ОТЗЫВ

официального оппонента Мифтахова Эльдара Наилевича
на диссертационную работу
Фасхутдиновой Розы Ильфатовны на тему «Кинетическое моделирование и оптимизация процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия

Актуальность темы диссертации

Каталитическая изомеризация пентан-гексановой фракции является важным процессом в современной нефтеперерабатывающей отрасли. Она играет ключевую роль в производстве высокооктановых компонентов автомобильных бензинов, позволяя повысить их детонационную стойкость.

Актуальность данного процесса обусловлена ужесточением требований к химическому составу топлива на мировом рынке. Изомеризаты являются одними из наиболее рентабельных высокооктановых компонентов благодаря их сравнительно низкой себестоимости, особенно по сравнению с алкилатами. Дополнительным преимуществом является доступность сырья для их производства.

В ходе изомеризации линейные предельные углеводороды (алканы) превращаются в углеводороды разветвленной структуры, обладающие более высоким октановым числом. При этом не образуются ароматические углеводороды, что особенно важно в условиях ужесточения экологических норм и требований к снижению выбросов вредных веществ.

Особого внимания заслуживает низкотемпературная изомеризация, характеризующаяся более мягкими условиями проведения процесса. Эта технология уже давно занимает лидирующие позиции в мировой практике, поскольку низкие температуры способствуют повышению селективности и эффективности целевых реакций. В России действует более 15 установок изомеризации, из которых 12 работают по низкотемпературной технологии. Широкое распространение данной технологии связано с развитием отечественного производства катализаторов.

Несмотря на достигнутые успехи, актуальной остается задача повышения эффективности процесса. Одним из ключевых направлений является подбор оптимальных режимов проведения изомеризации. Развитие компьютерных технологий позволяет решать эту задачу путем детального моделирования, что требует глубокого понимания физико-химических основ процесса. Реакции каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции представляют собой сложные, многостадийные и обратимые процессы, что обуславливает

необходимость их детального изучения.

В связи с изложенным, диссертационная работа Фасхутдиновой Р.И. «Кинетическое моделирование и оптимизация процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции» является актуальной и востребованной. Ее результаты способствуют совершенствованию технологии получения высокооктановых компонентов автомобильных бензинов и повышению эффективности нефтепереработки.

Содержание работы и основные научные результаты

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 109 наименований и приложений. Диссертация изложена на 131 страницах машинописного текста, включает 37 рисунков, 16 таблиц и 3 приложения.

Во введении обоснована актуальность темы исследования, сформулирована цель и определены основные задачи работы. Рассмотрены новизна полученных результатов, их теоретическая и практическая значимость. Также сформулированы ключевые положения, выносимые на защиту.

В первой главе приведен обзор современного состояния и тенденций развития процесса каталитической изомеризации. Проанализированы термодинамические закономерности и механизмы каталитической изомеризации, виды катализаторов и конструктивные особенности реакторов. Проведена сравнительная оценка существующих отечественных и зарубежных математических моделей процесса каталитической изомеризации. Рассмотрены основные методы многокритериальной оптимизации.

Во второй главе подробно описан объект исследования, приведены компонентные составы сырья и продукта, материальный баланс установки, условия проведения процесса. Разработана детализированная схема химических превращений, включающая в том числе побочные реакции гидрокрекинга. Представлено математическое описание процесса, включающее в себя изменение температуры реакционной среды и изменение мольного расхода потока за счет протекания химических реакций. Проведен анализ жесткости системы дифференциальных уравнений, подобраны методы решения прямой и обратной задач. Также разработан параллельный алгоритм решения обратной задачи с целью идентификации кинетических параметров.

В третьей главе приведены результаты расчетов реакторного блока каталитической изомеризации. Определены кинетические параметры для 44 химических превращений, из которых 26 являются обратимыми. Проведена проверка термодинамической согласованности полученных параметров. Представлены сравнительные данные расчетных и промышленных

концентраций компонентов изомеризата. Графический анализ (рисунки 3.4–3.7) демонстрирует возможность моделирования не только конечных концентраций компонентов, но и их распределения в разрезе каждого реактора, а также динамику изменения температуры реакционной среды, подтверждающую адекватность модели.

В четвертой главе рассмотрены критерии оптимальности: максимизация селективности 2-метилбутана, селективности суммы 2,2-диметилбутана и 2,3-диметилбутана, степени превращения н-пентана и н-гексана, а также минимизация выхода газов. Решена задача оптимизации условий проведения процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции на основе разработанной кинетической модели на основании заданных критериев оптимальности.

Сформулированные ***выводы*** соответствуют цели и задачам, поставленным в начале диссертационной работы, а также свидетельствуют о том, что цель достигнута, а задачи решены.

Научная новизна

Научная новизна диссертационной работы Фасхутдиновой Р.И. «Кинетическое моделирование и оптимизация процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции» заключается в следующем:

1. Впервые разработана детализированная кинетическая модель процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции, учитывающая образование нежелательных побочных продуктов гидрокрекинга, на основе промышленных данных.

2. Поставлены и решены прямая и обратная задачи химической кинетики процесса каталитической изомеризации с применением разработанного соискателем асинхронного параллельного алгоритма липшицевой оптимизации.

