

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.237.01,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УЧРЕЖДЕНИЯ  
«ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР ИНСТИТУТ  
ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМ. М.В. КЕЛДЫША РАН»  
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ  
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 06 марта 2025 г. № 3

О присуждении Песковой Елизавете Евгеньевне, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Математическое моделирование процессов лазерной термохимии» по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» принята к защите 28.11.2024 (протокол заседания №6/пз) диссертационным советом 24.1.237.01, созданным на базе Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук», 125047, г. Москва, Миусская пл., д.4. Диссертационный совет утвержден приказом Минобрнауки России №105/нк от 11 апреля 2012 года.

Соискатель Пескова Елизавета Евгеньевна, 1987 года рождения, в 2010 г. окончила магистратуру Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва» (в настоящее время Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва») по направлению «Прикладная математика и информатика». В 2013 г. окончила очную аспирантуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва» по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Моделирование химически реагирующих потоков с использованием вычислительных алгоритмов высокого порядка точности» защитила в 2018 году, в диссертационном совете Д 002.024.03 (в настоящее время 24.1.237.01), созданном на базе Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН).

Соискатель работает в должности доцента кафедры прикладной математики в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва».

Диссертация выполнена 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 настоящее время кафедра прикладной математики).

**Научный консультант – Тишкин Владимир Федорович**, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий отделом № 15 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

**Официальные оппоненты:**

**Сушинов Александр Иванович**, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой «Математика и информатика» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Донской государственной технической университет»,

**Смирнов Николай Николаевич**, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией волновых процессов Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»,

**Черный Сергей Григорьевич**, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории суперкомпьютерных вычислений и искусственного интеллекта в энергетических технологиях Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук,

дали **положительные** отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** Федеральное государственное бюджетное учреждение науки **Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук (ИПМех РАН)** в своем **положительном** отзыве, подписанном **Соболевой Еленой Борисовной**, доктором физико-математических наук, ведущим научным сотрудником ИПМех РАН, и утвержденном **Якушем Сергеем Евгеньевичем**, доктором физико-математических наук, членом-корреспондентом РАН, директором ИПМех РАН, указала, что 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. 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. 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.

Соискатель имеет 110 опубликованных работ (включая тезисы конференций), в том числе по теме диссертации опубликовано 22 работы, из них в рецензируемых научных изданиях – 16 работ, в том числе 13 работ в изданиях, рекомендованных ВАК. Автор имеет 3 единоличные публикации. На разработанный комплекс программ получено 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ. Сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны.

**Основные научные работы соискателя, в которых изложены результаты диссертации:**

1. 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. (личный вклад 60%)
2. 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. (личный вклад 100%)
3. 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. (личный вклад 80%)
4. 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. (личный вклад 60%)
5. 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. (личный вклад 65%)
6. 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. (личный вклад 100%)
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. Т. 31, № 3. С. 278–286. (личный вклад 50%)
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. (личный вклад 50%)
9. Peskova E.E., Snytnikov V.N. Computer simulation of laser radiation influence at internal flows of reactive hydrocarbons // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2024. Т. 58, № 3. С. 526-536. (личный вклад 65%)
10. 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 circular tube // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2024. Т. 58, № 3. С. 517-525. (личный вклад 65%)
11. 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. (личный вклад 80%)

12. Peskova E.E. Numerical modeling of subsonic axisymmetric reacting gas flows // Journal of Physics: Conference Series. 2021. V. 2057, Iss. 1. 12071. P. 1–6. (личный вклад 100%)

13. Губайдуллин И.М., Жалнин Р.В., Масыгин В.Ф., Пескова Е.Е., Тишкин В.Ф. Численное моделирование пиролиза пропана в проточном химическом реакторе под воздействием постоянного внешнего нагрева // Математическое моделирование. 2020. Т. 32, № 9. С. 119–130. (личный вклад 50%)

14. 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. (личный вклад 60%)

15. 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. (личный вклад 60%)

16. 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. (личный вклад 40%)

