

УТВЕРЖДАЮ

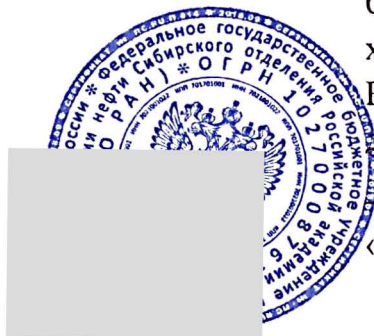
Директор Федерального государственного
бюджетного учреждения науки Института
химии нефти Сибирского отделения

Российской академии наук

Д-р хим. наук, профессор

 А.В. Восмери́ков

« 23 » октября 2018 г.



ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу

Кошкни́на Станисла́ва Алекса́ндровича

«Анализ и оптимизация промышленной технологии получения этилбензола на цеолитсодержащих катализаторах», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности

05.17.04 – Технология органических веществ

1. Актуальность темы выполненной работы

Получение этилбензола, спрос на который с каждым годом неуклонно растет более чем на 2 %, относится к крупнотоннажному производству. Высокие темпы роста производства этилбензола определяются, в первую очередь, возрастающей потребностью в продуктах, получаемых на его основе. Более 90 % этилбензола используется для получения стирола, из которого в дальнейшем производят полистирол, применяемый в автомобилестроении, электро- и радиотехнике, строительной промышленности, при производстве бытовых товаров и упаковочного материала и др. При этом к качеству этилбензола, используемого для производства этих важных продуктов нефтехимии, предъявляются высокие требования. Конечный этилбензол должен соответствовать требованиям российских стандартов, имея степень чистоты не менее 99,99 %. Поэтому производители этилбензола должны не только наращивать мощности промышленных установок алкилирования бензола этиленом, но и обеспечивать рынок этилбензола высшего качества.

На сегодняшний день большинство исследований, направленных на усовершенствование процессов алкилирования бензола этиленом и трансалкилирования полиэтилбензолов, посвящено разработке новых каталитических систем на основе цеолитов и модернизации существующего реакторного оборудования. При этом необходимо понимать, что любая коренная реконструкция промышленных установок требует значительных капитальных затрат и длительной остановки всего производ-

ства. Вместе с тем, многие проблемы оптимизации работы действующих производств уже успешно решаются с применением метода математического моделирования.

Актуальным является совершенствование процесса получения этилбензола методом математического моделирования на основе кинетических моделей. Использование концепции термодинамически содержательных кинетических моделей позволяет моделировать нефтехимические процессы в широком диапазоне технологических параметров с прогнозированием важных технических характеристик процесса, в том числе при изменении состава сырья или замене катализатора на новую улучшенную версию.

Кандидатская диссертация Кошкина С.А. посвящена решению важной научно-технической задачи, а именно, оптимизации процесса получения этилбензола с использованием математической модели каталитических и массообменных процессов, разработанной на основе сочетания данных, полученных с использованием вычислительного эксперимента и при промышленной эксплуатации, и является, несомненно, актуальной.

2. Значимость для науки результатов диссертационных исследований автора

Научная новизна диссертационной работы заключается в следующем:

1. Установлено, что выход этилбензола, получаемого в промышленном реакторе алкилирования бензола этиленом, зависит от состава исходного сырья и технологических условий процесса, что требует высокого уровня детализации схемы превращений углеводородов при моделировании.

2. Установлены кинетические закономерности химических превращений компонентов в процессе алкилирования бензола этиленом и трансалкилирования:

– на основе детального рассмотрения стадийности и механизма процесса алкилирования бензола этиленом на цеолитсодержащем катализаторе выявлены промежуточные и побочные реакции и установлено их влияние на селективность образования целевого продукта – этилбензола;

– разработаны формализованные схемы химических превращений углеводородов в процессах алкилирования бензола этиленом и трансалкилирования, включающие, как основные, так и побочные реакции;

– с использованием квантово-химических методов расчета электронной структуры молекул проведено термодинамическое моделирование и рассчитаны термодинамические параметры целевых и побочных реакций, протекающих в процессах алкилирования бензола этиленом и трансалкилирования, с учетом рассчитанных значений реакционной способности, показавшее хорошую сходимость расчетных и экспериментальных данных.

