

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ им. Н.С. КУРНАКОВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИОНХ РАН)

119991, г. Москва, Ленинский проспект, 31. Тел. (495) 952-0787, факс (495) 954-1279, E-mail: info@igic.ras.ru

№ _____
на № _____ от _____

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор ИОНХ РАН

Д.Х.Н., член-корреспондент РАН В.К. ИВАНОВ
25.01.2022 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Назанского Сергея Леонидовича на тему «Научные основы использования рециркуляции для интенсификации реакционно-ректификационных процессов», представленной на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 2.6.10 – Технология органических веществ.

Актуальность темы диссертационной работы

Известно, что достижение высоких значений конверсии и селективности в реакционных системах во многих случаях невозможно из-за ограничений, связанных с химическим равновесием, а также с низкими скоростями химических реакций. Для преодоления указанных ограничений и затруднений используют блок разделения, который формирует поток целевых продуктов заданного качества и рециркулирующий поток реагентов. Изменение величины и состава рецикла позволяет влиять на скорости реакций, что, в свою очередь, позволяет увеличивать конверсию и селективность процесса, и таким образом реализовывать ресурсосбережение и повышать экологические показатели производства.

Повторное использование реагентов уже давно используется в различных отраслях промышленности. Разработка теоретических основ рециркуляции началась с 1930-х годов, когда впервые была обоснована необходимость использования рецикла для снижения конверсии и повышения производительности реактора. На первом этапе исследований были созданы математические модели идеальных рециркуляционных систем, включающих реактор и делителя. Они позволяют определить необходимую для достижения заданной конверсии величину рецикла реагентов, но с помощью этих моделей практически невозможно анализировать стационарные состояния системы при изменении рабочих параметров. Дальнейшее развитие исследований рециркуляционных систем двигалось в направлении создания строгих моделей химико-технологических систем, которые адекватно описывают реальные объекты. Данные модели представляют собой системы нелинейных уравнений большой размерности, поэтому расчет по ним связан с дополнительными трудностями, которые заключаются в неустойчивой сходимости вычислительных процедур и высока вероятность выявить не все возможные стационарные состояния процесса.

Таким образом, существующая ситуация с ограниченной возможностью применения качественных моделей с одной стороны и проблемами численных методов с другой приводит к необходимости создания общей модели и разработки в целом научных основ использования рециркуляции для интенсификации реакционных процессов. В связи с этим докторская диссертация Назанского С.Л., посвященная этой проблеме, весьма актуальна.

Основное содержание работы

Диссертационная работа включает введение, шесть глав, заключение и список литературы. Диссертация изложена на 221 странице машинописного текста, содержит 27 таблиц, 175 рисунков и библиографию из 140 наименований.

Введение обосновывает актуальность научной проблемы, формулирует цель и задачи диссертационного исследования, обозначает научную новизну и практическую значимость, дает оценку достоверности и апробации результатов работы.

В первой главе представлен анализ литературных источников, посвященных применению рециркуляции в технологии основного

органического и нефтехимического синтеза. Рассмотрен механизм влияния рециркуляции на производительность реакционного узла, конверсию реагентов и селективность процесса. Приведены методы математического моделирования рециркуляционных систем, рассмотрены различные варианты постановки задачи расчета химико-технологической схемы. Из всего изложенного делается вывод, что оптимизация реакционно-ректификационных процессов требует создания научных основ рециркуляции.

Вторая глава содержит описание объектов и методов исследования. Рассматривается стехиометрия модельных реакций, соответствующая реальным процессам основного органического синтеза: изомеризация ($A \rightleftharpoons B$), альдольно-кетоновая конденсация или диспропорционирование ($2A \rightleftharpoons B+C$), присоединение ($A+B \rightleftharpoons C$), этерификация ($A+B \rightleftharpoons C+D$). Даны качественные математические модели реакторов различных типов и модель ректификационной колонны при допущении о бесконечной разделительной способности. Разработана математическая модель рециркуляционной системы «реактор-блок разделения», которая позволяет выявлять стационарные состояния рециркуляционной системы в зависимости от величины и состава рецикла. Входящие в нее кинетические уравнения описывают изменения состава реакционной среды по химическим реакциям и рециркулирующим потокам компонентов. При использовании ректификации математическая модель дополняется условиями по качеству разделения.

Третья глава содержит результаты исследования рециркуляционных реакционно-ректификационных процессов для реакций различных типов, протекающих в зеотропных смесях с различным распределением температур кипения компонентов. Определены диапазоны значений объема реактора и потока рецикла, соответствующих стационарным состояниям с различными показателями процесса. На основе анализа четких разделений в работе сформировано 11 новых принципиальных схем, потенциально обеспечивающих 100%-ю конверсию и селективность в случае зеотропных реакционных смесей. Схемы включают несколько рецикловых потоков, учитывающих физико-химических особенностей реакционных смесей, что, в свою очередь, дает новые возможности управления показателями процесса.

В четвертой главе представлены результаты исследования рециркуляционных реакционно-ректификационных процессов для реакций различных типов, протекающих в азеотропных смесях. Описан способ сдвига равновесия реакции в сторону целевых продуктов вследствие изменения концентрации компонентов в результате разделительного процесса. Реализация

этого подхода позволит преодолеть ограничения, накладываемые физико-химическими свойствами компонентов реакционной смеси на возможность их выделения из азеотропной смеси практически в чистом виде.

