

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА

Д 212.204.02 на базе Российского химико-технологического университета имени Д. И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации по диссертации Боровковой Екатерины Александровны, представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук.

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета
от «24» июня 2016 года, протокол № 16

О присуждении Боровковой Екатерине Александровне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата технических наук.

Диссертация «Моделирование технологических процессов с газофазными гетерогенно-каталитическими реакциями в производствах синтез-газа и ароматических углеводородов» в виде рукописи по специальностям 05.17.04 – Технология органических веществ и 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, технические науки, принята к защите «08» апреля 2016 года, протокол № 12, диссертационным советом Д 212.204.02 на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева» Министерства образования и науки Российской Федерации (125047, Москва, Миусская площадь, 9, приказ о создании диссертационного совета от «12» августа 2013 года № 418/нк).

Соискатель Боровкова Екатерина Александровна, «06» июля 1989 года рождения, в 2011 году окончила Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации.

В период с 03 октября 2011 года по 03 октября 2014 года была аспирантом кафедры информатики и компьютерного проектирования Российского химико-технологического университета имени Д. И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации, а в настоящее время работает в должности инженера-технолога в обществе с ограниченной ответственностью «УНИКА инжиниринг».

Диссертация выполнена на кафедре информатики и компьютерного проектирования Российского химико-технологического университета имени Д. И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор технических наук, профессор Гартман Томаш Николаевич, гражданин Российской Федерации, заведующий кафедрой информатики и компьютерного проектирования Российского химико-технологического университета имени Д. И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научный консультант – доктор химических наук, профессор Сапунов Валентин Николаевич, гражданин Российской Федерации, профессор кафедры химической технологии основного органического и нефтехимического синтеза Российского химико-технологического университета имени Д. И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации.

Официальные оппоненты:

доктор технических наук, профессор Лабутин Александр Николаевич, гражданин Российской Федерации, заведующий кафедрой технической кибернетики и автоматизации федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации, Иваново;

доктор технических наук, профессор Солохин Аркадий Викторович, профессор кафедры

химии и технологии основного органического синтеза Института тонких химических технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский технологический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации, Москва;

дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации, Казань, в своем **положительном** заключении, подписанном заведующим кафедрой общей химической технологии, доктором химических наук, профессором Харлампиди Харлампием Эвклидовичем и заведующим кафедрой системотехники, доктором химических наук, профессором Зиятдиновым Надиром Низамовичем, утвержденном проректором по научной деятельности и интеграции с производством, доктором технических наук, профессором Абдуллиным Илнуром Абдуловичем, указала, что автор диссертации Боровкова Екатерина Александровна заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальностям 05.17.04 – Технология органических веществ, 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (отзыв одобрен на расширенном заседании кафедры общей химической технологии с участием представителей кафедры системотехники «06» июня 2016 года, протокол № 23).

Соискатель имеет 21 опубликованную работу, из которых по теме диссертации 14 общим объемом 58 страниц, в том числе 4 в научных журналах, включенных в перечень рецензируемых научных изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций, и в материалах 9 международных научных конференций. Монографий, патентов, депонированных рукописей не имеет.

Все работы опубликованы в соавторстве. Личный вклад соискателя состоит в постановке целей, формулировании задач, анализе литературы; выборе объектов и методов, планировании исследования; построении математических моделей и проведении расчетов с их использованием, систематизации, обработке и интерпретации полученных результатов; разработке научных положений и выводов, апробации результатов; подготовке публикаций.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Гартман Т.Н., Советин Ф.С., Проскуро Е.А., Швец В.Ф., Козловский Р.А., Сучков Ю.П., Сапунов В.Н., Локтев А.С., Дедов А.Г. Алгоритм расчёта автотермических режимов гетерогенно-каталитических процессов на тонком слое катализатора // Теоретические основы химической технологии. 2014. Т. 48, № 3. С. 294-300.
2. Gartman T.N., Sovetin F.S., Proskuro E.A., Shvets V.F., Kozlovskiy R.A., Suchkov Y.P., Sapunov V.N., Loktev A.S., Levchenko D.A., Dedov A.G. Computation of the Solid Catalyzed Gas Phase Reactions with a Simultaneous Choice of the Scheme of the Reactions for Different Composition of the Initial Reaction Mixture // Chemical engineering transactions. Vol. 39. 2014. P.1009-1014.
3. Гартман Т.Н., Советин Ф.С., Боровкова Е.А., Швец В.Ф., Козловский Р.А., Локтев А.С., Лебедев Ю.В., Дедов А.Г., Моисеев И.И. Получение синтез-газа кислородной конверсией метана в присутствии катализатора на основе NdCaCoO₄: кинетическое моделирование автотермического процесса // Нефтехимия. 2015. Т. 55, № 4. С. 302-309.

