

О Т З Ы В

официального оппонента

доктора технических наук, профессора Лабутина Александра Николаевича на диссертационную работу Боровковой Екатерины Александровны «Моделирование технологических процессов с газофазными гетерогенно-каталитическими реакциями в производствах синтез-газа и ароматических углеводородов», представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальностям: 05.17.04 – Технология органических веществ, 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Актуальность темы исследований

Синтез-газ и ароматические углеводороды являются стратегически важными продуктами нефтехимического комплекса страны.

Модернизация действующих и проектирование новых энерго- и ресурсосберегающих производственных процессов получения синтез-газа и ароматических углеводородов не возможны без проведения математического моделирования технологических процессов и технологических схем в целом с целью определения оптимальных значений конструктивных и технологических параметров объекта. В связи с этим, постановка и решение задач разработки математических моделей газофазных гетерогенно-каталитических реакторов для получения синтез-газа и ароматических углеводородов, разработки программно-алгоритмического обеспечения для расчета, анализа и оптимизации производственных процессов с использованием систем компьютерной математики и пакетов моделирующих программ являются актуальными задачами. Отсюда следует актуальность темы диссертации.

Основное содержание работы

В первой главе соискатель рассмотрел существующие работы в области компьютерного моделирования химических реакторов, процессов ректификации, в области определения кинетических констант, а также провел анализ технологий получения ароматических углеводородов и синтез-газа.

Во второй главе разработаны и реализованы модели гетерогенно-каталитических реакторных процессов ароматизации легких алканов и получения синтез-газа. Диссертантом разработаны алгоритмы нахождения кинетических констант и расчета «диск»-реактора, а также проведено кинетическое моделирование процессов ароматизации и получения синтез-газа.

Третья глава посвящена разработке компьютерной модели принципиальной технологической схемы ароматизации легких алканов из пропан-бутановой смеси. Проведено моделирование каждого узла технологической схемы.

Четвертая глава посвящена разработке компьютерной модели принципиальной технологической схемы получения синтез-газа из природного газа. Проведены расчетные исследования для определения оптимальных параметров протекания процесса.

Новизна исследований и полученных результатов

В рецензируемой диссертационной работе предложены и обоснованы оригинальные положения и научные результаты, имеющие весомое научное и прикладное значение для развития методов математического моделирования технологических процессов с газофазными гетерогенно-каталитическими реакциями в производствах синтез-газа и ароматических углеводородов, а именно:

- предложена математическая модель кинетики сложных многостадийных реакций ароматизации легких алканов на катализаторе РГУНГ-А и получения синтез-газа на катализаторе NdCaC_0O_4 и определены оценки констант скоростей стадии;
- разработана процедура решения многомерной задачи параметрической идентификации моделей кинетики в форме системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений с использованием методов нелинейного программирования;
- разработан оригинальный алгоритм и его программная реализация оптимального расчета «диск» - реактора и высокотемпературного трубчатого реактора.

Обоснованность и достоверность научных положений, результатов и выводов диссертации

Научные положения, результаты и выводы диссертационной работы Боровковой Е.А. обоснованы квалифицированным использованием теории химических реакторов, современных методов компьютерного моделирования с применением систем компьютерной математики и пакетов моделирующих программ.

Достоверность результатов подтверждается сравнением расчетных и экспериментальных значений концентраций компонентов.

Теоретическая значимость результатов диссертационной работы

Значимость результатов диссертации для науки состоит в том, что математические модели кинетики исследуемых реакций и процедуры оптимального расчета «диск» - реактора и высокотемпературного трубчатого реактора являются весомым вкладом в развитие методологических основ и практических подходов к проектированию газофазных гетерогенно-каталитических реакторов с использованием методов математического моделирования.

Практическая значимость результатов

Практическое значение результатов исследований выражается:

- в результатах расчета конструктивных и технологических параметров реакторов (опытного и промышленного);
- В разработанных компьютерных моделях сложных ХТС получения синтез-газа и ароматизации легких алканов.

Замечания по диссертационной работе

1. В литературном обзоре отсутствуют ссылки на труды отечественных и зарубежных ученых, внесших огромный вклад в развитие математического моделирования химических реакторов включая проблему параметрической идентификации (В.В. Кафаров, В.Н. Писаренко, В.С. Бесков, М.Г. Слинько и др.).
2. В работе отсутствует статистический анализ результатов эксперимента или допущения о параметрах закона распределения ошибок измерений, которые определяют: вид критерия оптимальности оценок кинетических параметров; точность оцененных параметров, которая, в свою очередь, во многом определяет прогнозирующую способность модели реактора.
3. В диссертации не приведены результаты проверки математических моделей на адекватность.
4. В диссертации отсутствует обоснование критерия останова алгоритма определения кинетических констант. Останов может осуществляться как по величине критерия – S, так по точности оценок констант.

5. В тексте диссертации имеются некоторые опечатки, например, уравнения моделей идеального смешения, вытеснения и диффузионной модели на стр. 12 ÷ 13, выражение «уравнением материального баланса» - стр. 77.

Заключение по диссертационной работе

Анализ содержания диссертации позволяет сделать следующие выводы:

1. Несмотря на вышеизложенные замечания, диссертационное исследование заслуживает общей положительной оценки.
2. Диссертация грамотно структурирована, исследования и результаты удовлетворительно проиллюстрированы, оформление в основном соответствует требованиям ВАК. Автореферат отражает основное содержание работы и личный вклад автора в проведенное исследование.
3. Цель и задачи диссертации обусловлены потребностями практики и науки.
4. Поставленная цель диссертационного исследования достигнута и сформулированные задачи решены на высоком научно-техническом уровне.
5. Разработки практической направленности, могут быть рекомендованы к использованию при проектировании ХТС получения синтез-газа и ароматизации легких алканов.
6. Считаю, что по своей тематике, целям, постановке задач исследования и полученным результатам работа Боровковой Е.А. «Моделирование технологических процессов с газофазными гетерогенно-каталитическими реакциями в производствах синтез-газа и ароматических углеводородов» соответствует паспортам специальностей 05.17.04 – Технология органических веществ по п.п. 5, 8; 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ по п. 5.

На основании изложенного можно сделать следующее **заключение**: диссертация Боровковой Е.А. представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, результаты которой являются весомым вкладом в развитие методологических основ и практических подходов к проектированию газофазных гетерогенно-каталитических реакторов с использованием методов математического моделирования.

По актуальности, научной новизне и практической значимости диссертационная работа «Моделирование технологических процессов с газофазными гетерогенно-каталитическими реакциями в производствах синтез-газа и ароматических углеводородов» соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор – Боровкова Екатерина Александровна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальностям: 05.17.04 – Технология органических веществ и 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент -
заведующий кафедрой технической
кибернетики и автоматики Ивановского
государственного химико-технологического
университета,
д. т. н., профессор

ФГБОУ ВО «Ивановский государственный
химико-технологический университет»
153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, д. 7.
т. 8-(4932)-32-72-26; e-mail: lan@isuct.ru



08.06.2016