

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.024.03,
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 КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 11.10.2018 г. № 20
(дата)

О присуждении **Песковой Елизавете Евгеньевне**, гражданке Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Моделирование химически реагирующих потоков с использованием вычислительных алгоритмов высокого порядка точности» по специальности 05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» принята к защите 25 января 2018 г. (протокол заседания № 5) диссертационным советом Д002.024.03 на базе ФГУ «ФИЦ Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН», 125047, Москва, Миусская пл., д.4, приказ №105/нк от 11 апреля 2012 года.

Соискатель **Пескова Елизавета Евгеньевна** 1987 года рождения.

В 2010 г. соискатель окончила магистратуру Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва» по направлению «Прикладная математика и информатика».

В 2013 г. соискатель 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».

В настоящее время соискатель работает в должности младшего научного сотрудника на время выполнения фундаментальной НИР № г/б 4-17 "Исследование метода Галеркина с разрывными базисными функциями для решения уравнений диффузионного типа" в ФГБОУ ВО "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" Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель:

Тишкин Владимир Федорович, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий отделом № 15 Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН.

Официальные оппоненты:

Савенкова Надежда Петровна, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории математического моделирования в физике факультета вычислительной математики и кибернетики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»;

Вельмисов Петр Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой «Высшая математика» инженерно-экономического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ульяновский государственный технический университет» дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – ФГБНУ Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук, г. Уфа, в своем **положительном отзыве**, подписанном **Дьяконовым В.А.**, доктором

химических наук, профессором РАН, исполняющим обязанности директора Института нефтехимии и катализа - обособленного структурного подразделения УФИЦ РАН, **Сабировым Д.Ш.**, доктором химических наук, зав. лабораторией, **Спиваком С.И.** доктором физико-математических наук, главным научным сотрудником, **Колединой К.Ф.** кандидатом физико-математических наук, научным сотрудником, и утвержденным **Ахуновым Рустемом Ринатовичем**, доктором экономических наук, доцентом, Врио председателя УФИЦ РАН, указала, что диссертационная работа Песковой Елизаветы Евгеньевны «Моделирование химически реагирующих потоков с использованием вычислительных алгоритмов высокого порядка точности» удовлетворяет всем требованиям Положения о порядке присуждения учёных степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

В отзыве отмечено, что значимость полученных результатов заключается в создании программного продукта, позволяющего проводить моделирование течения дозвукового вязкого теплопроводного сжимаемого химически активного газа. Разработанный программный продукт возможно применять не только для исследования течений в химическом реакторе для пиролиза углеводородов (которое проведено в данной работе), но и для решения широкого класса задач химической промышленности, в которых необходимо исследовать и анализировать динамику газовых потоков. Полученные в работе результаты и разработанные программы могут быть использованы в прикладных и теоретических исследованиях таких, как моделирование процессов тепломассопереноса в порах зерна катализатора, в слое катализатора (неподвижном, движущемся и кипящем), проводимых в таких организациях, как Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения РАН, в Институтах нефтехимии и катализа и Уфимского

Института химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

В качестве замечаний было отмечено следующее:

1. Не обоснован и является неожиданным выбор регулярной декартовой сетки, поскольку на практике геометрия расчетной области (в данном исследовании - химических реакторов) обычно довольно сложная.

2. В системе (1.25) помимо уравнений химической кинетики решается уравнение, отвечающее за изменение температуры в ходе химической реакции. В работе не отражен метод решения данного уравнения.

3. При проведении численных расчетов в главе 3 нет информации о размерах расчетной сетки и ее влиянии на результат.

4. В главе 3 хотелось бы видеть не только исследование, связанное с зависимостью конверсии этана от температуры нагревательных элементов реактора, а так же зависимость от состава и расхода исходной газовой смеси, размеров химического реактора и сопоставление полученных результатов с экспериментом.

Соискатель имеет 35 опубликованных работ, в том числе 14 работ по теме диссертации, из них 8 работ в рецензируемых научных изданиях (в том числе 4 работы в изданиях из перечня ВАК), 6 работ в сборниках трудов конференции и одно свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Наиболее значимые работы соискателя по теме диссертации:

1. Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф. Математическое моделирование динамики многокомпонентного газа с использованием WENO схем на примере пиролиза этана // Журнал Средневолжского математического общества. 2016. Т. 18. № 3. С. 98-106.
2. Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф. Моделирование течения многокомпонентного химически активного

- газа на примере пиролиза углеводородов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 101. 16 с. Режим доступа:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-101>.
3. Gubaidullin I.M., Peskova E.E., Stadnichenko O.A. Mathematical modeling of ethane pyrolysis using ENO schemes // CEUR Workshop Proceedings. 2016. – Vol. 1638. P. 578-587. doi: 10.18287/1613-0073-2016-1638-578-587.
 4. Губайдуллин И.М., Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф. Построение параллельных алгоритмов высокого порядка точности для моделирования динамики реагирующих потоков // XI международная конференция «Параллельные вычислительные технологии», ПаВТ'2017, г. Казань, 3 – 7 апреля 2017 г.: [короткие статьи и описания плакатов]. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. 2017. С. 288–296.
 5. 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. Москва. Роспатент. 2017 г.

