

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор ИИХ РАН, чл.-корр. РАН

Л. Максимов

ноября 2023 г.



ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертацию Нурмуродова Талъгат Шухрат Угли
**«Закономерности нестационарной и стационарной кинетики окисления
кумола»**,
представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по
специальности 1.4.14 – Кинетика и катализ

Актуальность работы

Задача моделирования кинетики реакции окисления кумола кислородом воздуха с получением гидроксида кумола с целью оптимизации процесса и создания цифрового двойника для моделирований условий взрывоопасной эксплуатации производства является актуальной.

Целью диссертации стало разработка подходов к регулированию скорости окисления кумола в стационарных условиях промышленной реализации, моделирование поведения производства в нестационарных условиях и разработка рекомендаций для безопасного проведения процесса.

Для достижения поставленной цели автор решил следующие задачи:

- с использованием представлений о радикально-цепном механизме реакции на основе существующих экспериментальных данных провел расчет кинетических параметров реакции при температурах 383К и 393К;
- на основе феноменологической модели с использованием программного пакета Aspen Hysys провел моделирование производства для стационарных условий его работы;
- на основе феноменологической модели провел оптимизацию действующего производства с точки зрения достижения максимальной конверсии сырья и селективности образования продукта при минимальных общегодовых затратах;
- на основе феноменологической модели с использованием программного пакета Aspen Hysys провел моделирование производства для нестационарных условий его работы (в аварийном режиме);

- провел анализ чувствительности работы производства к изменению параметров работы вспомогательного оборудования;
- сформулировал мероприятия обслуживающего персонала в аварийных режимах работы производства с целью снижения негативного влияния последствий на выход продукта и безопасность проведения процесса.

Основное содержание диссертации изложено во введении, четырех главах и выводах.

Диссертация Нурмуродова Т.Ш.У. изложена на 147 машинописной странице, включает 16 таблиц, 41 рисунок и список цитируемой литературы из 174 работ отечественных и зарубежных авторов.

Во **введении** обоснована актуальность темы и практическая значимость работы, сформулирована цель работы и поставлены задачи, которые необходимо решить для ее достижения.

В **первой главе**, состоящей из 5 разделов, представлен обзор научно-технической литературы, посвященной исследованию кинетики окисления кумола, описанию программных пакетов, используемых для моделирования кинетики, описанию настройки контуров регулирования.

Во **второй главе** приведена методика проведения экспериментальных исследований, набор стехиометрических уравнений для описания реакции и на их основе кинетическая модель в дифференциальном виде.

Для описания скорости изменения концентрации кислорода автором предложено уравнение, которое включает в себя два слагаемых и учитывает изменение концентрации непосредственно в результате протекания химической реакции, и изменение концентрации в результате растворения кислорода в реакционной смеси, т.е. в результате массопереноса кислорода из газовых пузырей в жидкую фазу кумола. Проведен расчет коэффициента диффузии для кислорода, показано, что скорость диффузии достаточно велика и не является лимитирующим фактором для реакции.

На основе результатов экспериментальных исследований, автор решил обратную задачу химической кинетики и определил численные значения кинетических констант модели при температурах 383К и 393К.

Далее автор провел исследование модели путем варьирования концентрации кислорода в исходной смеси при разных начальных концентрациях гидропероксида кумола. Проведен кинетический анализ влияния скоростей реакций газообразного кислорода на скорость накопления гидропероксида кумола. Автором установлено наличие двух областей, где наблюдается сильное и слабое влияние концентрации кислорода. Показано, что при концентрации кислорода в газовой фазе выше концентрации,

определяемой по уравнению $0,1175[\text{ROOH}]_0 - 0,0023$ моль/л, изменение концентрации кислорода в азот-водородной смеси не влияет на скорость накопления гидропероксида кумола.

В третьей главе представлены результаты разработки феноменологической модели реакции окисления кумола с целью возможности ее интеграции в программный пакет Aspen Hysys. При разработке модели принято, что реакция является кинетически-контролируемой: скорость диффузии кислорода из газовой фазы выше скорости протекания реакции окисления кумола. Для модели на основе экспериментальных данных найдены численные значения кинетических параметров.

С использованием феноменологической модели автор провел технологический расчет промышленной установки окисления кумола, работающей в стационарном режиме, мощностью 300 кг/ч по кумолу. Оптимизация параметров работы производства проведена путем варьирования количества реакторов в каскаде и температурного режима работы в реакторах. Показано, что оптимальной с точки зрения минимальных общегодовых затрат является схема, которая включает в себя три реактора, работающих при температуре 372 К.

В четвертой главе проведен расчет промышленной установки окисления кумола мощностью 2000 кг/ч по кумолу, работающей в нестационарном режиме. Для создания нестационарного режима работы установки, автором в схему включено вспомогательное оборудование – потенциальные источники возмущения.

Автором достаточно подробно рассмотрены различные контуры регулирования, приведены основные параметры работы регуляторов и регулирующих клапанов. Рассмотрены сценарии возможных отказов оборудования, проведена оценка чувствительности параметров процесса на вероятные отказы (отключение насоса, повышение давления, отключение охлаждающей системы каскада реакторов). На основе результатов анализа поведения системы разработаны мероприятия обслуживающего персонала для снижения негативных последствий на выход продукта и безопасность при проведении реакции в нестационарных условиях.

