

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мифтахова Эльдара Наилевича «Исследование физико-химических закономерностей процессов синтеза полимеров методами компьютерного и имитационного моделирования», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия

Цель работы Мифтахова Э.Н. заключается в разработке комплексного подхода по исследованию физико-химических закономерностей процессов синтеза полимеров на основе методов компьютерного и имитационного моделирования. Актуальность исследования обусловлена необходимостью в развитии инструментов модельного описания системы, позволяющих исследовать сложные процессы синтеза полимеров на уровне, недоступном для экспериментов. Кроме того, сложность молекулярной структуры полимеров и нестационарный характер протекания процессов приводят к тому, что традиционные методы исследования оказываются недостаточно эффективными.

Для достижения поставленной цели соискатель использует системный подход к моделированию, который ориентирован на кластеризацию решаемых задач и последовательное усложнение модельного описания системы. На начальном этапе исследования были разработаны методы оценки влияния внешних факторов на кинетическую активность, неоднородность активных центров, позволяющие восстановить кинетический механизм элементарных реакций. Для проведения дальнейшего эмпирического исследования были разработаны методы оценки физико-химических свойств, в рамках реализации кинетического и статистического подходов к моделированию. С целью изучения неоднородности образуемых продуктов методами по молекулярной массе, размер-составу и композиционному составу были разработаны методы и алгоритмы, позволяющие проводить глубокое изучение свойств продукта в периодическом и непрерывном режимах проведения процесса. С использованием разработанных подходов и методов была разработана информационная система, предназначенная для комплексного исследования, апробация которой позволила получить ранее неизвестные физико-химические закономерности, нашедшие отражение в основных выводах к проделанной работе. В частности, для процесса полимеризации изопрена в присутствии неодимовой каталитической системы для мольного состава реакций и найдены значения неизвестных кинетических параметров. Апробация имитационного подхода для процесса получения полиизопрена в присутствии каталитической системы на основе сольвата хлорида гадолиния позволило идентифицировать наличие не менее 3 типов активных центров, инициирующих процесс полимеризации. Апробация методики для продукта полимеризации изопрена в присутствии неодимового катализатора мольного состава $\text{NdCl}_3/\text{Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_3$ /пиперилен показала, что с увеличением числа реакторов наблюдается устойчивый рост усредненных молекулярных характеристик при сохранении ширины молекулярно-массового распределения получаемого продукта. В результате решения обратных задач химической кинетики для процесса сополимеризации бутадиена со стиролом были численно

определены кинетические параметры, характеризующие скорости реакций обрыва цепи по механизмам рекомбинации и диспропорционирования.

Следует отметить, что разработанная методология ориентирована на унифицированный характер модельного описания системы, а интегрированные технологии по использованию облачных сетевых ресурсов позволяют значительно расширить перечень изучаемых процессов, которые представляют собой механизм параллельных и последовательных элементарных реакций с участием активных частиц.

В ходе прочтения возникли следующие замечания по тексту автореферата:

1. Чем обусловлены допущения, принятые при проведении вычислительных экспериментов для оценки гидродинамического влияния, оказываемого непрерывным режимом организации производства на молекулярные характеристики получаемого продукта (стр. 30)?

2. Не указаны мольные концентрации реагентов для процесса сополимеризации бутадиена со стиролом. Вместо этого соискатель руководствуется массовой нагрузкой, характерной для крупнотоннажного производства.

Оценивая диссертационную работу Мифтахова Эльдара Наилевича, можно заключить, что по актуальности решенных задач, уровню проведенного исследования, новизне и практической значимости полученных результатов она соответствует требованиям, определенным в «Положении о порядке присуждения ученых степеней» (утвержден постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г.), а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Системотехника» ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет»



Надир Низамович Зиятдинов

Докторская диссертация защищена по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий

Даю согласие на обработку персональных данных. Почтовый адрес: 420015, г. Казань, ул. К. Маркса, 68, тел:8(843)231-41-94, e-mail: nnziat@yandex.ru