В совместных работах автором рассмотрена математическая модель течения многокомпонентного дозвукового течения газа, построен алгоритм повышенного порядка точности для исследования динамики газовых потоков [2]. Решена задача о течении газа в замкнутом реакторе пиролиза этана, получено совпадение с экспериментом [1, 3]. Автором самостоятельно выполнена численная апробация построенного алгоритма на задаче течения газа в проточном химическом реакторе, предназначенном для термического пиролиза углеводородов за счет внешнего обогрева стенок [2]. Автором разработан комплекс программ с использованием технологии параллельных вычислений, позволяющий моделировать динамику течения

многокомпонентного реагирующего газа [1, 4, 5], проведен анализ эффективности параллельного алгоритма [4].

Научные статьи отражают основные результаты диссертационного исследования. Недостоверных сведений в тексте диссертации об опубликованных соискателем работах не выявлено. Общий объем публикаций 5.2 п.л., авторский вклад соискателя 3.2 п.л.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

Положительный отзыв официального оппонента, **Савенковой Надежды Петровны**, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории математического моделирования в физике факультета вычислительной математики и кибернетики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова». В отзыве указаны следующие замечания:

1. Во введении диссертационного исследования указано, что «чтобы понять эффективность введения лазерного излучения, стоит задача проанализировать процесс пиролиза этана, протекающий только за счет внешнего нагрева реакционной зоны». Исследование бы представляло больший интерес, если бы при проведении математического моделирования было возможно учитывать эффекты лазерного излучения. Отсюда, как мне кажется, в заключении следовало отметить не только результаты работы, но и нерешенные задачи, связанные с введением лазерного излучения, как перспективного направления в технологии переработки углеводородов.

2. В работе не указано, проводится ли итерационная процедура внутри шага по времени для согласования решений, получаемых из решения уравнений химической кинетики (1.25) и уравнений переноса (1.26).

3. В главе 3 описана решаемая практическая задача с определенными граничными условиями, аппроксимация которых не обсуждается. Поэтому возникает неясность относительно суммарной

аппроксимации схемы. Опущены такие интересные детали проведения численного эксперимента, как число расчетных узлов по каждому направлению, физическое время расчета, характеристики ЭВМ, на которой проводилось численное моделирование.

Положительный отзыв официального оппонента, **Вельмисова Петра Александровича**, доктора физико-математических наук, профессора по кафедре высшей математики, заведующего кафедрой «Высшая математика» инженерно-экономического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ульяновский государственный технический университет». В отзыве указаны следующие замечания:

1. В главах с верификацией численного алгоритма (главы 1 и 3) не приведены результаты влияния сеточного разбиения. Было бы полезным привести результаты сравнения подобных расчетов.

2. Не совсем понятен выбор геометрии химического реактора. Какова роль буферных зон, в которые поступает метан?

3. Помимо рисунка 3.10, показывающего зависимости конверсии этана от пристеночной температуры в ходе расчета и эксперимента, для большей наглядности следовало привести таблицу с численными значениями конверсии и абсолютную разницу между ними.

4. Имеются несущественные замечания по оформлению текста работы.

Положительный отзыв на автореферат доктора физико-математических наук **Дерюгина Юрия Николаевича**, главного научного сотрудника ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ».

В отзыве указаны следующие замечания:

1. Текст автореферата не позволил оценить степень внедрения программного комплекса среди химиков-экспериментаторов, в частности, занимающихся исследованием пиролиза углеводородов.

2. Не отмечена чувствительность уравнений химической кинетики относительно констант скоростей химических реакций.

Положительный отзыв на автореферат доктора физико-математических наук, профессора **Кузнецова Евгения Борисовича**, профессора кафедры моделирования динамических систем Московского авиационного института (национального исследовательского университета).

В отзыве указано следующее замечание:

1. На странице 9 описано применение метода простой итерации, однако ничего не говорится о его сходимости и почему число итераций больше двух не повышает точность вычислений и ухудшает надежность вычислительной схемы?

Положительный отзыв на автореферат кандидата физико-математических наук, доцента **Тынды Александра Николаевича**, доцента кафедры «Высшая и прикладная математика» Пензенского государственного университета. В отзыве указаны следующие замечания:

1. Автору рекомендуется расширить спектр применения разработанного ПО, не ограничиваясь исследованиями пиролиза углеводородов.

2. Не указан метод решения уравнения Пуассона для динамической составляющей давления.

Положительный отзыв на автореферат кандидата физико-математических наук **Стояновской Ольги Петровны**, научного сотрудника Лаборатории математического моделирования Института вычислительных технологий СО РАН. В отзыве указаны следующие замечания:

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 далее 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.

