

«Утверждаю»



Профессор по научной деятельности
и интеллектной собственности
ФГБОУ ВО «КНИТУ»,
д.т.н., профессор Абдуллин И.А.



2016 г.

ОТЗЫВ

федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский национальный исследовательский университет» (ФГБОУ ВО «КНИТУ») 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 работы

Для создания конкурентоспособных энерго- и ресурсосберегающих промышленных каталитических процессов актуальной проблемой является утилизация природного газа и получение на его основе ценных химических продуктов.

Природный газ является экологически более чистым и энергетически более выгодным топливом, чем нефть и уголь. Поэтому быстрый рост добычи газа обусловлен его применением как энергетического топлива. Исходя из этого, выбор объекта исследования является достаточно актуальной в настоящее время задачей, так как в России удельный вес использования природного газа для химической промышленности находится на уровне 2,5-3% от общего уровня его добычи.

В настоящее время во всем мире идет стремительное развитие новых нефтехимических процессов, и сокращение временного интервала – от начала разработки до промышленного производства – позволит решить многие экономические и социальные задачи. Это предопределяет необходимость системного подхода одного из наиболее современных методов анализа и синтеза (проектирования) новых современных технологий, к которым относятся газофазные гетерогенные каталитические реакции.

Разработать технологию реакции означает найти оптимальные условия ее протекания, т.е. нахождения экстремального значения выбранного критерия оптимальной эффективности функционирования химико-технологической системы, которая должна обеспечить получение продукта заданного качества с минимальными затратами ресурсов и минимальным воздействием на окружающую среду. В связи с тем, что каждая подсистема ХТС оперирует разными процессами, и условия их протекания не совпадают с аналогичными условиями в соседних подсистемах, решение таких сложных задач невозможно без компьютерного моделирования с использованием разнообразных специальных модулей и их интеграции. Поэтому разработка отечественных технологий производства синтез-газа из природного газа методом кислородной конверсии метана и ароматических углеводородов из легкой пропан-бутановой фракции на уровне моделирования указанных процессов является весьма важной актуальной и своевременной задачей.

Основное содержание диссертационной работы, структура и ее объем

Диссертационная работа Боровковой Е.А. изложена на 142 страницах машинописного текста, состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы, насчитывающего 72 наименования литературных источников, двух приложений и содержит 47 рисунков и 34 таблицы.

Диссертационная работа оформлена в соответствии с правилами ВАК.

Работа построена традиционным способом. В первом разделе представлен литературный обзор, в котором автор проанализировал имеющуюся на сегодняшний день информацию в области компьютерного моделирования химических реакторов, и написан хорошим и ясным языком. Солидный теоретический фундамент работы позволил автору выявить проблемные задачи в этой области, а именно, до настоящего времени не разработанные:

- алгоритмы компьютерных моделей процессов с газофазными каталитическими реакциями, как с простой, так и сложной кинетической схемой;
- алгоритмы моделирования автотермических процессов на тонком слое катализатора;
- алгоритмы расчета трубчатого реактора ароматизации легких алканов, сепараторного узла и узла ректификации и реактора для получения синтез-газа.

Исходя из поставленных задач, автором диссертационной работы были разработаны и реализованы модели гетерогенно-каталитических реакторных процессов ароматизации легких алканов и получения синтез-газа, а также разработан алгоритм нахождения кинетических констант и расчета

«диск»-реактора и 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.

Достоверность полученных результатов работы основывается на использовании современных средств моделирования технологических процессов, адекватность которых подтверждена соискателем с помощью моделирования объектов действующего производства.

Работа прошла хорошую апробацию: материалы диссертации представлялись в качестве устных, стендовых сообщений и обсуждались на всероссийских и международных конференциях.

На основании вышеизложенного можно заключить, что научные результаты, полученные в диссертационной работе, являются достоверными, а заключения и рекомендации, сделанные на их основе, обоснованными.

Научная новизна и практическая значимость

При выполнении диссертационной работы Боровковой Е.А. пришлось решать ряд сложных взаимосвязанных задач. Следует отметить, что с поставленными задачами в целом она успешно справилась.

В процессе выполнения работы были получены новые интересные результаты, составляющие научную и практическую значимость. К таковым, в первую очередь, следует отнести:

- найден новый алгоритм нахождения кинетических констант, применение которого возможно для произвольной кинетической схемы последовательно-параллельных и одновременно протекающих газофазных гетерогенно-каталитических реакций в непрерывных проточных лабораторных (или опытных) реакторах;

- впервые на основе химических реакций, протекающих в реакторах дегидратации алканов и окисления метана, определены кинетические константы, адекватно описывающие модель и позволяющие рассчитать реакторы ароматизации (высокотемпературный трубчатый реактор) и окисления (автотермический «диск»-реактор);

- разработаны и реализованы подходы к совместному применению системы компьютерной математики MatLAB и пакета моделирующих

программ ChemCAD для решения задач математического моделирования газофазных гетерогенно-каталитических реакторных процессов.