Уровень формализации механизма процессов алкилирования бензола этиленом и трансалкилирования полиэтилбензолов учитывает целевые и побочные реак-

ции, позволяет сократить размерность математической модели и количество экспериментальных параметров при сохранении чувствительности модели к составу исходного сырья, а также учитывать технологические режимы процесса и прогнозировать состав и качество получаемого продукта.

Необходимо отметить, что предложенная автором модель существенно превосходит все ранее разработанные кинетические модели процесса по соотношению степени детализации реакционной системы к степени сложности модели.

Выполненная соискателем работа характеризуется высоким научным уровнем, а её результаты, несомненно, обладают хорошим потенциалом практического применения.

В целом, полученные автором результаты носят фундаментальный характер и обеспечивают научную новизну работы.

3. Значимость для производства результатов диссертационных исследований автора

Практическая ценность диссертационной работы состоит в разработке автором термодинамически содержательной кинетической модели процессов алкилирования и трансалкилирования в промышленных реакторах на гетерогенном цеолитсодержащем катализаторе, математических моделей, применимых для оптимизации технологии получения этилбензола и учитывающих образование, в том числе побочных продуктов – углеводородных газов, оказывающих влияние на его выход. Разработанная математическая модель позволяет моделировать в широком диапазоне изменения технологических параметров с количественным прогнозированием важных технологических режимов, при этом, что особенно важно, учитывать существенные изменения состава исходного сырья.

Практическая значимость настоящего исследования состоит:

- в методологическом значении работы для исследований химико-технологических нефтехимических процессов;
- в возможности использования результатов исследований в аналогичных или близких процессах, в случае применения других алкилирующих агентов и каталитических систем.

Программно-реализованная математическая модель реакторов алкилирования и трансалкилирования может быть использована для прогнозирования состава образующихся продуктов процессов алкилирования и трансалкилирования при изменении состава исходного углеводородного сырья и температуры процессов.

Результаты исследования рекомендованы к использованию на предприятиях АО «СИБУРХИМПРОМ» для мониторинга и прогнозирования показателей работы промышленных реакторов алкилирования бензола этиленом и трансалкилирования полиэтилбензолов. Оптимизация режимов работы реакторов алкилирования и трансалкилирования, предложенная автором, позволяет увеличить производительность

установки по этилбензолу до 7,7 тыс. тонн в год (на 2,8 %), при этом не происходит рост потребления энергоресурсов.

Исследования автора диссертационной работы позволяют обогатить теоретическим и эмпирическим материалом учебные курсы по компьютерному моделированию систем в химической технологии и ряд спецкурсов для студентов высших учебных заведений.

4. Конкретные рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации

Материал диссертационной работы представляет интерес для специалистов, работающих над созданием и совершенствованием процессов нефтепереработки и нефтехимии, а также для специалистов, занимающихся разработкой новых технологических схем процессов алкилирования и трансалкилирования. Результаты работы Кошкина С.А. могут быть использованы в следующих научных учреждениях – Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН (г. Москва), Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН (г. Новосибирск), Институт проблем переработки углеводородов СО РАН (г. Омск), Институт химии и химической технологии СО РАН (г. Красноярск), Институт химии нефти СО РАН (г. Томск) и в лекционных курсах ВУЗов соответствующего профиля – Санкт-Петербургский политехнический государственный университет, Уфимский государственный нефтяной технический университет, Казанский государственный технологический университет, Самарский государственный технический университет, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева (г. Москва), Национальный исследовательский Иркутский государственный технический университет.