В работах [1-16] были опубликованы основные результаты автора, представленные в диссертационной работе, причем работы [2,6,12] являются персональными. В работе [1] соискателю принадлежит разработка комплексной численной модели для исследования дозвуковой динамики двухфазной реакционной среды из многокомпонентного газа и наночастиц в поле лазерного излучения. В работе [2] разработана численная модель для задач лазерной термохимии метана с каталитическими наночастицами в дозвуковых потоках газа, показано, что на выходе трубы конверсия метана составляет более 60%. В работе [3] соискателем разработан и верифицирован вычислительный алгоритм для решения задач дозвуковых вязких потоков с химическими реакциями на основе явно-итерационной схемы ЛИ-М, работе [4] соискателю принадлежит разработка параллельной программы для этого алгоритма. В [5] соискателю принадлежит разработка вычислительного алгоритма для решения задач, возникающих в исследованиях быстрых химических процессов во внутренних ламинарных потоках многокомпонентного газа с различными источниками энергии; создание параллельного кода на его основе. В [6] разработан параллельный вычислительный алгоритм на основе технологии MPI для модели двухфазной химически активной среды с лазерным излучением. В работе [7] соискателю принадлежит внедрение разработанной кинетической модели пиролиза этан-метановых смесей в программный комплекс для исследования дозвуковых реагирующих газовых потоков, проведение расчетов при различных условиях вычислительного эксперимента, анализ результатов. В работе [8] соискателем проведено внедрение в код кинетической модели конверсии метана, учитывающей стадии активации метана на поверхности частиц катализатора и в газовой фазе. В работе [9] соискателем проведена верификация кода на аналитических решениях, изучено влияние лазерного излучения на пиролиз этана. В работе [10] соискателем проведен анализ влияния мощности лазерного излучения на каталитическую конверсию метана, анализ тепловых режимов в реагирующих средах в трубах круглого сечения. В работе [11] исследован процесс газофазной лазерной конверсии метана при различных условиях проведения вычислительного эксперимента с использованием разработанного кода. В работе [12] при сравнении плоских и осесимметричных реагирующих течений выявлена роль геометрического фактора при действии большого числа нелинейных физико-химических процессов. В работах [13,14,15] соискателем проведены расчеты процессов пиролиза этана и пропана в проточном химическом реакторе с целью сравнения с данными

экспериментов. В работе [16] соискателю принадлежит распространение вычислительного алгоритма на основе метода Галеркина на случай многокомпонентной среды.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы ведущей организации, отзывы оппонентов, а также 7 дополнительных отзывов на автореферат и диссертацию. Все отзывы положительные. Отзывы содержат ряд замечаний

**В отзыве ведущей организации ИПМех РАН:**

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.

**В отзыве официального оппонента Сухинова А.И.:**

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 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?

**В отзыве официального оппонента Смирнова Н.Н.:**

1. В уравнении энергии (1.4) отсутствует частная производная по времени от давления в правой части. При этом отсутствие этого члена специально не оговаривается и 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.

**В отзыве официального оппонента Черного С.Г.:**

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.

Отзыв на диссертацию **Снытникова Павла Валерьевича**, доктора химических наук, заведующего отделом гетерогенного катализа Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук», замечаний не содержит.

В отзыве на автореферат **Дерюгина Юрия Николаевича**, д.ф.-м.н., главного научного сотрудника ФГУП — «РФЯЦ — ВНИИЭФ»:

1. На стр. 11 сказано, что математическая модель дозвуковых газопылевых потоков с учетом сопровождающих процессов разработана для малых чисел Маха, однако не отмечается какие рассматриваются течения, сжимаемые либо несжимаемые.

2. Судя по уравнению (5) на стр. 12, которое является следствием уравнения неразрывности, за основу взята модель сжимаемого газа. Уравнения этой модели имеют смешанный гиперболически-параболический тип. Использование уравнения неразрывности в форме (5) привело к построению вычислительного алгоритма решений гиперболически-параболических уравнений для компонент скорости, компонентов смеси и энтальпии и решению эллиптического уравнения для давления. В связи с этим встает вопрос: будет ли решение дискретных уравнений сходиться к решению исходных уравнений.

3. Математическая модель включает описание процессов, которые происходят с различными скоростями, что должно приводить к своим ограничениям на счетный шаг по каждому процессу. В автореферате отсутствует информация по выбору счетного шага.

В отзыве на автореферат **Вельмисова Петра Александровича**, д.ф.-м.н., профессора, профессора кафедры «Высшая математика» Ульяновского государственного технического университета:

1. В автореферате не приведено обоснование отсутствия в математической модели возможности объединения наночастиц в агломераты.