3. На основе многокритериальной оптимизации установлены оптимальные технологические параметры промышленного процесса каталитической изомеризации, обеспечивающие увеличение выхода высокооктановых изомеров на 3–5 %.

Практическая значимость исследования

Объектом исследования в диссертационной работе Фасхутдиновой Р.И. является действующая промышленная установка каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции. Разработанная детализированная кинетическая модель позволяет прогнозировать концентрации реагентов и побочных продуктов, а также динамику температурного профиля реакционной смеси. Это особенно важно при изменении состава сырья или концентраций компонентов,

что требует корректировки технологических режимов.

Разработанная модель может быть использована для создания учебных тренажеров, предназначенных для обучения и повышения квалификации обслуживающего персонала. Кроме того, предложенная методика может стать основой для разработки отечественного программного обеспечения, предназначенного для расчета и оптимизации работы реакторов каталитической изомеризации.

Достоверность и обоснованность, полученных в диссертации научных положений и практических результатов

Достоверность и обоснованность результатов диссертационной работы подтверждаются применением фундаментальных положений физической и органической химии, а также методов математического и численного моделирования. Разработанная кинетическая модель прошла верификацию путем сравнения расчетных концентраций компонентов с промышленными данными. Дополнительным подтверждением адекватности модели является соответствие полученного температурного профиля реакционной среды экспериментальным значениям, зафиксированным в действующих промышленных установках.

Основные результаты диссертационной работы представлены на 13 международных и всероссийских научных конференциях и семинарах.

По материалам диссертационной работы опубликовано 5 научных статей, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science, RSCI.

Реализация результатов работы

Основные исследования и результаты диссертационной работы использованы в лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН при проведении научно-исследовательских работ в рамках гранта РФФИ № 20-31-90094 – «Многокритериальная оптимизация каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции». А также на кафедре математического обеспечения и суперкомпьютерных технологий института информационных технологий математики и механики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» (ННГУ).

Замечания и рекомендации по диссертационной работе

1. В работе проводится решение прямой и обратной кинетических задач для процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции, характеризующегося протеканием множества элементарных реакций. Однако отсутствует детализированное математическое описание в виде конкретной системы дифференциальных уравнений, позволяющее однозначно соотнести кинетические параметры с конкретными стадиями превращения, что затрудняет дальнейшую оценку жесткости системы, а также интерпретацию полученных результатов.

2. Из представленных результатов не ясно является ли найденное решение задачи многокритериальной оптимизации единственным и проводился ли какой-либо анализ зависимости результата от выбора начальных приближений?

3. Функционал вида (2.4) отражает среднее относительное отклонение расчетных концентраций от экспериментальных сразу по всему наблюдаемым веществам, число которых достигает 17. Насколько оправдан такой подход и не возникает ли рисков возможного недооценивания отклонений для отдельных веществ.

4. Реализация генетического алгоритма (раздел 4.2) требует дополнительного пояснения. В частности, не указаны ключевые параметры алгоритма: размер популяции, тип оператора кроссинговера, значение параметра мутации и предельное число поколений. В блок-схеме (рис. 4.1) не отражены важные этапы: процедура выборки особей на основе рассчитанных значений приспособленности и конкретный критерий завершения алгоритма.

5. Имеются мелкие замечания:

- в тексте встречаются орфографические и пунктуационные ошибки;
- наблюдается непоследовательность в обозначении чисел: в качестве разделителя целой и дробной части используются как точка, так и запятая, что нарушает единообразие оформления (например, в таблице 2.6);
- имеется несогласованность в обозначениях единиц измерения: в тексте используются как русскоязычные, так и англоязычные обозначения (например, в таблице 1.5).

Тем не менее, указанные недостатки не снижают ценности полученных результатов.

Оценка содержания диссертационной работы в целом

Таким образом, на основании полного анализа диссертационной работы считаю, что работа Фасхутдиновой Розы Ильфатовны на тему «Кинетическое моделирование и оптимизация процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции», представленная на соискание ученой степени кандидата

физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия представляет собой завершенную научно-квалификационную работу. Научная работа выполнена на высоком уровне. Содержание автореферата и опубликованных научных работ полностью отражает содержание диссертационного исследования.

Диссертация Фасхутдиновой Р.И. является законченной научно-квалификационной работой и соответствует пунктам 7, 9 и 12 паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия.

Диссертация соответствует требованиям, установленным пунктами 9-11, 13 и 14 постановления Правительства Российской Федерации «О порядке присуждения ученых степеней» от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук.

Считаю, что ее автор, Фасхутдинова Роза Ильфатовна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Официальный оппонент, профессор кафедры инструментального и прикладного программного обеспечения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет», доктор физико-математических наук по специальности
1.4.4. Физическая химия _____ Мифтахов Эльдар Наилевич

«26» марта 2025 г.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет», г. Москва
Адрес: 119454, Россия, г. Москва, Проспект Вернадского, д. 78, тел.: +7 (499) 215-65-65,
E-mail: promif@mail.ru

Даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой Фасхутдиновой Розы Ильфатовны, и их дальнейшую обработку.

_____/Мифтахов Э.Н.

Подпись руки Мифтахова Э.Н.
УДОСТОВЕРЯЮ
Начальник Управления кадров