В разделе **Заключение** представлены основные выводы по работе.

Новизна представленной работы заключается в разработке подходов к регулированию скорости окисления кумола эксплуатации производства в стационарных и нестационарных условиях, которые имеют важное значение для создания прототипа цифрового двойника производства получения гидропероксида кумола.

Практическая значимость работы

Результаты, полученные в настоящей работе, могут быть использованы для анализа работы действующих производств окисления кумола и прогнозирования аварийных режимов.

Достоверность основных результатов работы

Достоверность результатов моделирования кинетики реакции подтверждаются согласованием расчетных и экспериментальных данных.

Достоверность результатов моделирования стационарного режима работы системы может быть подтверждена результатами опытных пробегов установки.

Достоверность результатов моделирования нестационарных режимов работы подтверждена результатами модельных опытов или анализом наблюдений при аварийных ситуациях.

Соответствие содержания автореферата содержанию и выводам диссертации

Автореферат по форме, содержанию и оформлению соответствует требованиям ВАК РФ. Содержание и выводы автореферата соответствуют изложенным материалам в тексте диссертации.

Подтверждение основных результатов диссертации в опубликованных работах

Основное содержание диссертации изложено в 2 научных статьях в рецензируемых научных журналах из перечня, рекомендованного ВАК Минобразования и науки РФ, и в 10 публикациях в сборниках материалов конференций.

Замечания

Для названия глав диссертации автором выбраны громоздкие названия. Например, для Главы 1 внутреннее содержание раздела, которое обычно носит название «Литературный обзор», вынесено в название «Современное состояние исследований в области кинетики окисления кумола и моделирования кинетики химических процессов, протекающих в промышленных условиях в нестационарном режиме». То же замечание относится к названию разделов 2.2, 3.1 «Основанная на формально-кинетической схеме модель кинетики окисления кумола, которое протекает в лабораторных условиях в нестационарном режиме», и раздела 4.3 «Кинетические закономерности окисления кумола, протекающего в промышленных условиях в нестационарном режиме, при возникновении аварийных ситуациях».

Следует отметить, что приведение в Главе 1, разделе 1.1 «Кинетика окисления кумола. Влияние массопередачи кислорода» хронологической

таблицы основных концепций при исследовании кинетики окисления кумола (Таблица 1.1) не представляется целесообразной.

В разделах Главы 1, посвященных литературному обзору по кинетике и моделированию реакции, не представлено ни одного механизма, стехиометрического уравнения и математической модели, используемых для описания процесса.

В Главе 2 на рис. 2.3-2.5 не указаны значения доверительных интервалов для экспериментальных точек.

В Главе 4 отмечается, что расчет производства для стационарных условий работы проведен для установки мощностью 300 кг/ч по кумолу, чтобы «модель кинетики была чувствительна к изменению переменных» (с. 90). Здесь непонятно, каким образом кинетическая модель, основанная на экспериментальных данных, может быть чувствительна «к объемам емкостей и массовым расходам потоков».

При оценке работы возникли следующие вопросы:

- Какой объем экспериментальных точек был использован автором в Главе 2 при моделировании кинетики на основе механистической модели? Включал ли массив эксперименты на воспроизводимость и использовал ли автор методы статистического анализа при обработке результатов?

- Проводил ли автор количественную оценку точности механистической или феноменологической моделей, например, с применением критериев Фишера и/или Пирсона?

- Как результаты моделирования на основе механистической модели (радикально-цепного механизма) (Глава 2) согласуются с результатами моделирования реакции на основе феноменологической модели (Глава 3)? Какая модель по мнению автора лучше описывает процесс?

- Какие характеристики арматуры были заложены автором в расчет при динамическом моделировании (перепад давления, проходное сечение вентиля, высота расположения вентиля)?

- Каким образом автор оценивал правильность настройки контуров регулирования?


Заключение

Диссертация Нурмуродова Тальата Шухрат Угли является законченной научно-квалификационной работой. В работе приведены научные результаты, позволяющие интерпретировать их как имеющие существенное значение при эксплуатации существующих производств. Работа соответствует паспорту специальности 1.4.14 - Кинетика и катализ. Диссертация по новизне, научной и

практической значимости полностью отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года №842). Автор работы, Нурмуродов Талгат Шухрат Угли, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14 - Кинетика и катализ.

Отзыв подготовил:

Мария Владимировна Магомедова, кандидат технических наук по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий.

 / М.В. Магомедова /

Отзыв на диссертацию заслушан и обсужден на секции Ученого совета ИНХС РАН «Нефтехимия, кинетика и катализ» 23 ноября 2023 г.

119991, ГСП-1, Москва, Ленинский проспект, 29

Тел.: +7(495)952-59-27

e-mail: tips@ips.ac.ru

Сайт: <http://www.ips.ac.ru>

Подпись М.В. Магомедовой заверяю.

Ученый секретарь ИНХС РАН, д.х.н.



 Ю.В. Костина

Вход. № 05-4843-2
« 12 » 12 2023.
подпись 