На диссертацию и автореферат поступило 4 отзыва, **все положительные**. В отзывах указывается, что представленная работа выполнена с применением современных

методов исследования и средств компьютерного моделирования технологических процессов, характеризуется высоким научным и техническим уровнем, имеет большое научное и практическое значение и по своей новизне и актуальности соответствует требованиям Высшей аттестационной комиссии.

В отзыве профессора кафедры технологии неорганических веществ и электрохимических процессов Российского химико-технологического университет имени Д. И. Менделеева, доктора химических наук, профессора Кузнецова Виталия Владимировича в качестве замечаний отмечено, что в схеме ароматизации алканов отсутствуют реакции олигомеризации олефинов; разработанная модель ароматизации негибка к изменению технологических параметров и состава сырья. В отзыве профессора кафедры «Общая и физическая химия» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ярославский государственный технический университет», доктора химических наук, профессора Кошеля Георгия Николаевича в качестве замечаний отмечено, что разработанная схема расчетов неуниверсальна вследствие применения идеальных моделей реакторных процессов и ректификации. В отзыве заместителя директора по науке публичного акционерного общества «Научный центр "Малотоннажная химия"», доктора технических наук, профессора Бессарабова Аркадия Марковича в качестве замечаний отмечено, что в тексте автореферата не приведен алгоритм нахождения кинетических констант; адекватность математических моделей не подтверждена статистическими критериями; не представлены проектные расчеты теплообменников и сепараторов. В отзыве начальника лаборатории ректификации № 26 Государственного научного центра Российской Федерации акционерного общества «Государственный Орден Трудового Красного Знамени научно-исследовательский институт химии и технологии элементоорганических соединений», кандидата технических наук, старшего научного сотрудника Соколова Николая Михайловича в качестве замечаний отмечено, что в тексте автореферата не приведена формула расчета критерия рассогласования расчетных и экспериментальных данных; не ясно, какие алгоритмы расчета реакторов, сепараторов и ректификационных колонн были использованы при моделировании технологических схем.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обоснован их высокой компетентностью в вопросах анализа, математического моделирования и практической реализации процессов химической технологии органических веществ, подтвержденной значительным количеством публикаций, и дает возможность оценить научную и практическую значимость диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

созданы алгоритмы и *реализованы* процедуры моделирования гетерогенно-каталитических реакторов различных типов для переработки углеводородного газового сырья – кислородной конверсии метана и ароматизации пропан-бутановых компонентов;

разработаны принципиальные технологические схемы процессов, включая схему выделения и очистки продуктов ароматизации легких алканов;

предложен подход к интеграции пользовательских модулей, описывающих разрабатываемые реакторные процессы и технологические схемы в среде систем компьютерной математики, с пакетами моделирующих программ;

проведены комплексные исследования инженерных проблем реализации разрабатываемых процессов с применением вычислительного эксперимента.

Теоретическая значимость исследования заключается в том, что:

разработана методология совместного использования систем компьютерной математики

и пакетов моделирующих программ для моделирования газофазных гетерогенно-каталитических процессов;

предложены процедуры и алгоритмы определения кинетических констант газофазных гетерогенно-каталитических реакций, проводимых в «диск»-реакторах и трубчатых реакторах, с использованием квазигомогенной модели идеального вытеснения;

обоснована применимость блочных компьютерных моделей к математическому описанию газофазных гетерогенно-каталитических реакторных узлов с системами реакций, имеющих высокие и разнонаправленные тепловые эффекты;

Научная новизна заключается в том, что на примере кислородной конверсии метана и ароматизации лёгких алканов:

решена комплексная задача математического моделирования газофазных гетерогенно-каталитических реакторов и определения кинетических констант на основе данных натурального эксперимента путем совместного применения пакетов моделирующих программ и систем компьютерной математики.