В пятой главе приводится алгоритм построения принципиальных рециркуляционных схем, обеспечивающих заданные значения технологических показателей, методами термодинамико-топологического анализа с учетом взаимного расположения многообразий фазового и химического равновесия. Схемы построены на основе экспериментальных данных. Предложена методика оценки практической реализации стационарных состояний, предсказанных при допущении бесконечной разделительной способности ректификационных колонн. Методика предполагает совместный анализ стехиометрических закономерностей и геометрии укладки траекторий ректификации в концентрационном симплексе.

Шестая глава посвящена способам усовершенствования существующих технологий получения промышленно важных органических продуктов: метилацетата, изоамилацетата, втор-бутилацетата, изопропилбензола и 2-метоксипропена. Предлагаемые схемы базируются на ректификации и специальных методах на ее основе. Оценка рассмотренных схем с использованием современных программных комплексов CHEMCAD и Aspen Plus указывает на их эффективность. Получены значения объема реакторов, рециркуляционных потоков, статических параметров аппаратов блока разделения, обеспечивающих заданное качество продуктивных потоков.

Рекомендации по использованию результатов диссертации

Результаты работы могут быть использованы проектными организациями, занимающимися разработкой и проектированием производств основного органического синтеза: ООО «ГСИ-Гипрокаучук», ООО НПК «Кедр-89», ООО «Научно-производственная фирма ЭИТЭК», ФГУП «Государственный научно-исследовательский институт органической химии и технологии», высшими учебными заведениями, осуществляющими подготовку специалистов химико-технологического профиля: ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский технологический институт (технический университет)», ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет, ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет», ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический

университет», ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет».

Замечания по работе:

1. В работе отсутствуют результаты натурного эксперимента по выявлению стационарных состояний рециркуляционных систем. Было бы интересно рассмотреть перспективы постановки физического эксперимента. В чем заключаются сложности, если таковые имеются.
2. В диссертации нет сведений об использовании тепла потоков (теплоинтеграция, тепловые насосы, комплексы с частично связанными материальными и тепловыми потоками; не учитывается электроэнергия, необходимая для перекачивания рециркуляционных потоков.
3. В работе следовало бы показать более четкую связь модельных систем с реальными промышленными объектами.
4. Следовало бы подробнее описать каким образом реализуется режим бесконечной разделительной способности ректификационной колонны.
5. Из текста диссертации не очень ясно, что автор вкладывает в понятие «содержательная модель».

Указанные выше замечания носят частный характер, не ставят под сомнение теоретическую и практическую значимость результатов работы и не влияют на общую высокую положительную оценку представленной диссертации.

Достоверность результатов работы

Работа выполнена на современном научном уровне с применением фундаментальных положений термодинамики фазовых и химических равновесий, стехиометрических закономерностей, качественной теории дифференциальных уравнений. Вычислительные эксперименты проводили с использованием адекватных математических моделей и современных специализированных программных продуктов CHEMCAD и Aspen Plus. В связи с этим достоверность полученных результатов не вызывает сомнений.

Автореферат в полной мере отражает содержание диссертации. По материалам диссертации опубликовано 33 печатных работы, в том числе 8 статей в журналах, входящих в международную систему цитирования Web of Science, 11 статей в журналах, рекомендованных ВАК для опубликования основных научных результатов диссертаций», тезисы 12-и докладов на научных конференциях и 2 учебно-методических пособия.

Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней

Диссертационная работа отвечает требованиям п.п. 10, 11, 13 и 14 Положения «О присуждении ученых степеней» ВАК Минобрнауки РФ (Утверждено Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842 в редакции 01.10.2018 г. с изменениями от 26.05.2020 г.).

Диссертационная работа Назанского С.Л. отвечает требованиям п. 9 Положения «О порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к докторским диссертациям, поскольку в ней разработаны новые принципиальные рециркуляционные схемы, обеспечивающие заданное качество продуктов; разработана общая математическая модель рециркуляционной системы «реактор-узел разделения», которая может быть использована на этапе предпроектной разработки ресурсосберегающих технологий получения промышленных органических продуктов.

Автор представленной работы Назанский Сергей Леонидович заслуживает присуждения степени доктора технических наук по специальности 2.6.10 – Технология органических веществ.

Отзыв подготовил

Д.х.н., профессор, член-корр. РАН

Почтовый адрес

119991, г. Москва, Ленинский пр-т, 31

Телефон +7(495)775-65-85

e-mail: gekhman@igic.ras.ru



Гехман А.Е.

Отзыв заслушан и утвержден на заседании Секции «Химическая технология»

Ученого Совета ИОХ РАН

протокол № 2 от «25» января 2022 г.

Секретарь Секции «Химическая технология» Ученого Совета ИОХ РАН,

К.х.н.

Заходяева Ю.А.

Почтовый адрес

119991, г. Москва, Ленинский пр-т, 31,

Телефон +7(495)775-65-85

e-mail: yz@igic.ras.ru