Положительный отзыв на автореферат кандидата физико-математических наук **Снытникова Валерия Николаевича**, доцента, старшего научного сотрудника отдела нетрадиционных каталитических процессов, институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, руководителя группы аэрозольного катализа. В отзыве указаны следующие замечания:

1. В автореферате не описаны расчеты на последовательности сгущающихся сеток, из которых следует полученный порядок точности у разработанного численного метода.

2. Для алгоритма решения уравнений химической кинетики на стр.9 указано, что используется явная схема второго порядка точности, в то время как формулы соответствуют неявным схемам.

3. Для расчетов экспериментального реактора не указана модификация алгоритма, связанная с его цилиндрической геометрией, в то время как на странице 8 указана декартова прямоугольная сетка.

4. На стр. 18 на рис. 11 приведена зависимость конверсии этана от пристеночной температуры. На этом графике неравномерная (возможно, логарифмическая) шкала по оси абсцисс, что затрудняет восприятие данных. При относительной точности наших экспериментальных данных не хуже 10% хотелось бы видеть краткое обсуждение в автореферате этой зависимости и хорошего совпадения экспериментальных и расчетных значений.

5. Автореферат не свободен от спорных формулировок. Так, в актуальности на стр.3 указывается, что математическое моделирование позволит «отказаться от дорогостоящих натуральных экспериментов». По проверенной десятилетиями точке зрения только разумное сочетание эксперимента, теории и математического моделирования приносит результат в научных исследованиях.

Во всех отзывах отмечается, что указанные замечания не снижают общей ценности работы. По актуальности решаемой проблемы, научной новизне, научной и практической значимости, достоверности научных результатов диссертация удовлетворяет требованиям п.9 Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их широко известной компетенцией в вопросах математического моделирования, разработки численных методов, алгоритмов их решения и комплексов программ, в том числе в области исследования многокомпонентных реагирующих газовых потоков, что подтверждается многочисленными публикациями.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

1. **Разработан** алгоритм повышенного порядка точности для моделирования динамики дозвукового ламинарного течения многокомпонентного реагирующего газа. Выполнена его численная верификация на задаче о течении газа в замкнутом реакторе на примере брутто-реакции пиролиза этана, показавшая его достоверность.

2. **Разработан** параллельный вычислительный алгоритм и на его основе **создан** программный комплекс для нахождения газодинамических параметров, а также концентраций химических веществ для процесса дозвукового ламинарного течения многокомпонентного реагирующего газа в химических установках. Показано, что с увеличением количества расчетных узлов ускорение растет (достигнуто ускорение расчётов в 1,99 раз при использовании 2 вычислительных процессоров и в 39,4 раза на 64 процессорах), что значительно уменьшает общее время решения практических задач.

3. **Проведено** численное моделирование процесса пиролиза этана в проточном реакторе, предназначенном для термического разложения углеводородов посредством нагрева стенок. Проведено сопоставление экспериментальных и расчетных данных по конверсии исходной газовой смеси при различных температурах нагревательных элементов, показавшее эффективность и достоверность разработанного программного обеспечения.

Теоретическая значимость исследования заключается в разработке и развитии алгоритмов повышенного порядка точности для исследования динамики дозвуковых ламинарных многокомпонентных газовых течений с учетом химических превращений. Применительно к проблематике диссертации результативно использованы существующие схемы высокого порядка точности.

Практическая значимость полученных результатов заключается в том, что разработанный программный комплекс может быть использован для моделирования динамики дозвукового ламинарного течения реагирующего газа. Разработка подобного программного обеспечения является одним из направлений на пути перехода от лабораторных установок к опытно-демонстрационным реакторам. Разработанный программный продукт может быть использован для решения большого количества задач химической промышленности, в которых необходимо исследовать и анализировать динамику газовых потоков.

Достоверность результатов исследования гарантируется тем, что вычислительный алгоритм построен на основе известных численных схем и подтверждается сравнением результатов численного моделирования с известными экспериментальными данными. Параллельный алгоритм, построенный для многопроцессорной техники, верифицирован путем сравнения результатов расчетов последовательной и параллельной версий.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии в выборе математической модели и ряда схем и методик для разработки вычислительного алгоритма для исследования многокомпонентных дозвуковых ламинарных течений. Соискатель самостоятельно разработала программное обеспечение, позволяющее моделировать течение реагирующих газовых смесей, провела отладку и тестирование. С помощью разработанного ПО автором проведено моделирование процесса пиролиза этана в проточном реакторе с внешним обогревом зоны реакции. В результате соискателем были получены распределение основных компонент газовой смеси в

продольном сечении реактора, а также плотности, скорости и температуры. На основе полученных вычислительных данных соискателем рассчитана конверсия исходного реагента при различных температурах нагревательных элементов. При непосредственном участии соискателя проходила подготовка основных публикаций по выполненной работе.

На заседании 11 октября 2018 года диссертационный совет принял решение присудить Песковой Е.Е. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 7 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 18, против – нет, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель диссертационного совета

Д 002.024.03, академик РАН

Б. Н. Четверушкин

Ученый секретарь диссертационного совета

Д 002.024.03, к.ф.-м.н.

М. А. Корнилина

11 октября 2018 года