Практическая значимость заключается в том, что на базе пользовательских модулей, разработанных в среде систем компьютерной математики и совместимых с комплексами моделирующих программ, на примере пакетов MatLab и ChemCAD:

определены кинетические константы процессов получения синтез-газа на катализаторе NdCaCoO_4 и ароматизации легких алканов на катализаторе РГУНГ-А;

создана математическая модель и получены результаты расчетов опытного и промышленного «диск»-реактора получения синтез-газа;

выполнен расчет опытного трубчатого реактора ароматизации легких алканов и представлены результаты;

разработаны компьютерные модели принципиальных технологических схем получения синтез-газа из природного газа и ароматизации алканов пропан-бутановой фракции;

определены параметры процесса разделения продуктов ароматизации алканов в четырехколонной ректификационной установке.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

– полученные результаты работы основываются на использовании современных методов расчета и средств моделирования технологических процессов, адекватность которых подтверждена соискателем с помощью моделирования действующих натуральных объектов;

– выводы диссертации обоснованы и не вызывают сомнения и согласуются с современными представлениями о механизмах газофазных гетерогенно-каталитических реакций, принципами моделирования и расчета реакторных узлов для их проведения и систем разделения продуктов нефтегазохимии и промышленного органического синтеза.

Результаты диссертационной работы Боровковой Е. А. могут быть рекомендованы к изучению и использованию в научных и образовательных учреждениях, а также на производственных предприятиях, ведущих научные разработки в области математического моделирования, расчета и проектирования процессов нефтегазохимии и промышленного органического синтеза.

Диссертация охватывает основные аспекты поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследования, непротиворечивой методологической платформы, основной идейной линии, концептуальности и взаимосвязи выводов. По своему содержанию диссертация отвечает паспортам специальностей 05.17.04 – Технология органических веществ в части формулы: «получение в массовом масштабе органических соединений, имеющих товарную ценность», «изучение химических и физико-химических

закономерностей, характерных для конкретной технологии, с целью создания энерго- и ресурсосберегающих, экологически безопасных производств, обладающих высоким качеством продуктов и низкой их себестоимостью»; в части области исследования по пункту 5. «Математическое моделирование процессов химической технологии, протекающих в реакторах, разделительных и других аппаратах»; по пункту 8. «Разработка однородных и разнородных технологических схем выделения целевых продуктов высокой степени чистоты и различных фракций» и 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ в части формулы: «разработка фундаментальных основ и применение математического моделирования, численных методов и комплексов программ для решения научных и технических, фундаментальных и прикладных проблем», «оригинальные результаты одновременно из трех областей: математического моделирования, численных методов и комплексов программ»; по пункту 4. «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента»; по пункту 5. «Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента»; по пункту 7. «Разработка новых математических методов и алгоритмов интерпретации натурального эксперимента на основе его математической модели».

Диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, в которой содержатся научно обоснованные решения по разработке методологии совмещения систем компьютерной математики и пакетов моделирующих программ для моделирования реакторных узлов и технологических схем с газофазными гетерогенно-каталитическими реакциями переработки газового углеводородного сырья. По актуальности, новизне, практической значимости диссертация соответствует требованиям, установленным «Положением о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842 (с изменениями и дополнениями), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук.

На заседании «24» июня 2016 года, протокол № 16, диссертационный совет принял решение присудить Боровковой Екатерине Александровне ученую степень кандидата технических наук по специальностям 05.17.04 – Технология органических веществ и 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 5 докторов наук по специальности 05.17.04 – Технология органических веществ, технические науки, и 3 докторов наук по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, технические науки, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени – 16, против присуждения учёной степени – нет, недействительных бюллетеней – 2.

Председатель заседания
диссертационного совета

Ученый секретарь
диссертационного совета



Р. А. Козловский

Д. В. Староверов