В отзыве на автореферат **Кузнецова Евгения Борисовича**, д.ф.-м.н., профессора, профессора кафедры мехатроники и теоретической механики Московского авиационного института:

1. К недостатку автореферата стоит отнести то обстоятельство, что непонятно, как проводилась верификация разработанной математической модели и насколько хорошо она описывает реальные физико-химические процессы.

Отзывы на автореферат **Васильева Василия Ивановича**, д.ф.-м.н., профессора заведующего кафедрой «Вычислительные технологии» Федерального государственного образовательного учреждения высшего образования «Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова»; **Колединой Камилы Феликсовны**, д.ф.-м.н., доцента, старшего научного сотрудника лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа ИНК УФИЦ РАН; **Верниковской Надежды Викторовны**, к.т.н., старшего научного сотрудника Отдела технологии каталитических процессов/НТК Реализации комплексных технологических проектов Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН замечаний не содержат.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их широкой известностью и высоким уровнем компетентности по всем основным вопросам, рассмотренным в диссертации, включая численное изучение вопросов химически активных сред, разработку и анализ новых вычислительных алгоритмов, реализации их в виде программных комплексов, применение методов и средств математического моделирования для решения сложных научно-практических задач, что подтверждается списком публикаций официальных оппонентов и сотрудников ведущей организации.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

- **разработана** математическая модель дозвукового потока газопылевой среды для лазерной каталитической конверсии метана, которая одновременно учитывает многокомпонентность и многотемпературность среды, эндотермические эффекты радикально-цепных реакций, поглощение лазерного излучения этиленом и наночастицами;

- **разработан** вычислительный алгоритм для описания нестационарных процессов лазерной термохимии реагирующего газа и каталитических наночастиц, прошедший валидацию и верификацию средствами вычислительной математики, сравнением с экспериментальными и аналитическими решениями;

- **разработан** комплекс программ с применением технологии параллельных вычислений для решения задач о дозвуковых течениях многокомпонентных газопылевых химически активных сред с лазерным излучением;

- в вычислительных экспериментах **показано**, что воздействие лазерного излучения, поглощаемого этиленом, увеличивает конверсию этана и метана в газовой среде;

- **получены** результаты математического моделирования конверсии метана в присутствии каталитических наночастиц, **определены** условия проведения эксперимента, при которых может осуществляться неокислительная каталитическая конверсия метана: величина энергии активации метана на наночастицах, температура стенок трубы, концентрация и диаметр наночастиц;

- **определено** влияние лазерного излучения разной мощности на неокислительную конверсию метана в присутствии каталитических наночастиц, **найденно** что при мощности CO<sub>2</sub> лазерного излучения выше 30 Вт конверсия метана в трубе диаметра 20 мм составляет более 65%, а энергия на единицу массы превращенного метана расходуется эффективнее почти на 50%;

- **разработана** цифровая модель экспериментального лабораторного реактора с конверсией метана выше 65%, ориентированная на получение ароматических соединений, водорода, ацетилена, а также небольшие выходы этилена.

**Теоретическая значимость исследования** заключается в

- создании технологии математического моделирования лазерной термохимии метана в присутствии каталитических наночастиц;

- создании математической модели двухфазной газопылевой многотемпературной среды с эндотермическим химическим процессом, который зависит от поглощаемого средой лазерного излучения;



- выявлении механизмов и параметров, влияющих на процесс неокислительной лазерной конверсии метана в присутствии каталитических наночастиц, которые позволяют теоретически рассчитывать условия, при которых осуществляется конверсия метана выше 60% с образованием водорода и ценных углеводородов.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что**

- разработан инструментарий (математические модели, численные методы и комплексы программ) для решения крупной научно-прикладной задачи – пиролиза легких алканов и лазерной каталитической конверсии метана;

- созданный комплекс программ и результаты вычислительных экспериментов, полученные в ходе исследования, открывают возможность разработки новых перспективных технологий для переработки природного газа в водород и ценные углеводороды с получением высокой добавочной стоимости;

- результаты диссертационного исследования используются для создания лабораторной экспериментальной установки и планирования экспериментов лазерной конверсии метана в Институте катализа им. Г.К. Борескова СО РАН.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

- достоверность разработанных в диссертационной работе моделей, методов, алгоритмов и программного обеспечения обеспечивается использованием в качестве основы моделирования фундаментальных законов сохранения массы, импульса и энергии, выбором теоретически обоснованных численных методов и результатами их верификации и валидации;

- 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, а также экспертными оценками сотрудников Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН.

