерной конверсии метана.

### **Степень достоверности результатов**

Достоверность результатов вычислительных экспериментов обеспечивается их хорошим согласованием с аналитическими решениями для частных задач, экспериментальными данными и расчетами других исследователей для течений без лазерного излучения и каталитических наночастиц, экспертными оценками сотрудников Института катализа СО РАН.

## Новизна

Научная новизна диссертационной работы заключается в следующем.

1. **Впервые** разработана **математическая модель**, которая включает: 1) одновременное рассмотрение реагирующего газа и каталитических наночастиц с собственной температурой во внутренних дозвуковых течениях, 2) наличие гетерогенно-гомогенных реакций, сопровождающихся изменением объема, 3) значительное энергопоглощение от стенок и лазерного излучения. Существующие в настоящее время модели дозвуковых реагирующих течений способны рассчитывать однофазные течения с выделением энергии, гетерогенной составляющей выступает химически инертная стенка области.
2. **Впервые** разработан **вычислительный алгоритм** для решения задач лазерной термохимии газа в присутствии каталитических наночастиц в рамках предложенной численной модели. Алгоритм основан на схеме расщепления по физическим процессам и включает оттестированные численные методы повышенного порядка точности.
3. Комплекс программ для моделирования дозвуковых газопылевых химически активных сред с лазерным излучением. В нем открыта возможность включения больших кинетических схем химических реакций, а также выбор учета тех или иных процессов (наличие каталитических частиц, лазерного излучения).
4. На основе разработанного комплекса программ **впервые** проведено многокритериальное исследование процесса неокислительной конверсии метана под воздействием лазерного излучения в присутствии каталитических наночастиц. Определены условия, при которых возможно получение конверсии метана выше 60 % с образованием водорода и ценных углеводородов. **Впервые** исследованы тепловые режимы, возникающие во внутренних двухфазных газопылевых потоках с эндотермическими химическими реакциями и лазерным излучением, численно показано значительное энергопоглощение в изучаемых процессах.
5. Разработана **новая цифровая модель** лабораторной установки неокислительной лазерной конверсии метана в водород и ароматические соединения при

умеренных температурах среды. Полученная в результате исследования степень конверсии превышает 65 %.

### **Теоретическая значимость**

Теоретическая значимость диссертационной работы состоит в создании математической модели двухфазной газопылевой многотемпературной среды с эндотермическим химическим процессом, который зависит от поглощаемого средой лазерного излучения. Разработанные для данной математической модели вычислительные алгоритмы и комплекс программ позволяют получать теоретические знания о внутренних химически активных течениях газа и наночастиц в присутствии лазерного излучения. Проведенное многокритериальное исследование процесса неокислительной конверсии метана в присутствии каталитических наночастиц позволяет теоретически рассчитывать условия воздействия лазерного излучения, при которых осуществляется конверсия метана выше 60% с образованием водорода и ценных углеводородов.

### **Практическая значимость**

Практическая значимость диссертационной работы заключается в возможности применения ее результатов (моделей, алгоритмов и программ) к решению крупной научно-прикладной задачи — пиролиза легких алканов и лазерной каталитической конверсии метана. Направление обладает большим потенциалом развития — разработка новых перспективных технологий для переработки природного газа в водород и ценные углеводороды с получением высокой добавочной стоимости. Результаты, полученные в ходе диссертационного исследования, используются для создания лабораторной экспериментальной установки и планирования экспериментов лазерной конверсии метана в Институте катализа им. Г.К. Борескова СО РАН.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Математическая модель потока газопылевой среды для лазерной каталитической конверсии метана. Система уравнений описывает существенно дозвуковые течения с изменением объема в ходе химических реакций. Математическая мо-

дель включает 1) многокомпонентность и многотемпературность среды, 2) ОДУ для температуры каталитических наночастиц, 3) ОДУ химической кинетики, 4) эндотермические эффекты радикально-цепных реакций, 5) 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. Комплекс программ с применением технологии параллельных вычислений для решения задач течения многокомпонентных газопылевых химически активных сред с лазерным излучением.

4. Результаты решения практических задач на основе математического моделирования.