Замечания по работе:

1. В работе автор рассматривает процессы алкилирования бензола этиленом и трансалкилирования полиэтилбензолов на примере показателей работы промышленных реакторов предприятия АО «СИБУРХИМПРОМ». Целесообразно было бы привести в диссертации перечень действующих отечественных промышленных установок алкилирования и трансалкилирования, а в заключении работы сделать вывод о применимости результатов проведенных исследований на других аналогичных объектах, использующих цеолитсодержащие катализаторы.

2. На стр. 62 диссертационной работы автор указывает, что «Метод математического моделирования позволяет сократить ресурсы на проведение оптимизации и исследований, но требует массива данных для построения моделей, дающих впоследствии адекватный результат». Возникает вопрос: «Если катализатор находится на другом уровне активности или скорости дезактивации, то будет ли работать разработанная Вами математическая модель?»

3. В диссертационной работе не приведено объяснения наблюдаемому максимуму выхода этилбензола при изменении избытка бензола (мольное соотношение Б/ДЭБ \approx 4) в процессе трансалкилирования (рис. 5.3 на стр. 112).

4. К сожалению, автором не приводятся материальные балансы или показатели производства этилбензола для описываемого наилучшего варианта проведения процесса в сравнении с базовым случаем, аналогично приведенным данным в Таблице 5.11 (стр. 120) и в Приложении К (стр. 179) диссертации.

5. В Главе «Литературный обзор» автор упоминает работы некоторых исследователей, но не дает ссылки на их публикации (стр. 31, 32, 33). На стр. 97 указано, что «в качестве гидродинамической модели реактора алкилирования может быть применена модель идеального вытеснения», хотя по тексту идет разговор о реакторе трансалкилирования. В диссертации на страницах 117 и 120 указаны две разные таблицы под одним номером 5.11.

6. К сожалению, диссертация не лишена наличия разного рода ошибок, особенно много проблем с расстановкой запятых и правильным согласованием окончания слов, во многих предложениях в конце отсутствует точка, на рис. 2.3 (стр. 44) нет обозначения дополнительной оси Y, ссылки на приводимые рисунки и таблицы во многих местах по тексту следовало заключать в скобки, ссылки на впервые упоминаемые таблицы и рисунки должны быть перед, а не после них. Кроме того, в автореферате и диссертации встречаются неудачные выражения, например, «польза от использования моделей», « типовые механизмы», «полноценное моделирование» и т.п.

5. Заключение

Приведенные замечания не носят принципиального характера и не вызывают сомнений в достоверности результатов и основных выводов диссертации.

Автореферат и опубликованные работы достаточно полно отражают содержание диссертации. Основные результаты работы содержатся в 4 статьях, в том числе 2 статьи в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК, и 2 статьи в научных изданиях из базы данных Web of Science, апробированы на международных и российских конференциях. Получено 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Диссертационная работа отвечает требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» ВАК Минобрнауки РФ (Постановление Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842), предъявляемым к кандидатским диссертациям. В ней содержится решение задачи по оптимизации процесса получения этилбензола как на стадии алкилирования бензола этиленом, так и на стадии трансалкилирования на гетерогенных цеолитсодержащих катализаторах, реализованных в промышленных аппаратах большой мощности с использованием термодинамических и кинетических содержательных математических моделей. Практическое использование созданной математической модели процесса алкилирования бензола этиленом и трансалкилирования на цеолитсодержащих катализаторах позволит повысить эффективность работы промышленных установок производства этилбензола.

Соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.17.04 – Технология органических веществ.

Отзыв обсужден и одобрен на научном семинаре лаборатории физико-химических методов исследования ИХН СО РАН (протокол № 7 от « 22 » октября 2018 г.).

Доктор химических наук, главный научный сотрудник
лаборатории физико-химических методов исследования
ИХН СО РАН

Тел. (3822) 491-820; факс: (3822) 491-457

E-mail: ks@ipc.tsc.ru

634055, Россия, г. Томск, пр. Академический, д. 4



Кудряшов
Сергей Владимирович