

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Песковой Елизаветы Евгеньевны**
**«Моделирование химически реагирующих потоков с использованием
вычислительных алгоритмов высокого порядка точности»**,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Диссертационная работа «Моделирование химически реагирующих потоков с использованием вычислительных алгоритмов высокого порядка точности» посвящена построению параллельного численного алгоритма для моделирования нестационарных дозвуковых газовых потоков на основе схем повышенного порядка точности. Численное моделирование динамики реагирующих потоков является необходимым этапом при разработке новых химических реакторов и оптимизации их работы. Поэтому актуальность темы диссертации не вызывает сомнений.

Практическим результатом работы является создание пакета прикладных программ для моделирования течения газовых смесей с учетом химических реакций. Разработанное программное обеспечение применено соискателем для моделирования динамики потока в лабораторном реакторе газофазного пиролиза легких углеводородов. В автореферате описана серия вычислительных экспериментов по пиролизу этана, в которой исследована зависимость конверсии реагента от температуры нагревательных элементов. Важно отметить, что результаты вычислительных экспериментов были сопоставлены с экспериментальными данными, полученными в Институте катализа имени Г.К. Борескова СО РАН, соискателем продемонстрировано качественное и количественное совпадение результатов.

По материалам диссертации автором опубликовано 15 работ, из которых 5 - в рецензируемых журналах, входящих в перечень изданий, рекомендуемых ВАК РФ. Результаты работы докладывались на всероссийских и международных конференциях и семинарах.

Замечания к автореферату:

1. В автореферате не описаны особенности (преимущества) использования разработанного численного метода высокого порядка точности по сравнению с другими методами расчета течений в реакторах.
2. Из автореферата не ясно, проводилось ли исследование фактического порядка точности разработанного метода на задачах, имеющих эталонное решение, или на последовательности сгущающихся сеток.
3. В автореферате не описано, как в разработанном программном комплексе для решения нестационарных задач выбирается шаг по времени, является ли он постоянным или адаптивным.

4. Требуется дополнительных пояснений алгоритм решения уравнений химической кинетики. В автореферате на стр.9 второй абзац написано, что “Для численного решения уравнений химической кинетики используется явная схема второго порядка точности”. Однако в следующем абзаце говорится “Решение данной системы находится простыми итерациями”. Дополнительную неясность вносит предложение “Для решения системы необходимо выполнить только две итерации, последующие итерации выполнять не следует: они не повышают порядок точности и ухудшают надежность схемы”. В целом из описания невозможно понять, используется явный метод или неявный. Если метод неявный и требует итераций, то как контролируется сходимость итерационного процесса.
5. На рис. 9 и 10 не обозначены размерности величин (температуры и плотности).
6. На стр. 11 автореферата написано “Для верификации численного алгоритма рассмотрена задача моделирования динамики многокомпонентного реагирующего газа в замкнутом реакторе...”, однако дальше идет сопоставление результатов вычислительных и лабораторных экспериментов. Для оценки степени соответствия модели реальному процессу чаще употребляется термин “валидация”, тогда как под “верификацией” численной модели понимают проверку правильности программной реализации алгоритмов.

Указанные замечания не снижают общего положительного впечатления от работы. Считаю, что диссертационная работа «Моделирование химически реагирующих потоков с использованием вычислительных алгоритмов высокого порядка точности» заслуживает положительной оценки, а ее автор, Пескова Елизавета Евгеньевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Стояновская Ольга Петровна, кандидат физико-математических наук
Научный сотрудник Лаборатории математического моделирования
Института вычислительных технологий СО РАН.
630090, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 6
E-mail: o.p.sklyar@gmail.com

«14» сентября 2018 г.

Подпись Стояновской О.П. заверяю:

Ученый секретарь ИВТ СО РАН к.ф.-м.н. Редюк А.А.



«14» сентября 2018 г.