

Отзыв
научного руководителя
о работе Захарова Степана Алексеевича

«Алгоритмы расчёта фазовых диаграмм флюидов на основе численной оптимизации»,
представленной на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по
специальности 1.3.14 — Термофизика и теоретическая теплотехника.

Работа Захарова Степана Алексеевича посвящена реализации метода расчета неконгруэнтного парожидкостного равновесия в изохорно-изотермических условиях и исследованию фазовых диаграмм многокомпонентных флюидов с различными уравнениями состояния. Задача нахождения фазового равновесия в изохорно-изотермических условиях актуальна для композиционного моделирования течений в нефтегазоносных пластах и при этом мало исследована в научной литературе. Актуальными научными направлениями являются как развитие методов решения этой задачи, так и применение этих методов для расчетов фазовых равновесий с использованием многопараметрических уравнений состояния, обеспечивающих более высокую точность по сравнению с кубическими.

Степан подошел к решению задачи с высокой ответственностью и проявил высокую самостоятельность. В ходе работы Степаном были освоены математические методы для расчета фазовых равновесий, программно реализован расчет равновесия пар-жидкость для уравнений состояния из широко применяемых в научной литературе и технических расчетах семейств, кубических уравнений состояния и SAFT. Им была усовершенствована параметризация уравнения состояния CP-PC-SAFT для некоторых асимметричных смесей. В результате работы был получен ряд новых результатов по сравнению предсказательной способности уравнения состояния CP-PC-SAFT с кубическими уравнениями состояния. Показано, что CP-PC-SAFT имеет более высокий потенциал для воспроизведения одновременно составов и плотностей на линиях насыщения. Впервые представлены в литературе результаты расчетов равновесия в бинарных смесях с уравнением CP-PC-SAFT и показана необходимость дополнительной параметризации парных взаимодействий.

Практическая значимость работы представлена программной реализацией модуля расчета фазовых равновесий в VT-постановке, рекомендациями по параметризации парных взаимодействий для УрС CP-PC-SAFT.

Основные результаты диссертации опубликованы в 3 публикациях, индексируемых Scopus, а также в виде личных докладов на 5 всероссийских и 6 международных конференциях.

Диссертация Захарова С.А. отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание степени кандидата физико-математических наук, а соискатель достоин присуждения искомой степени.

Ведущий научный сотрудник
Международной лаборатории
суперкомпьютерного атомистического
моделирования и многомасштабного анализа
НИУ ВШЭ,
канд.физ.-мат.наук
e-mail: upisarev@hse.ru
Телефон: 8(495) 772-95-90*15016

Писарев
Писарев В.В.
Ставропольский государственный технический университет
Управление персонала
Межкалаева А.В.