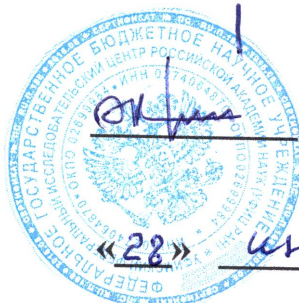


Утверждаю:  
Врио председателя  
Федерального государственного  
бюджетного научного учреждения  
Уфимского федерального  
исследовательского центра  
Российской академии наук

Ахунов Рустем Ринатович



28 июня 2018 года

### ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу  
Песковой Елизаветы Евгеньевны «Моделирование химически  
реагирующих потоков с использованием вычислительных алгоритмов  
высокого порядка точности», представленную на соискание ученой  
степени кандидата физико-математических наук по специальности  
05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и  
комплексы программ»

Диссертационная работа посвящена математическому моделированию многокомпонентных течений реагирующего теплопроводного вязкого газа. В работе проведено исследование динамики газового потока в проточном химическом реакторе, предназначенном для термического пиролиза углеводородов. Поскольку в исследовании рассматриваются дозвуковые течения газа, математическая модель основана на уравнениях Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха, для которых построен вычислительный алгоритм на основе схем повышенного порядка. Численный алгоритм реализован в виде программного комплекса для исследования многокомпонентных газовых течений.

**В качестве основных результатов можно указать следующие.**

1. Разработан алгоритм для проведения математического моделирования динамики газового потока с учетом химических превращений. Алгоритм построен для уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха на основе схем повышенного

порядка точности, предложенных для расчета конвективных потоков и уравнений химической кинетики.

2. На основе построенной схемы разработан алгоритм с использованием технологии MPI для проведения расчетов на многопроцессорной вычислительной техники. Исследована эффективность распараллеливания.
3. В качестве проведения тестовых расчетов была решена задача о течении газа в замкнутом реакторе, получено хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных.
4. Проведено моделирование газового потока в химическом реакторе, предназначенном для термического пиролиза углеводородов. Проведены вычислительные эксперименты для различных температур нагревательных элементов. Исследована и проанализирована динамика течения. Сопоставление экспериментальных и вычислительных данных позволяет сделать вывод о высокой достоверности разработанного численного алгоритма.

**Актуальность темы исследования.** В связи с бурным развитием химической промышленности в настоящее время все больше возрастает интерес к исследованию реагирующих газовых потоков. Однако в связи с высокой стоимостью, сложностью и иногда опасностью проведения натуральных экспериментов на первое место выдвигается задача математического моделирования процессов газохимии. Для воспроизведения реальной картины течения в ходе вычислительного эксперимента необходимо дальнейшее исследование, развитие и усовершенствование численных алгоритмов и эффективных методов их реализации.

Поскольку в мире растет потребление низших олефинов (этилен, пропилен), рассматриваемый в работе процесс термического пиролиза углеводородного сырья в химических установках является актуальным направлением исследования. С использованием разработанных алгоритмов и программных средств возможно проведение вычислительного эксперимента с целью изучения влияния состава и расхода исходной газовой смеси, температуры стенок химических установок, размеров реактора и многих других параметров на механизм и скорость протекания реакции и максимальный выход целевых продуктов. На основе

полученных результатов исследования возможно составить рекомендации по разработке химических установок для производственных целей.

**Содержание диссертации.** Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы.

Во введении изложены актуальность темы исследования и решаемых практических задач, степень разработанности темы исследования, научная новизна, практическая значимость, положения, выносимые на защиту, степень достоверности и апробация результатов, публикации, личный вклад автора, структура и объем диссертации.

Первая глава посвящена используемой для описания исследуемых процессов математической модели, а именно уравнениям Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха. Приведены формулы для расчета диффузионных и тепловых потоков, коэффициентов вязкости, диффузии и теплопроводности. Представлена математическая модель химических реакций, описаны основные выражения для расчета кинетических процессов. В данной главе описан предлагаемый численный алгоритм повышенного порядка точности, основанный на WENO схеме пятого порядка точности и схеме второго порядка точности для решения уравнений химической кинетики, разработанной Н.Н. Калиткиным, А.А. Беловым и Л.В. Кузьминой. Описана и решена практическая задача по пиролизу этана в замкнутом химическом реакторе. Для описания химических превращений используется брутто-схема пиролиза этана.

Вторая глава посвящена построению и разработке параллельного вычислительного алгоритма на основе построенной разностной схемы. В главе дается подробное описание программного комплекса: описаны основные модули, описана работа одного вычислительного узла, приведена схема межпроцессорного обмена, кратко описан механизм вывода данных и визуализация результатов. Для решаемой практической задачи о течении газа в проточном реакторе проведен анализ эффективности параллельного алгоритма.