а) Моделирование газофазной конверсии метана в обогреваемой трубе круглого сечения. Получено, что 1) процесс разложения метана запускается при температурах стенок выше 1370 К с конверсией около 50 %, 2) дополнительный ввод энергии посредством лазерного излучения мощности выше 32 Вт увеличивает конверсию более, чем в 1.5-2 раза, 3) при пониженных температурах стенок 1100-1200 К, мощности излучения выше 64 Вт и наличии в исходной смеси этилена, поглощающего лазерное излучение, в количестве более 2 % можно получить конверсию метана выше 30 %.

б) Моделирование конверсии метана в обогреваемой трубе круглого сечения в присутствии каталитических наночастиц. Определено, что конверсия метана может осуществляться при 1) энергии активации метана на наночастицах ниже 170 кДж/моль, 2) характерном диаметре частиц около 10 нм, их концентрации порядка  $10^{19} \text{ м}^{-3}$ , 3) температуре стенок выше 1073 К. Число Нуссельта при течении в круглой трубе газопылевого потока с эндотермическими реакциями имеет значения  $6.03 \div 6.85$  при изменении чисел Рейнольдса  $9.7 \div 40.6$ .

в) Моделирование конверсии метана в присутствии каталитических наночастиц в обогреваемой трубе круглого сечения под воздействием лазерного излучения. Найдено, что воздействие CO<sub>2</sub> лазерного излучения увеличивает конверсию метана. Определено, что при мощности CO<sub>2</sub> лазерного излучения выше 30 Вт конверсия метана в трубе диаметра 20 мм составляет более 65 % с образованием в первую очередь этилена, а также водорода, ароматических соединений и ацетилена. В результате исследования тепловых процессов получено, что энергия на единицу массы превращенного метана в трубе с излучением 30 Вт расходуется эффективнее почти на 50 %. Определено, что при мощности CO<sub>2</sub> лазерного излучения выше 30 Вт конверсия метана в трубе диаметра 40 мм составляет более 30 % с образованием в первую очередь этилена, а также водорода, ароматических соединений и ацетилена. В результате исследования тепловых процессов получено, что энергия на единицу массы превращенного метана в трубе с излучением 30 Вт расходуется эффективнее в 3 раза (на 184 %).

г) Цифровая модель экспериментального лабораторного реактора неокислительной конверсии метана, разработанная на основе серии расчетов с использованием представленной численной модели. Получено, что в реакторе длины 600 мм и диаметра 20 мм конверсия метана может достигать 65 % при следующих условиях: мощность лазерного излучения 30 Вт, расход смеси 10 л/ч, температура стенок 1173 К, радиус наночастиц  $5 \cdot 10^{-9}$  м, концентрация наночастиц  $1.2 \cdot 10^{18}$  м<sup>-3</sup>.

### **Личное участие соискателя ученой степени**

Результаты, составляющие основное содержание диссертации, получены соискателем самостоятельно. Результаты, выносимые на защиту, принадлежат лично соискателю. Во всех совместных работах автор участвовал в постановке задач, разработке физико-математических моделей, создании вычислительных алгоритмов, реализации программ и анализе полученных результатов.

### **Научные работы соискателя**

Материалы диссертации полно представлены в 16 работах, опубликованных соискателем.

Статьи, опубликованные в рецензируемых научных журналах и изданиях из Перечня ВАК:

1. Peskova E.E. Mathematical Modeling of Nonstationary Problems Related to Laser Thermochemistry of Methane in the Presence of Catalytic Nanoparticles. *Doklady Mathematics*. 2024. Vol. 109, № 3. P. 256-261. (Scopus, WoS)
2. 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. DOI: 10.1134/S0040579524600864. (Scopus, WoS)
3. Peskova E.E., Snytnikov V.N. Computer simulation of laser radiation influence at internal flows of reactive hydrocarbons // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2024. DOI: 10.1134/S0040579524600876. (Scopus, WoS)
4. Peskova E.E., Yazovtseva O.S. Application of the Explicitly Iterative Scheme to Simulating Subsonic Reacting Gas Flows // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2024. V. 64, №2. P. 326-339. (Scopus, WoS)
5. Пескова Е.Е., Снытников В.Н. Численное исследование конверсии метановых смесей под воздействием лазерного излучения // *Журнал Средневолжского математического общества*. 2023. Т. 25, № 3. С. 159-173.
6. 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.
7. Lashina E.A., Peskova E.E., Snytnikov V.N. Mathematical modelling of the dynamics of thermal conversion of methane-ethane mixtures in a wide temperature range // *Chemistry for Sustainable Development*. 2023. T. 31, № 3. С. 278-286. (WoS)
8. Lashina E.A., Peskova E.E., Snytnikov V.N. Mathematical modeling of the homogeneous-heterogeneous non-oxidative CH<sub>4</sub> conversion: the role of gas-phase

