

ОТЗЫВ

официального оппонента *Вельмисова Петра Александровича* на диссертационную работу *Песковой Елизаветы Евгеньевны* «*Моделирование химически реагирующих потоков с использованием вычислительных алгоритмов высокого порядка точности*» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук (специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ)

Диссертационная работа Песковой Е.Е. посвящена построению вычислительного алгоритма на основе схем повышенного порядка точности и разработке программного продукта, реализующего построенный алгоритм, для исследования течения многокомпонентного реагирующего газа. Рассматриваемая математическая модель представляет собой уравнения Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха и включает внутренние напряжения, возникающие вследствие вязкости газа, а также учитывает эффекты диффузии, теплопроводности и химических реакций, приводящих к изменению газового состава.

Актуальность выполненного исследования несомненна, поскольку развитие химической промышленности обусловило большой интерес к математическому моделированию низкоскоростных течений химически активного многокомпонентного газа. Решаемые в диссертации задачи имеют практическое применение при разработке лабораторных и промышленных установок и исследовании протекания в них химических процессов.

Структура работы традиционна. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы, содержащего 118 наименований. Работа изложена на 95 страницах.

Диссертация имеет следующее **содержание**.

Во введении обсуждается актуальность темы исследования, содержатся формулировки основных проблем, изложено современное состояние работ в области исследования реагирующих газовых потоков, представлены существующие подходы к решению проблем газовой динамики. Далее, во введении сформулированы цели и задачи, обоснованы научная новизна, практическая значимость, представлены положения,

выносимые на защиту, а также включены сведения об апробации диссертационной работы и основных публикациях.

В первой главе подробно описана математическая модель многокомпонентного реагирующего газа, включающая уравнения Навье – Стокса в приближении малых чисел Маха, а также уравнения химической кинетики. Представлен разработанный численный алгоритм на основе схем повышенного порядка точности, реализующий данную модель; в частности, описаны схемы для расчета конвективных, диффузионных членов, а также специализированная явная схема для решения уравнений химической кинетики. Приведены и проанализированы результаты вычислительного эксперимента по моделированию пиролиза этана в замкнутом реакторе с применением упомянутых выше схем.

Вторая глава посвящена программному комплексу, реализующему предложенный алгоритм. В рамках данного комплекса течение многокомпонентного химически реагирующего газа моделируется на прямоугольной сетке. Это позволило построить эффективный параллельный вычислительный алгоритм на основе геометрического параллелизма с использованием технологии MPI. В данной главе уделено внимание описанию структуры программного комплекса, схемы работы одного вычислительного узла, организации межпроцессорного взаимодействия, выводу и визуализации результатов. На примере моделирования течения газа в проточном химическом реакторе рассчитаны ускорение и эффективность разработанного параллельного алгоритма и программного комплекса.

В третьей главе моделируется течение газа в проточном реакторе, где за счет внешнего обогрева стенок происходит термический пиролиз углеводородов. Основными результатами расчета, получаемыми при решении данной задачи, служат: распределение массовой доли основных компонент смеси, температура и плотность смеси, направления вектора скорости в продольном сечении химического реактора, а также давление внутри реактора. Проведен анализ исследуемого течения, сделаны выводы, что полученные результаты описывают процесс пиролиза этана в проточном реакторе, наблюдаемый экспериментально. Проведено сравнение результатов численного эксперимента и экспериментальных данных; основанием для сравнения служили известные из опыта и

рассчитанные величины конверсии этана. Полученное хорошее соответствие результатов опыта и расчета служит подтверждением корректности вычислительного алгоритма. Описанная задача весьма важна с точки зрения существующей на данный момент химической технологии пиролиза углеводородов, что позволяет говорить и о практической значимости разработанного диссертантом ПО.

Наконец, в заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы.

Следует отметить, что структура диссертации отвечает заявленным целям и задачам, а ее содержание соответствует специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Научная новизна проведенных исследований и полученных результатов заключается в том, что автором построен алгоритм на основе схем повышенного порядка точности для решения уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха с учетом вязкости флюида, а также протекающих в нем процессов диффузии, теплопроводности и химических реакций. Для сокращения времени вычислений разработан параллельный вычислительный алгоритм и создан программный продукт, позволяющий на многопроцессорной вычислительной технике находить газодинамические параметры и массовые доли компонент реагирующей смеси. С помощью данного комплекса исследована динамика газового потока в лабораторном реакторе с диффузией, теплопереносом и химическими реакциями пиролиза этана с их тепловыми эффектами и тепловыми процессами. Численные результаты, полученные Песковой Е.Е. с использованием разработанного ею комплекса, хорошо согласуются с экспериментальными результатами исследований, проведенными в лабораторном реакторе.

Таким образом, *научная новизна* имеет место в области численных методов, создания комплексов программ и в области математического моделирования.

Теоретическая значимость диссертации заключается в разработке и развитии алгоритмов для решения задач газодинамики с химическими реакциями при существенном влиянии химических процессов на дозвуковое течение многокомпонентной газовой смеси. *Практическая*

значимость результатов исследования определяется созданием пакета программ, предназначенного для исследования подобных течений. Результаты разработанного ПО предназначены для многопараметрических расчетов при проектировании химико-технологических установок и позволяют оптимизировать геометрию реакторов и физические параметры газовой смеси, например, концентрации, для максимального выхода целевых продуктов и уменьшения побочных.

Достоверность результатов исследования не вызывает сомнений, поскольку обеспечена согласованностью результатов численного моделирования с экспериментальными данными, полученными другими исследователями. В работе используются детально верифицированные ранее численные алгоритмы. Полученные результаты исследования не противоречат основным физико-химическим законам, протекающим в ходе рассматриваемых явлений.

По диссертационной работе имеется ряд **замечаний**:

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.

Отмеченные недостатки не снижают научной значимости и практической ценности полученных в работе результатов.

Общее заключение.

Диссертационная работа выполнена на весьма высоком научном уровне. Исследование посвящено актуальной теме в современной газовой динамике, основные результаты опубликованы в журналах, включенных в перечень научных изданий, рекомендованных ВАК, и неоднократно докладывались на научных конференциях и семинарах.

Диссертация написана доходчиво, грамотно и аккуратно оформлена. Автореферат полно отражает содержание и выводы диссертационной

работы.

Диссертационная работа Песковой Е.Е. является законченной научно-квалификационной работой и отвечает требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, 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.

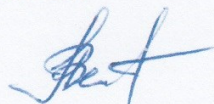
18.09.2018.

Официальный оппонент:

Заведующий кафедрой «Высшая математика»

ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный
технический университет»,

доктор физ.-мат. наук, профессор



Вельмисов П.А.

Шифр специальности, по которой защищена докторская диссертация Вельмисова П.А. – 05.13.16 – «Применение вычислительной техники, математического моделирования и математических методов в научных исследованиях (по отраслям наук)».

Служебный адрес: 432027, г. Ульяновск, ул. Северный Венец, 32,

УлГТУ, кафедра «Высшая математика»;

e-mail: velmisov@ulstu.ru;

телефон: 8(8422)778117.

Подпись П.А. Вельмисова заверяю:

Ученый секретарь

ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный
технический университет»



Арефьев В.Н.