Третья глава посвящена математическому моделированию течения реагирующего теплопроводного вязкого газа в проточном реакторе, предназначенном для пиролиза углеводородов за счет внешнего обогрева стенок. За кинетическую схему принята схема автокаталитического радикального механизма пиролиза этана. Проведен вычислительный эксперимент с заданными начальными и граничными условиями, исследована динамика процесса, проанализированы результаты. Также проведен ряд расчетов для различных температур нагревательных элементов, получено хорошее согласование вычислительных и экспериментальных данных.

В заключении сформулированы основные результаты исследования.

Общий объем диссертации 95 страниц, включает 9 таблиц, 21 рисунок. Список литературы включает 118 наименований.

**Научная новизна.** Научная новизна работы заключается в построении алгоритма повышенного порядка точности на основе WENO схем и специализированных схем для решения химических задач для моделирования дозвуковых газовых течений с возможностью учета химических превращений. На основе разработанного алгоритма построен вычислительная схема для проведения расчетов на многопроцессорной технике. В результате создан программный комплекс для исследования динамики многокомпонентной реагирующей смеси, характеризующейся дозвуковым течением.

С помощью разработанного ПО проведено исследование дозвукового течения реагирующего газа этана в проточном химическом реакторе с внешним обогревом зоны реакции.

**Практическая и теоретическая значимость работы.** Теоретическая значимость работы заключается в разработке и развитии алгоритмов для исследования динамики дозвуковых реагирующих газовых течений. Практическая значимость 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, движущимся 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.

**Обоснованность и достоверность результатов диссертации.** Достоверность полученных результатов обосновывается сопоставлением полученных численных результатов с экспериментальными данными. Разработанный программный комплекс с использованием технологии параллельных вычислений верифицирован путем сравнения результатов работы последовательной и параллельной версий программы.

**Публикация результатов в печати.** Материалы диссертационного исследования опубликованы в 14 печатных и электронных работах, из них 8 статей в рецензируемых журналах, в том числе 4 статьи в изданиях из списка ВАК, 6 статей в сборниках трудов конференций. Получено 1 свидетельство о регистрации программы для ЭВМ.

**Отмеченные недостатки.**

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 также зависимость от состава и расхода исходной газовой смеси, размеров химического реактора и сопоставление полученных результатов с экспериментом.

Однако отмеченные недостатки не уменьшают ценности проведенного исследования.

**Заключение о диссертации.** Данная работа представляет собой целостное научное исследование на актуальную тему, в котором получен ряд новых результатов, связанных с математическим моделированием процессов газохимии. Результаты, полученные в диссертации Песковой Елизаветы Евгеньевны, представляют научную ценность и вносят вклад в развитие современных методов исследования реагирующих газовых потоков.

Диссертационная работа ясно изложена и хорошо оформлена. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

На основании вышеизложенного считаем, 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 –

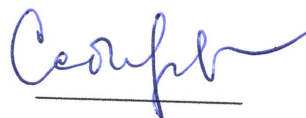
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Отзыв на диссертацию Песковой Е.Е. обсужден и одобрен на заседании лаборатории № 1 «Математической химии» ИНК УФИЦ РАН, протокол № 6 от 20 июня 2018 года.

Ио директора ИНК УФИЦ РАН,  
д.х.н., профессор РАН



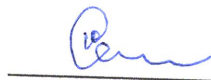
В.А. Дьяконов

Заведующий лабораторией  
№1 «Математической химии»  
д.х.н.



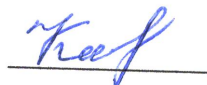
Д.Ш. Сабилов

Главный научный сотрудник  
лаборатории №1 «Математической  
химии» д.ф.-м.н.



С.И. Спивак

Научный сотрудник лаборатории  
№1 «Математической химии»  
к.ф.-м.н.



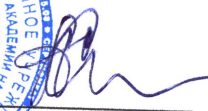
К.Ф. Коледина

Подписи Дьяконова В.А, Сабилова Д.Ш.,

Спивака С.И. и Колединой К.Ф.

заверяю: ученый секретарь

ИНК УФИЦ РАН, к.х.н.



А.Ю. Спивак

Дата 27 июня 2018 г.

Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение  
Федерального государственного бюджетного научного учреждения  
Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии  
наук (ИНК УФИЦ РАН, ИНК РАН)

Юридический и фактический адрес: 450075, РБ, г. Уфа, Пр. Октября, 141  
Тел/факс (3472)-84-27-50, бух (3472)-84-35-43  
Эл.почта: inkbuh@anrb.ru