Практическая значимость диссертации заключается в следующем.

Разработанные в диссертации модели процессов получения синтез-газа и ароматических углеводородов могут использоваться при проектировании химических процессов в промышленных реакторах.

Разработаны принципиальные технологические схемы получения синтез-газа и ароматизации легких алканов для проведения расчетных исследований технологического процесса, а также определены условия разделения продукта в четырехколонной ректификационной установке.

Определены кинетические константы для процессов ароматизации легких алканов (на катализаторе РГУНГ-А) и получения синтез-газа (на катализаторе NdCaCoO_4).

Соответствие автореферата основным положениям диссертации

Автореферат представляет собой сжатое изложение результатов диссертационной работы Боровковой Е.А. По своей структуре он полностью соответствует диссертации, заключение по работе соответствует поставленным задачам.

Основные результаты диссертационной работы Боровковой Е.А. опубликованы в 14 научных работах в ведущих отечественных и зарубежных изданиях, из них 3 статьи в ведущих отечественных журналах, рекомендованных ВАК, а именно: «Теоретические основы химической технологии», «Нефтехимия», «Химическая промышленность сегодня»; 1 статья в зарубежной печати в журнале «Chemical engineering transactions» и 10 научных работ, опубликованных в трудах и сборниках различных конференций. Содержание публикаций в полной мере соответствует содержанию диссертационной работы.

Замечания

По содержанию и оформлению диссертации и автореферата имеются следующие замечания.

1. Расчёты процессов в химических реакторах в технологических схемах химических производств нельзя считать вполне корректными, т. к. они проведены с использованием конверсий базовых реагентов, что снижает универсальность разработанных моделей.

2. Оценка экономической эффективности моделируемых процессов проведена не полностью, т. к. для технологических схем не рассчитаны такие макроэкономические параметры, как срок окупаемости, точка безубыточности и т. п.

3. По какому критерию проводилась оценка эффективности предложенной процедуры нахождения кинетических констант?

4. Представляет определенную трудность проверка адекватности кинетической модели в связи с отсутствием информации по экспериментальным точкам (таблицы 2-ой главы).

5. Отсутствует вывод из литературного обзора, на основе которого ставятся нерешенные вопросы в данном научном исследовании, хотя задачи были поставлены абсолютно верно.

6. В диссертации показано количество литературных источников 72, а в автореферате указано 52 литературных источника на стр.4.

Сделанные замечания не снижают общей положительной оценки выполненной диссертационной работы.

Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации

С результатами работы следует ознакомить Казанский национальный исследовательский технологический университет (г.Казань); Санкт-Петербургский государственный технологический университет (г.Санкт-Петербург); Национальный исследовательский Томский политехнический университет (г.Томск); Тамбовский государственный технический университет (г.Тамбов); Московский институт тонкой химической технологии (г.Москва); Башкирский государственный университет (г.Уфа), а также предприятия, занимающиеся разработкой и внедрением химической технологии в промышленность.

Предложенные и реализованные в диссертации алгоритмы расчетов химических реакторов возможно использовать при обучении студентов по курсу «Моделирование химико-технологических процессов».

Заключение

В целом нужно отметить, что диссертационная работа отвечает 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, отвечает всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и соответствует п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Правительством Российской Федерации от 24 сентября 2013 года, № 842, поскольку представляет собой комплексное, завершённое научно-квалификационное исследование, где реализована модель технологической схемы получения синтез-газа из метана методом кислородной конверсии метана и ароматических углеводородов из легкой пропан-бутановой фракции на уровне моделирования указанных процессов, а её автор 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 составлен на основании результатов обсуждения рецензируемой работы на расширенном заседании кафедры общей химической технологии с участием представителей кафедры системотехники (протокол №23 от «06» «06» 2016 г.)

Заведующий кафедрой общей химической технологии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», доктор химических наук по специальности 05.17.04 – Технология органических веществ, профессор

Харлампий Эвклидович Харлампиди

Министерство образования и науки Российской Федерации, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет».

Почтовый адрес: 420015, Россия, РТ, г.Казань, ул. К.Маркса, д.68
Контактные телефоны: рабочий (843) 2314352; мобильный +79033052201
e-mail: Kharlampidi@kstu.ru

Заведующий кафедрой системотехники федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», доктор химических наук по специальности 05.17.04 – Технология органических веществ, профессор

Зиятдинов Надир Низамович

Министерство образования и науки Российской Федерации, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет».

Почтовый адрес: 420015, Россия, РТ, г.Казань, ул. К.Маркса, д.68
Контактные телефоны: рабочий (843) 2314195; мобильный +79033444299
e-mail: nnziat@yandex.ru



удостоверяется.

Начальник ОКИД ФГБОУ ВО «КНИТУ»

О.А. Перельгина
«06» 06 2016г.