**Личный вклад соискателя состоит в:**

- разработке комплексной математической модели для исследования дозвуковой динамики двухфазной реакционной среды из многокомпонентного газа и наночастиц в поле лазерного излучения;

- разработке вычислительного алгоритма для решения задач, возникающих в исследованиях быстрых химических процессов во внутренних ламинарных потоках многокомпонентного газа и наночастиц с различными источниками энергии;

- валидации и верификации вычислительного алгоритма средствами вычислительной математики, сравнением с экспериментальными данными и аналитическими решениями;

- численном исследовании влияния лазерного излучения на газофазные процессы пиролиза этана и метана;

- численном исследовании тепло-массопереноса и химических превращений процесса неокислительной каталитической конверсии метана;

- численном исследовании влияния лазерного излучения разной мощности на неокислительную конверсию метана в присутствии каталитических наночастиц;

- разработке цифровой модели экспериментального лабораторного реактора с конверсией метана выше 65%, ориентированной на получение ароматических соединений, водорода, ацетилена, а также небольшие выходы этилена.

В ходе защиты диссертации вопросы соискателю задали члены диссертационного совета: д.ф.-м.н. Луцкий А.Е., д.ф.-м.н. Аристова Е.Н., д.ф.-м.н. Меньшов И.С., д.ф.-м.н. Четверушкин Б.Н., д.ф.-м.н. Колесниченко А.В., д.ф.-м.н. Змитренко Н.В., д.ф.-м.н. Якововский М.В., д.ф.-м.н. Василевский Ю.В.

В частности, член совета Меньшов И.С. спрашивал соискателя, почему в математической модели двухфазная среда является односкоростной и многотемпературной, хотя времена скоростной и тепловой релаксации одинаково малы. Соискатель ответила, что времена скоростной и тепловой релаксации действительно малы. Однако, априорный переход к однотемпературной модели для газа и частиц не обоснован, поскольку разность между температурами газа и частиц зависит от интенсивности поглощенного частицами лазерного излучения и от эндотермических химических реакций. Председатель совета Четверушкин Б.Н. поинтересовался, учитывается ли в математической модели излучение самими наночастицами. Соискатель ответила, что учитывается в уравнении энтальпии и уравнении для температуры наночастиц. Член совета Колесниченко А.В. спросил соискателя, как рассчитываются многокомпонентные коэффициенты диффузии. Соискатель ответила, что средний по смеси коэффициент диффузии рассчитывается по формуле Уилки через бинарные коэффициенты диффузии. Член совета Змитренко Н.В. поинтересовался, какие целевые продукты соискатель получает при конверсии метана. Соискатель ответила, что преимущественно образуются этилен, водород и ароматические соединения. Член совета Василевский Ю.В. задал вопрос, рассчитывалась ли экономическая эффективность предлагаемой технологии переработки метана. Соискатель сообщила, что прибыль не рассчитывалась, однако практическая значимость диссертации связана с проверкой в ходе вычислительных экспериментов возможности осуществления лазерной конверсии метана на лабораторном уровне.

Существенных замечаний по диссертации высказано не было. Соискатель ответила на заданные ей в ходе заседания вопросы, согласилась с рядом замечаний, указанных в письменных отзывах, и дала комментарии в необходимых случаях.

В дискуссии приняли участие: председатель совета д.ф.-м.н. Четверушкин Б.Н., член совета д.ф.-м.н. Луцкий А.Е. и к.ф.-м.н. Снытников В.Н., ведущий научный сотрудник Института катализа СО РАН.

На заседании 6 марта 2025 года диссертационный совет принял решение: за комплекс результатов, дающих решение крупной научно-технической проблемы разработки численных моделей для задач лазерной термохимии газа в присутствии каталитических наночастиц и исследование на их основе процессов лазерной конверсии метана, что имеет большое значение для народного хозяйства в части разработки новых ресурсосберегающих технологий получения водорода и ценных углеводородов, присудить Песковой Елизавете Евгеньевне ученую степень доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 19, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель  
диссертационного совета 24.1.237.



Б. Н. Четверушкин

Ученый секретарь  
диссертационного совета 24.1.237.01

М. А. Корнилина

6 марта 2025 года.