- H or CH<sub>3</sub> // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2023. Vol. 136. P. 1775-1789. (Scopus)
9. Snytnikov V.N., Peskova E.E., Stoyanovskaya O.P. Mathematical Model of a Two-Temperature Medium of Gas–Solid Nanoparticles with Laser Methane Pyrolysis // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. 15. P. 877-893. (Scopus)
10. Gubaydullin I.M., Zhalnin R.V., Masyagin V.F., Peskova E.E., Tishkin V.F. Simulation of Propane Pyrolysis in a Flow-Through Chemical Reactor under Constant External Heating // Mathematical Models and Computer Simulations. 2021. 13. P. 437-444. (Scopus)
11. Жалнин Р.В, Масыгин В.Ф., Пескова Е.Е., Тишкин В.Ф. Моделирование дозвуковых многокомпонентных реагирующих газовых потоков на неструктурированных сетках // Инженерные технологии и системы. 2020. Т. 13, № 1. С. 162-175. (WoS)
12. Жалнин Р.В, Масыгин В.Ф., Пескова Е.Е., Тишкин В.Ф. Применение разрывного метода Галёркина к моделированию двумерных течений многокомпонентной смеси идеальных газов на адаптивных локально измельчающихся сетках // Журнал Средневолжского математического общества. 2019. Т. 21, № 2. С. 244-258.
13. 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. (Scopus, WoS)

По материалам диссертации также опубликованы 3 рецензируемые статьи в научных изданиях, индексируемых в международной базе данных Scopus:

14. Peskova E.E. Numerical modeling of subsonic axisymmetric reacting gas flows // Journal of Physics: Conference Series. 2021. 12071. (Scopus)

15. Peskova E.E. A Parallel Algorithm for a Two-Phase Gas-Solid-Particle Model with Chemical Reactions and Laser Radiation // Communications in Computer and Information Science. 2023. 1868. P. 323-335. (Scopus)
16. Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Makarova E.Y., Tingaeva N.A. Parallel Implementation of a Computational Algorithm Based on the Explicit Iterative Scheme for Modeling Subsonic Reacting Gas Flows // Communications in Computer and Information Science. 2024. V. 1914, P. 112-121. (Scopus)

### **Патенты и программы**

17. Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Язовцева О.С., Назаров В.И. Моделирование химико-технологических процессов в реакторах с использованием схем высокого порядка точности. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2017612056 от 14.02.2017. – 2017.
18. Пескова Е.Е., Снытников В.Н. Программный комплекс LasChemFVM-2D для моделирования нестационарных дозвуковых потоков двухфазной реакционной среды. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2024667038 от 19.07.2024. – 2024.

Результаты, полученные в ходе диссертационного исследования, вносят существенный вклад в решение проблемы математического моделирования процессов лазерной термохимии применительно к разработке новых технологий переработки природного газа в водород и ценные углеводороды.

### **Учитывая вышеизложенное, постановили**

Диссертационная работа Песковой Елизаветы Евгеньевны «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии» соответствует паспорту специальности и критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней (п. 9), утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842 (ред. от 25.01.2024 № 62) и рекомендуется к защите на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2. – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Заключение принято на заседании кафедры прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва».

На заседании присутствовало 17 человек.

Результаты голосования: «за» – 17 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел., протокол № 11 от 24 сентября 2024 г.

Председатель заседания



Десяев Евгений Васильевич,  
кандидат физико-математических наук,  
доцент, и.о. зав. кафедрой прикладной  
математики, дифференциальных урав-  
нений и теоретической механики

ФГБОУ ВО «МГУ им. Н. П. Огарёва»

Секретарь заседания



Пестровская Татьяна Александровна,  
старший лаборант кафедры прикладной  
математики, дифференциальных урав-  
нений и теоретической механики  
ФГБОУ ВО «МГУ им. Н. П. Огарёва»

430005, Республика Мордовия, г. Саранск, ул. Большевистская, д. 68.

Тел: +7 (8342) 27-02-56

E-mail: amdetm@math.mrsu.ru